VNIVERSITAT DE VALÈNCIA

Guia Docent
36466 Química de Coordinació

FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura

Codi	36466
Nom	Química de Coordinació
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2020 - 2021

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química V2-2018	Facultat de Química	4	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química V2-2018	16 - Química Inorgànica Aplicada	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
LLORET PASTOR, FRANCISCO	320 - Química Inorgànica

RESUM

El propòsit d'aquesta assignatura optativa és completar elsconeixements sobre química de coordinació adquirits el curs anterior en l'assignatura obligatòria de Química Inorgànica III. L'estudies centra en l'estructuraelectrònicadels complexos delsmetalls de transició, tant en elsseusaspectesteòrics (teoria del camp cristal·lí) comexperimentals (espectresd'absorció, propietatsmagnètiques i espectres de ressonància paramagnètica electrònica) aixícom en els seus espectres vibracionales (infraroig i Raman).

CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

Es recomana haver cursat i superat satisfactòriament totes les assignatures dels cursos anteriors.

COMPETÈNCIES

1110 - Grau de Química V2-2018

- Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals.
- Interpretar la variació de les propietats característiques dels elements químics segons la taula periòdica.
- Demostrar que coneix les característiques i el comportament dels diferents estats de la matèria i les teories usades per descriure'ls.
- Demostrar que coneix els principis de la mecànica quàntica i l'aplicació a la descripció de l'estructura i de les propietats d'àtoms i molècules.
- Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.
- Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres materials.
- Manipular amb seguretat els productes químics.
- Dur a terme procediments experimentals estàndards interessats en treballs analítics i sintètics, en relació amb sistemes orgànics i inorgànics.
- Relacionar la química amb altres disciplines.
- Que els estudiants sàpien aplicar els seus coneixements al seu treball o vocació d'una forma professional i posseïsquen les competències que solen demostrar-se per mitjà de l'elaboració i defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreplegar i interpretar dades rellevants (normalment dins de la seua àrea d'estudi) per emetre judicis que incloguen una reflexió sobre temes rellevants d'índole social, científica o ètica.
- Que els estudiants puguen transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.
- Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.

RESULTATS DE L'APRENENTATGE

L'apartat anterior recull les competències contingudes en el document VERIFICA. En aquesta assignatura s'aborden part dels resultats d'aprenentatge de la matèria Química Inorgánica Aplicada que permeten adquirir, tant coneixements específics de Química, com habilitats i competències cognitives i competències generals recomanades per l'EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) per al *Chemistry* Eurobachelor® *Label.* A la següent taula es relacionen els resultats d'aprenentatge adquirits en l'assignatura de Química de Coordinació relacionats amb les competències del grau en Química.

CONEIXEMENTS ESPECÍFICS DE QUÍMICA	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura Química de Coordinació que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Principals aspectes de la terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.	Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.(CE1)
Els principals tipus de reaccions químiques i les principals característiques associades a elles.	Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.(CE4)
Les principals tècniques de la recerca d'estructures incloent l'espectroscòpia.	Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.(CE7). Demostrar que coneix l'estructura i la reactivitat de les classes principals de biomolècules i la química dels processos biològics principals.(CE12). Manejar la instrumentació química utilitzada en les diferents àrees de la Química.(CE19). Demostrar que coneix els principis, els procediments i les tècniques per a la determinació, la separació, la identificació i la caracterització de compostos químics. (CE8)
Els principis de la mecànica quàntica i la seva aplicació a la descripció de	Demostrar que coneix els principis de la mecànica quàntica i l'aplicació a la descripció de l'estructura i de les propietats

l'estructura i propietats dels àtoms i molècules.	d'àtoms i molècules.(CE5).
La cinètica del canvi químic, inclosa la catàlisi; la interpretació mecànica de les reaccions químiques.	Demostrar que coneix els principis de termodinàmica i cinètica i les seues aplicacions en química.(CE6).
Les propietats característiques dels elements i els seus compostos, incloent les relacions i tendències dins de la taula periòdica.	Interpretar la variació de les propietats característiques dels elements químics segons la taula periòdica.(CE2). Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.(CE7).
Els trets estructurals dels elements químics i els seus compostos incloent l'estereoquímica.	Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.(CE7). Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres materials.(CE11). Demostrar que coneix l'estructura i la reactivitat de les classes principals de biomolècules i la química dels processos biològics principals.(CE12).
Les propietats dels compostos alifàtics, aromàtics, heterocíclics i organometàl·lics.	Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.(CE4) Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.(CE7). Demostrar que coneix els principis, els procediments i les tècniques per a la determinació, la separació, la identificació i la caracterització de compostos químics. (CE8). Demostrar que coneix l'estructura i la reactivitat de les classes principals de biomolècules i la química dels processos biològics principals.(CE12).

COMPETÈNCIES I HABILITATS COGNITIVES	
El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:	
	Competències de l'assignatura Química de Coordinació que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®
Capacitat per a demostrar coneixement i comprensió dels fets, conceptes, principis i teories fonamentals relacionades amb els temes esmentats anteriorment.	Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.(CE13).
Capacitat per a aplicar aquest coneixement i comprensió a la solució de problemes comuns qualitatius i quantitatius.	Resoldre problemes qualitatius i quantitatius segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15). Comprendre els aspectes qualitatius i quantitatius dels problemes químics.(CE24).

