

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

Código	36466
Nombre	Química de Coordinación
Ciclo	Grado
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2022 - 2023

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 monoeléctronica: 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 A_2 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: Ferromagnetico, antiferromagnetico, ferrimagnetico 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.