VNIVERSITAT DE VALÈNCIA

Guía Docente
34221 Química de la Coordinación y Química Organometálica

FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	34221
Nombre	Química de la Coordinación y Química Organometálica
Ciclo	Grado
Créditos ECTS	4.5
Curso académico	2017 - 2018

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1108 - Grado de Química	Facultad de Química	4	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
1108 - Grado de Química	16 - Química Inorgánica Aplicada	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
ROMERO MARTINEZ, FRANCISCO MANUEL	320 - Química Inorgánica

RESUMEN

El próposito de esta asignatura optativa es completar los conocimientos sobre química de coordinación y organometálica adquiridos el curso anterior en la asignatura obligatoria de Química Inorgánica III. El estudio se centra en la estructura electrónica de los complejos de los metales de transición, tanto en sus aspectos teóricos (teoría del campo cristalino) como experimentales (espectros de absorción, propiedades magnéticas y espectros de resonancia paramagnética electrónica) así como en sus espectros vibracionales (infrarrojo y Raman).

CONOCIMIENTOS PREVIOS

Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

Se recomienda haber cursado y superado satisfactoriamente todas las asignaturas de los cursos anteriores.

COMPETENCIAS

1108 - Grado de Química

- Adquirir una sensibilidad permanente por la calidad y el medio ambiente, el desarrollo sostenible y la prevención de riesgos laborales.
- Interpretar la variación de las propiedades características de los elementos químicos según la Tabla Periódica.
- Demostrar que conoce las características y comportamiento de los diferentes estados de la materia y las teorías empleadas para describirlos.
- Demostrar que conoce los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas.
- Demostrar que reconoce los elementos químicos y sus compuestos: Obtención, estructura, reactividad, propiedades y aplicaciones.
- Relacionar las propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales.
- Demostrar que conoce la estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos.
- Manipular con seguridad los productos químicos.
- Llevar a cabo procedimientos experimentales estándar implicados en trabajos analíticos y sintéticos, en relación con sistemas orgánicos e inorgánicos.
- Relacionar la Química con otras disciplinas.
- Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.
- Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.
- Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.
- Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.
- Expresarse correctamente, tanto en forma oral como escrita, en cualquiera de las lenguas oficiales de la Comunidad Valenciana.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Comprensión y asimilación de todos los conceptos introducidos en cada uno de los temas del programa que se describe con detalle mas abajo. Familiarización con los resultados de los cálculos teóricos de la estructura electrónica de los iones libres de los metales de transición y de sus complejos. Capacidad para aplicar los conocimientos adquiridos para interpretar los datos experimentales de cualquiera de las técnicas estudiadas de un complejo desconocido previamente y de predecir las propiedades espectrales y magnéticas de un complejo dado.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Estructura electrónica de los átomos e iones libres de los metales de transición

1.1.-Aproximación monoelectrónica: configuraciones electrónicas.
1.2.- Repulsión interelectrónica: Términos energéticos. Cálculo de los términos de una configuración dx: método de factorización de spin. Energía relativa de los términos: parámetros de Racah.
1.3.- Acoplamiento spin-órbita: niveles de energía.
1.4.- Efecto de un campo magnético externo sobre los niveles de energía de un ión metálico de transición: propiedades magnéticas

2. Estructura electrónica de los complejos de los metales de transición

2.1.- Teoría del campo cristalino. Complejos octaédricos, tetraédricos y cuadrados.
2.2.- Aproximación de campo fuerte: configuraciones electrónicas. Comparación con la teoría de orbitales moleculares.
2.3.- Aproximación de campo débil: términos energéticos. Diagramas de Orgel. Diagramas de Tanabe y Sugano.
2.4.- Acoplamiento spin-órbita: niveles de energía.

3. Espectros electrónicos

3.1.- Estados excitados y espectros de absorción electrónicos. Transiciones d-d. Características de los espectros de absorción en el visible: número, posición, anchura e intensidad de las bandas de absorción.
3.2.- Intensidad de las bandas de absorción. Reglas de selección: Transiciones de spin permitido y de spin prohibido. Regla de selección de Laporte.
3.3.- Transiciones electrónicas de spin permitido. Análisis del espectro de absorción en el visible de los complejos octaédricos y tetraédricos de los metales de transición. Transiciones de spin prohibido: espectro de absorción del ión [Mn(H2O)6]2+.

4. Propiedades magnéticas

4.1.- Estudio comparativo del momento magnético de los complejos y de los iones metálicos libres. Fórmula de spin solo: número de electrones desapareados.
4.2.- Propiedades magnéticas de los complejos con simetría cúbica (octaédricos y tetraédricos). Efecto del campo cristalino sobre el momento magnético de un ión libre: bloqueo parcial o total de la contribución orbital al momento magnético. Términos A, E y T.
4.3.- Acoplamiento spin órbita y propiedades magnéticas. Términos A2 y E : acoplamiento spin-órbita de segundo orden y contribución orbital al momento magnético. Términos T : Diagramas de Kotani.
4.4.- Propiedades magnéticas de complejos con menor simetría (simetría axial). Anisotropía magnética.
4.5.- Introducción

5. Introducción a la química organometálica

5.1.- Ligandos en química organometálica. Carbonilos. Ligandos similares al CO. Complejos de hidruro y dihidrógeno. Otras moléculas pequeñas.
5.2.- Enlace entre átomos metálicos y sistemas orgánicos Sistemas lineales. Sistemas cíclicos.
5.3.- Complejos conteniendo enlaces metal-carbono sencillos, dobles y triples: Alquilos y complejos similares. Carbenos y carbinos.
5.4.- Compuestos con enlaces múltiple metal-metal.

