

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	36466
Nom	Química de Coordinació
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

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 els coneixements sobre química de coordinació adquirits el curs anterior en l'assignatura obligatòria de Química Inorgànica III. L'estudi centra en l'estructura electrònica dels complexos dels metalls de transició, tant en els seus aspectes teòrics (teoria del camp cristal·lí) com experimentals (espectres d'absorció, propietats magnètiques i espectres de ressonància paramagnètica electrònica) així com en els seus espectres vibracionals (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 sàprien 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'arreglar 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 puguin 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'APRENTATGE**

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 Inorgànica 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 qualitatiu i quantitativ.	Resoldre problemes qualitatiu i quantitativ segons models desenvolupats prèviament.(CE14). Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15). Comprendre els aspectes qualitatiu i quantitativ 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 electrònica 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 monoelectrònica: 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 d'orbitals moleculars.
- 2.3.- Aproximació de camp feble: termes energètics. Diagrames d'Orgel. Diagrames de Tanabe i Sugano.
- 2.4.- Acoblament espí-òrbita: nivells d'energia.

3. Espectres electrònics

- 3.1.- Estats excitats i espectres electrònics. Transicions d-d. Característiques dels espectres d'absorció en el visible: número, posició, amplitud i intensitat de les bandes d'absorció.
- 3.2.- Intensitat de les bandes d'absorció. Regles de selecció: Transicions després permés i després prohibit. Regla de selecció de Laporte.
- 3.3.- Transicions electròniques després permés. Anàlisi de l'espectre d'absorció en el visible dels complexos octaèdrics i tetraèdrics dels metalls de transició. Transicions després 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 després només: nombre d'electrons desaparellats.
- 4.3.- Propietats magnètiques dels complexos amb simetria cúbica (octaèdrics i tetraèdrics). Efecte del camp cristal·lí sobre el moment magnètic d'un ió lliure: bloqueig parcial o total de la contribució orbital al moment magnètic. Termes A, E i T. Transició després.
- 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 l'espectroscòpia de ressonància paramagnètica electrònica (EPR). Complexos de Cu(II).
- 4.7.- Interaccions de bescanvi magnètic isotròpic: Ferromagnetisme i antiferromagnetisme. Llei de susceptibilitat magnètica per a complexos polinuclears. Models orbitals de les interaccions isotròpiques.
- 4.8.- Ordre Magnètic: Ferromagnètic, antiferromagnètic, ferrimagnètic i feble ferromagnetisme. Lenta relaxació de l'imanació 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'estudient 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 classes es complementen amb el temps d'estudi personal.

Tutories grupals. Els alumnes acudirán 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.