

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	36466
Nombre	Química de Coordinación
Ciclo	Grado
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2021 - 2022

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1110 - Grado de Química V2-2018	Facultad de Química	4	Segundo cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
1110 - Grado de Química V2-2018	16 - Química Inorgánica Aplicada	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
LLORET PASTOR, FRANCISCO	320 - Química Inorgánica

RESUMEN

El propósito de esta asignatura optativa es completar los conocimientos sobre química de coordinación 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

1110 - Grado de Química V2-2018

- 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.
- 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**

El apartado anterior recoge las competencias contenidas en el documento VERIFICA. En esta asignatura se abordan parte de los resultados de aprendizaje de la materia Química Inorgánica Aplicada que permiten adquirir, tanto conocimientos específicos de Química, como habilidades y competencias cognitivas y competencias generales recomendadas por la EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) for the Chemistry Eurobachelor® Label. En la siguiente tabla se relacionan los resultados de aprendizaje adquiridos en la asignatura de Química de Coordinación relacionados con las competencias del grado en Química.

CONOCIMIENTOS ESPECÍFICOS DE QUÍMICA	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
	Competencias de la asignatura Química de Coordinación que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHELOR®
Principales aspectos de la terminología química, nomenclatura, convenios y unidades.	Demostrar que conoce los aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades. (CE1)
Los principales tipos de reacciones químicas y las principales características asociadas a ellas.	Demostrar que conoce los tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas. (CE4)
Las principales técnicas de la investigación de estructuras incluyendo la espectroscopia.	Demostrar que reconoce los elementos químicos y sus compuestos: Obtención, estructura, reactividad, propiedades y aplicaciones (CE7). Demostrar que conoce la estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos (CE12). Manejar la instrumentación química utilizada en las distintas áreas de la Química (CE19). Demostrar que conoce los principios, procedimientos y técnicas para la determinación, separación, identificación y caracterización de compuestos químicos. (CE8)



Los principios de la mecánica cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de los átomos y moléculas.	Demostrar que conoce los principios de la Mecánica Cuántica y su aplicación a la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas (CE5).
La cinética del cambio químico, incluida la catálisis; la interpretación mecánica de las reacciones químicas.	Demostrar que conoce los principios de termodinámica y cinética y sus aplicaciones en Química (CE6).
Las propiedades características de los elementos y sus compuestos, incluyendo las relaciones y tendencias dentro de la tabla periódica.	Interpretar la variación de las propiedades características de los elementos químicos según la Tabla Periódica (CE2). Demostrar que reconoce los elementos químicos y sus compuestos: Obtención, estructura, reactividad, propiedades y aplicaciones (CE7).
Los rasgos estructurales de los elementos químicos y sus compuestos incluyendo la estereoquímica.	Demostrar que reconoce los elementos químicos y sus compuestos: Obtención, estructura, reactividad, propiedades y aplicaciones (CE7). Relacionar las propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales (CE11). La estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales procesos biológicos (CE12).
Las propiedades de los compuestos alifáticos, aromáticos, heterocíclicos y organometálicos.	Demostrar que conoce los tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas. (CE4) Demostrar que reconoce los elementos químicos y sus compuestos: Obtención, estructura, reactividad, propiedades y aplicaciones (CE7). Demostrar que conoce los principios, procedimientos y técnicas para la determinación, separación, identificación y caracterización de compuestos químicos. (CE8). La estructura y reactividad de las principales clases de biomoléculas y la química de los principales



	procesos biológicos (CE12).
COMPETENCIAS Y HABILIDADES COGNITIVAS	
El proceso de aprendizaje debe permitir a los titulados de grado demostrar:	
	Competencias del título de grado que contemplan los resultados de aprendizaje EUROBACHLEOR®
Capacidad para demostrar conocimiento y comprensión de los hechos, conceptos, principios y teorías fundamentales relacionadas con los temas mencionados anteriormente.	Demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química (CE13).
Capacidad para aplicar dicho conocimiento y comprensión a la solución de problemas comunes cualitativos y cuantitativos.	Resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados (CE14). Reconocer y analizar nuevos problemas y planear estrategias para solucionarlos (CE15). Comprender los aspectos cualitativos y cuantitativos de los problemas químicos (CE24).

Al finalizar la asignatura de Química de Coordinación, el/la estudiante ha de ser capaz de:

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 monolectrónica: 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.

4. Propiedades magnéticas

- 4.1.- Imanación y Susceptibilidad Magnética. Diamagnetismo y paramagnetismo. Fórmula de van Vleck. Paramagnetismo independiente de la temperatura.
- 4.2.- Estudio comparativo del momento magnético de los complejos y de los iones metálicos libres. Fórmula de spin solo: número de electrones desapareados.
- 4.3.- 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.
- 4.4.- 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.
- 4.5.- Propiedades magnéticas de complejos con menor simetría (simetría axial). Anisotropía magnética.
- 4.6.- Introducción a la espectroscopia de resonancia paramagnética electrónica (EPR). Complejos de Cu(II).
- 4.7.- Interacciones de canje magnético isotrópico: Ferromagnetismo y antiferromagnetismo. Ley de susceptibilidad magnética para complejos polinucleares. Modelos orbitales de las interacciones isotrópicas.