6. Reactividad de los compuestos organometálicos

6.1.- Reacciones que implican pérdida o ganancia de ligandos. Reacciones de adición oxidante y eliminación reductora.
6.2.- Reacciones de modificación de ligandos coordinados. Reacciones de inserción. Reacciones de adición y eliminación nucleofílica y electrofílica.
6.3.- Reacciones de radicales libres con complejos metálicos.

7. Aplicaciones en catálisis

7.1.- Distintos tipos de catálisis mediante compuestos organometálicos.
7.2.- Procesos catalíticos más importantes desde el punto de vista industrial.
7.3.- Reacciones de acoplamiento.
7.4.- Catálisis asimétrica.
7.5.- Aplicaciones en síntesis orgánica.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	38,00	100
Tutorías regladas	7,00	100
Estudio y trabajo autónomo	47,50	0
Preparación de actividades de evaluación	20,00	0
TOTAL	**112,50**	

METODOLOGÍA DOCENTE

La asignatura está planteada para que el estudiante sea el protagonista de su propio aprendizaje y se estructura de la siguiente manera:

Clases expositivas.- En dichas clases el profesor dará una visión general del tema objeto de estudio haciendo especial hincapié en los aspectos nuevos o de especial complejidad. También se llevará a cabo la aplicación específica de los conocimientos que los estudiantes hayan adquirido mediante la resolución de cuestiones y problemas prácticos que los alumnos hayan trabajado previamente. Lógicamente, estas clases se complementan con el tiempo de estudio personal del alumno.

Tutorías grupales.- Los alumnos acudirán a ellas en grupos más reducidos. En ellas, el profesor puede proponer diversas actividades, como resolución de cuestiones o problemas planteados, resolución de dudas, planteamiento de discusiones, etc., que podrán contribuir a la calificación final, según estime el profesor.

EVALUACIÓN

Los conocimientos adquiridos a lo largo del curso se evaluarán al final del mismo mediante un examen, en la fecha que establezca la Facultad. Para los alumnos que lo deseen (opción A) éste será el único procedimiento de calificación. Para aprobar se exigirá una calificación mínima de 5.

Adicionalmente y con carácter voluntario se realizará una evaluación parcial que comprenderá la primera mitad del programa. Los alumnos que la superen (nota de 5 o superior) no tendrán que examinarse al final de los temas ya aprobados. La nota final será la media aritmética de las calificaciones obtenidas. Para aprobar será necesario que dicha nota sea igual o mayor que 5 (opción B). Los alumnos que no superen la evaluación parcial o que aspiren a mejorar los resultados obtenidos serán calificados como se indica en la opción A. La calificación de la segunda convocatoria se ajustará también a la opción A.

REFERENCIAS

Básicas

- Kettle,S. F. A. Physical Inorganic Chemistry. A Coordination Chemistry Approach. Spektrum Academic Publishers, Oxford, 1996. ISBN: 978-0-7167-4514-3
- Ribas Gispert,J. Química de Coordinación, Edicions de la Universitat de Barcelona/Ediciones Omega, 2000. ISBN: 9788428212106
  Existe una versión más reciente en inglés:
  Ribas Gispert,J. Coordination Chemistry, Wiley-VCH, 2008. ISBN-13 978-3-527-31802-5
- Crabtree,R.H.; Peris,E. Química Organometálica de los Metales de Transición, Castellón, Biblioteca Univ. Jaume I, 1997. ISBN: 84-8021-164-2
- Elschenbroich,C. Organometallics, 3rd. Ed., Ed. WILEY-VCH, 2005.ISBN: 3-527-29390-6

Complementarias

- Gerloch,M. Orbitals, Terms and States, 1ª Ed. Wiley, 1986. ISBN-13: 978-0471909354
- Figgis,B. N.; Hitchman, M. A. Ligand field theory and its applications, New York: Wiley-VCH, 2000. ISBN 0.471-31776-4
- Braterman,P.S. Spectra and Bonding in Metal Carbonyls. Part B: Spectra and Their Interpretation, en Mingos, D. M. P. (ed), Structure and Bonding, Vol 26, p. 1-42, Springer, 1976.
- Crabtree,R. H. The Organometallic Chemistry of the Transition Metals, 5th Ed., Ed. Wiley Interscience John Wiley and Sons, 2009.ISBN: 978-0-470-25762-3
- Astruc,D. Química Organometálica, !ª Ed. Barcelona: Ed. Reverté, 2003. ISBN: 84-291-7007-3