En finalitzar l'assignatura "Química de Coordinació" el/la estudiant ha de ser capaç de:

Comprensió i assimilació de tots els conceptes introduïts en cada un dels temes del programa que es descriu amb detall mes baix. Familiarització amb els resultats dels càlculs teòrics de l'estructura electrónica dels ions lliures dels metalls de transició i dels seus complexos. Capacitat per a aplicar els coneixements adquirits per a interpretar les dades experimentals de qualsevol de les tècniques estudiades d'un complex desconegut prèviament i de predir les propietats espectrals i magnètiques d'un complex donat.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Estructura electrònica dels àtoms i ions lliures dels metalls de transició.

1.1.-Aproximació monoelectrónica: configuracions electròniques.
1.2.- Repulsió interelectrònica: Termes energètics. Càlcul dels termes duna configuració dn: mètode de factorització despí. Energia relativa dels termes: paràmetres de Racah.
1.3.- Acoblament espí-òrbita: nivells denergia.
1.4.- Efecte dun camp magnètic extern sobre els nivells denergia dun ió metàl·lic de transició: propietats magnètiques

2. Estructura electrònica dels complexos dels metalls de transició

2.1.- Teoria del camp dels lligands. Complexos octaèdrics, tetraèdrics i quadrats.
2.2.- Aproximació de camp fort: configuracions electròniques. Comparació amb la teoria dorbitals moleculars.
2.3.- Aproximació de camp feble: termes energètics. Diagrames dOrgel. Diagrames de Tanabe i Sugano.
2.4.- Acoblamentt espí-òrbita: nivells denergia.

3. Espectres electrònics

3.1.- Estats excitats i espectres electrònics. Transicions d-d. Característiques dels espectres dabsorció en el visible: número, posició, amplària i intensitat de les bandes dabsorció.
3.2.- Intensitat de les bandes dabsorció. Regles de selecció: Transicions despí permés i despí prohibit. Regla de selecció de Laporte.
3.3.- Transicions electròniques despí permés. Anàlisi de lespectre dabsorció en el visible dels complexos octaèdrics i tetraèdrics dels metalls de transició. Transicions despí prohibit.

4. Propietats magnètiques

4.1.- Imanació i Susceptibilitat Magnètica. Diamagnetisme i paramagnetisme. Fórmula de van Vleck. Paramagnetisme independent de la temperatura.
4.2.- Estudi comparatiu del moment magnètic dels complexos i dels ions metàl·lics lliures. Fórmula despí només: nombre delectrons desaparellats.
4.3.- Propietats magnètiques dels complexos amb simetria cúbica (octaèdrics i tetraèdrics). Efecte del camp cristal·lí sobre el moment magnètic dun ió lliure: bloqueig parcial o total de la contribució orbital al moment magnètic. Termes A, E i T. Transició despí.
4.4.- Acoblament espí-òrbita i propietats magnètiques. Termes A2 i E : Acoblament espí-òrbita de segon ordre i contribució orbital al moment magnètic. Termes T.
4.5.- Propietats magnètiques de complexos amb menor simetria (simetria axial). Anisotropia magnètica.
4.6.- Introducció a lespectroscòpia de ressonància paramagnètica electrònica (EPR). Complexos de Cu(II).
4.7.- Interaccions de bescanvi magnétic isotròpic: Ferromagnetisme i antiferromagnetisme. Llei de susceptibilitat magnètica per a complexos polinuclears. Models orbitals de les interaccions isotrópiques.
4.8.- Ordre Magnètic: Ferromagnetic, antiferromagnetic, ferrimagnetic i feble ferromagnetisme. Lenta relaxació de limanació en complexos mono i polinuclears.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	51,00	100
Tutories reglades	9,00	100
Estudi i treball autònom	47,50	0
Preparació d'activitats d'avaluació	20,00	0
TOTAL	**127,50**	

METODOLOGIA DOCENT

Classes expositives. En les dites classes el professor donarà una visió general del tema objecte d'estudifent especial insistència en els aspectes nous o d'especial complexitat. També es durà a terme l'aplicació específica dels coneixements que els estudiants hagen adquirit per mitjà de la resolució de qüestions i problemes pràctics que els alumnes hagen treballat prèviament. Lògicament, estes clases es complementen amb el temps d'estudi personal.

Tutories grupals. Els alumnes acudiran a elles en grups reduïts En elles, el professor pot proposar diverses activitats, com resolució de qüestions o problemes plantejats, resolució de dubtes, plantejament de discussions, etc., que podran contribuir a la qualificació final ho considera el professor.