4.8.- Orden Magnético: Ferromagnético, antiferromagnético, ferrimagnético y débil ferromagnetismo. Lenta relajación de la imanación en complejos mono i polinucleares.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	51,00	100
Tutorías regladas	9,00	100
Estudio y trabajo autónomo	47,50	0
Preparación de actividades de evaluación	20,00	0
TOTAL	127,50	

METODOLOGÍA DOCENTE

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

La evaluación del aprendizaje de los estudiantes tendrá en cuenta todos los aspectos expuestos en el apartado de metodología de esta guía docente. 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 aprobar se exigirá una calificación mínima de 5.

La calificación de la segunda convocatoria se ajustará al mismo criterio de la primera convocatoria.

REFERENCIAS

Básicas

- 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).

Complementarias

- 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.

ADENDA COVID-19

Esta adenda solo se activará si la situación sanitaria lo requiere y previo acuerdo del Consejo de Gobierno

Contenidos

1.- *Se mantienen los contenidos inicialmente recogidos en la guía docente.*

Volumen de trabajo y planificación temporal de la docencia

Respecto al volumen de trabajo:

1.- *Se mantienen las distintas actividades descritas en la Guía Docente con la dedicación prevista.*

Respecto a la planificación temporal de la docencia

1.- *El material para el seguimiento de las clases de teoría/tutorías/seminarios de aula permite continuar con la planificación temporal docente tanto en días como en horario, tanto si la docencia es presencial en el aula como si no lo es.*

Metodología docente

Situación de mínima presencialidad: En las clases de teoría y de tutorías la ocupación será, como máximo, del 30% de su ocupación habitual. La docencia será en línea. Los estudiantes que tengan sesión de laboratorio antes o después de las clases de teoría, y que el tiempo para desplazarse sea superior al tiempo establecido en los horarios, podrán seguir la clase presencialmente en el aula asignada en los horarios. Cuando haya alumnos en esa situación, las clases se impartirán por videoconferencia síncrona en el aula del grupo.



Situación de máxima presencialidad: En las clases de teoría y de tutorías la ocupación respetará las restricciones sanitarias que limitan el aforo de las aulas. En función de la capacidad del aula y del número de estudiantes matriculados puede ser necesario que parte de los estudiantes tengan que seguir las clases de manera síncrona. De plantearse esta situación, los estudiantes asistirán en el aula del grupo por turnos rotativos semanales (preferentemente por orden alfabético), de forma que se asegure que el porcentaje de presencialidad de todo el estudiantado matriculado en la asignatura es el mismo.

Situación de confinamiento: Si por razones sanitarias no se pudiera continuar con la docencia híbrida afectando total o parcialmente en las clases de la asignatura, estas serán sustituidas por sesiones no presenciales síncronas siguiendo los horarios establecidos y utilizando las herramientas del aula virtual.

La metodología utilizada para las clases no presenciales será:

1. De forma síncrona mediante las herramientas del aula virtual (preferiblemente Teams)
3. Resolución de ejercicios y cuestionarios

En todas las asignaturas

Si se produce un cierre de las instalaciones por razones sanitarias que afecte total o parcialmente a las clases de la asignatura, éstas serán sustituidas por sesiones no presenciales siguiendo los horarios establecidos y utilizando las herramientas del aula virtual.

En el caso de alumnos confinados en casa debido al COVID, se les asegurará la docencia on-line a través del Teams.

Evaluación

Se elimina la posibilidad de evaluación únicamente con examen, excepto en casos excepcionales debidamente justificados.

Se realizarán una serie de actividades para el alumnado (ejercicios, cuestionarios, trabajos a desarrollar) que se les entregará al principio de la semana y el alumno los entregará terminados al final de la misma para su corrección y evaluación. Esta evaluación continua tendrá un peso importante para la evaluación final: un 25 % de la nota total para aquellos alumnos que participen en todas estas actividades. En caso de participar parcialmente, la evaluación será proporcional a la participación (esta evaluación no estaba contemplada en la guía inicial).

Se realizará una prueba escrita (tipo examen tradicional) con un tiempo límite de duración, es decir, el examen consistirá en una serie de cuestiones a desarrollar en un tiempo limitado, el profesor estará a conectado a través del aula virtual y con conexión a videoconferencia durante el desarrollo del mismo para aclarar cualquier duda. La entrega se realizará mediante escaneado o foto y se enviará por correo electrónico al profesor. Para ello, los estudiantes dispondrán de unos minutos desde que se termine el examen. Este examen contará un 75 % de la nota total. Será un requisito el aprobar este examen con una nota igual o superior a 5 sobre 10.



Si se produce un cierre de las instalaciones por razones sanitarias que afecte al desarrollo de alguna actividad evaluable presencial de la asignatura ésta será sustituida por una prueba de naturaleza similar que se realizará en modalidad virtual utilizando las herramientas informáticas licenciadas por la Universitat de València. La contribución de cada actividad evaluable a la calificación final de la asignatura permanecerá invariable, según lo establecido en esta guía.

Bibliografía

2.- Se mantiene la bibliografía recomendada en la Guía Docente pues es accesible y se complementa con apuntes, diapositivas y problemas subidos a Aula Virtual como material de la asignatura.