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants tindrà en compte tots els aspectes exposats a l'apartat de metodologia d'aquesta guia docent. Els coneixements adquirits al llarg del curs s'avaluaran al final del mateix mitjançant un examen, en la data que estableixi la Facultat. Per aprovar s'exigirà una qualificació mínima de 5.
La qualificació de la segona convocatòria s'ajustarà al mateix criteri de la primera convocatòria.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- S. F. A. Kettle, Physical Inorganic Chemistry. A Coordination Chemistry Approach, Spektrum Academic Publishers, Oxford, 1996.
- J. Ribas Gispert, Química de Coordinación, Edicions de la Universitat de Barcelona/Ediciones Omega, 2000 (existe una versión más reciente en inglés: Coordination Chemistry, Wiley-VCH, 2008).

Complementàries

- M. Gerloch, Orbitals, Terms and States, Wiley, 1986.
- B. N. Figgis and M. A. Hitchman, Ligand field theory and its applications, Wiley-VCH, 2000.
- P.S. Braterman, Spectra and Bonding in Metal Carbonyls. Part B: Spectra and Their Interpretation, en D. M. P. Mingos (ed), Structure and Bonding, Vol 26, p. 1-42, Springer, 1976.

ADDENDA COVID-19

Aquesta addenda només s'activarà si la situació sanitària ho requereix i previ acord del Consell de Govern

Continguts

1.- Es mantenen els continguts inicialment recollits a la guia docent.

Volum de treball i planificació temporal de la docència

Pel que fa a el volum de treball:

1.- Es mantenen les diferents activitats descrites a la Guia Docent amb la dedicació prevista.

Pel que fa a la planificació temporal de la docència

1.- El material per al seguiment de les classes de teoria / tutories / seminaris d'aula permet continuar amb la planificació temporal docent tant en dies com en horari, tant si la docència és presencial a l'aula com si no ho és.

Metodologia docent

Assignatures de teoria:

Situació de mínima presencialitat: A les classes de teoria i de tutories l'ocupació serà, com a màxim, del 30% de la seva ocupació habitual. La docència serà online. Els estudiants que tinguen sessió de laboratori abans o després de les classes de teoria, i que el temps per a desplaçar-se siga superior al temps establert en els horaris, podran seguir la classe presencialment en l'aula assignada en els horaris. Quan hi haja alumnes en eixa situació, les classes s'impartiran per videoconferència síncrona a l'aula del grup.

Situació de màxima presencialitat: A les classes de teoria i de tutories l'ocupació respectarà les restriccions sanitàries que limiten l'aforament de les aules. En funció de la capacitat de l'aula i del nombre d'estudiants matriculats pot ser necessari que part dels estudiants hagen de seguir les classes de manera síncrona. De plantejar-se aquesta situació, els estudiants assistiran a l'aula del grup per torns rotatius setmanals (preferentment per ordre alfabètic), de manera que s'assegure que el percentatge de presencialitat de tot l'estudiantat matriculat en l'assignatura és el mateix.

Situació de confinament: Si per raons sanitàries no es puguera continuar amb la docència híbrida afectant total o parcialment a les classes de l'assignatura, aquestes seran substituïdes per sessions no presencials síncrones seguint els horaris establerts i utilitzant les eines de l'aula virtual.

La metodologia utilitzada per les classes no presencials serà:

1. De forma síncrona mitjançant les eines de l'aula virtual (preferiblement Teams)
2. Resolució d'exercicis i qüestionaris

En totes les assignatures

Si es produeix un tancament de les instal·lacions per raons sanitàries que afecte total o parcialment a les classes de l'assignatura, aquestes seran substituïdes per sessions no presencials seguint els horaris establerts i utilitzant les eines de l'aula virtual.

En el cas d'alumnes confinats en casa degut a la COVID, se'ls assegurarà la docència on-line a través del Teams.

Avaluació

S'elimina la possibilitat d'avaluació únicament amb examen, excepte en casos excepcionals degudamente justificats.

Es realitzaran una sèrie d'activitats per a l'alumnat (exercicis, qüestionaris, treballs a desenvolupar) que se'ls entregarà al principi de la setmana i l'alumne els entregarà acabats al final de la mateixa per a la seua correcció i avaluació. Aquesta avaluació contínua tindrà un pes important per a l'avaluació final: un 25% de la nota total per a aquells alumnes que participen en totes aquestes activitats. En cas de participar parcialment, l'avaluació serà proporcional a la participació (aquesta avaluació no estava contemplada en la guia inicial).

Es realitzarà una prova escrita (tipus examen tradicional) amb un temps límit de duració, és a dir, l'examen consistirà en una sèrie de qüestions a desenvolupar en un temps limitat. Aquest examen comptarà un 75% de la nota total. Serà un requisit l'aprovar aquest examen amb una nota igual o superior a 5 sobre 10.

Si es produeix un tancament de les instal·lacions per raons sanitàries que afecte el desenvolupament d'alguna activitat avaluable presencial de l'assignatura aquesta serà substituïda per una prova de naturalesa similar que es realitzarà en modalitat virtual utilitzant les eines informàtiques llicenciades per la Universitat de València. La contribució de cada activitat avaluable a la qualificació final de l'assignatura romandrà invariable, segons el que estableix aquesta guia.

Bibliografia

2.- Es manté la bibliografia recomanada a la Guia Docent si és accessible i es complementa amb apunts, diapositives i problemes pujats a Aula Virtual com a material de l'assignatura.