



FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	44605
Nombre	Química inorgánica avanzada
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2218 - M.U. en Química	Facultad de Química	1	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2218 - M.U. en Química	1 - Química avanzada	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
REAL CABEZOS, JOSE ANTONIO	320 - Química Inorgánica

RESUMEN

La asignatura obligatoria **Química Inorgánica Avanzada** de 5 créditos forma parte de la materia *Química Avanzada* y se imparte en el primer cuatrimestre del M.U. en Química por la Universitat de València (Estudi General). Tiene como objetivo ampliar y complementar los conocimientos de Química Inorgánica adquiridos en el grado. En concreto, la asignatura profundizará en los conocimientos de Química Organometálica, Bioinorgánica, Química Supramolecular y Polímeros de Coordinación.

En Química Organometálica se estudiará la síntesis, reactividad y caracterización de los compuestos organometálicos, así como su gran importancia como catalizadores en procesos industriales y en síntesis orgánica. En Química Bioinorgánica se estudiará la presencia de los elementos metálicos en los seres vivos, su interacción con los ligandos biológicos, las propiedades que son capaces de desarrollar (catálisis, transferencia de electrones, estructural...). En Química Supramolecular se revisarán aspectos básicos del reconocimiento molecular tanto de iones metálicos como de otras especies químicas, como aniones de interés medioambiental o de relevancia biológica. Se considerará también el transporte de especies inorgánicas a través de membrana, así como la catálisis supramolecular. Finalmente, se presentarán ejemplos de sensores y/o máquinas moleculares elementales. En Polímeros de Coordinación se pretende dar los útiles para la descripción y diseño de redes de coordinación, discutir la fenomenologías de interpenetración de redes y flexibilidad, dar a conocer los diferentes tipos de ligandos



punto y sus formas de coordinación y centros metálicos adecuados. Un aspecto importante de esta sección es la discusión de las propiedades derivadas de estas redes (magnetismo, porosidad, quiralidad, catálisis, luminiscencia, etc.).

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 requieren los conocimientos previos sobre química que se imparten en las titulaciones indicadas en el perfil de ingreso recomendado para el estudiante de Master.

COMPETENCIAS

2218 - M.U. en Química

- Que los/las estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- Que los/las estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- Que los/las estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- Ser capaz de resolver problemas complejos de química, sea en el ámbito académico, de la investigación o de la aplicación industrial a nivel de especialización o máster
- Fomentar, en contextos académicos y profesionales del ámbito de la política económica, el avance tecnológico, social o cultural dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y valores democrático.
- Ser capaces de diseñar, realizar, analizar e interpretar experiencias y datos complejos en el entorno de la química a nivel de especialización.
- Adquirir conocimientos avanzados que permitan valorar la importancia de la química en la salud, el medio ambiente, nuevos materiales y energía.



RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Al finalizar el proceso de enseñanza-aprendizaje, el estudiante deberá ser capaz de:

- **Química Bioinorgánica**

- Identificar los elementos presentes en los seres vivos, haciendo hincapié en los iones metálicos que interaccionan con los ligandos biológicos y en su forma específica de coordinarse, de mayor complejidad que la observada en los compuestos simples.
- Razonar cómo los iones metálicos son seleccionados por los organismos según la función a la que se van a destinar.
- Entender las propiedades que se derivan de la interacción de los iones metálicos con los ligandos biológicos, tales como transferencia electrónica, catálisis, señalización, regulación y soporte estructural.
- Conocer las fronteras de la investigación actual dentro del área de la Bioinorgánica.

- **Polímeros de Coordinación**

- Identificar diferentes tipos de redes de coordinación y sus propiedades intrínsecas tales como rigidez, maleabilidad, interpenetración, porosidad.
- Analizar los diferentes tipos de polímeros de coordinación porosos en función de sus unidades de construcción (tipos de ligandos puente, naturaleza de los metales implicados).
- Conocer las propiedades fisicoquímicas de los polímeros de coordinación porosos (magnéticas, quirales, reactivas, selectividad, etc.).

- **Química Supramolecular**

- Conocer aspectos básicos del reconocimiento molecular de cationes esféricos, metales de transición, especies aniónicas y moléculas neutras.
- Analizar la naturaleza termodinámica y cinética de los procesos de reconocimiento molecular.
- Clasificar los procesos de transporte y, en particular, analizar aquellos mediados por ionóforos.
- Conocer ejemplos de catálisis molecular tanto dependiente como independiente de centros metálicos.
- Entender los fundamentos de los sensores y máquinas moleculares.

- **Química Organometálica**

- Conocer los diferentes tipos de compuestos organometálicos y predecir su estabilidad y métodos de síntesis.
- Caracterizar estructuralmente estos compuestos y estudiar con detalle sus distintos tipos de reactividad característica.



- Estudiar los procesos catalíticos más importantes en los que intervienen como catalizadores, tanto en la industria como en síntesis orgánica.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Bioinorgánica

- Introducción. Elementos esenciales y traza. Terminología. Técnicas en Bioinorgánica.
- Almacenamiento y transporte de metales. Sideróforos, transferrina y ferritina.
- Transporte de O₂. Mioglobina, hemoglobina, mecanismos.
- Procesos de transferencia electrónica. Citocromos, clusters FeS, proteínas azules de cobre.
- Óxido nítrico: propiedades químicas y biológicas. Introducción.
- Estructura electrónica del NO. Aspectos básicos de la reactividad del NO. Complejos con los metales de transición: Nitrosilación.
- Estructura electrónica de los complejos Fe(II) hemo-NO.
- Transporte biológico de NO. Fuentes biológicas de NO: No-sintasas (estructura y mecanismo).
- Moléculas diana: consecuencias de la producción de NO: Hemoproteínas ferrosas (Guanidil ciclasa soluble (sGC), Hemoglobina (Hb), Mioglobina (Mb), Citocromo c oxidasa (CcOx), Hemoproteínas férricas); Centros de coordinación no hemo; Dioxígeno; Otros radicales.
- Niveles fisiológicos y fisiopatológicos de NO. Métodos de detección de NO.

2. Polímeros de coordinación (MOFs)

- Definición de polímero de coordinación (PC). Precedentes históricos y motivaciones que estimularon el desarrollo inicial de los PCs. Concepto de Red como herramienta para describir y diseñar PCs/MOFs. Unidades básicas de construcción de MOFs (SBUs).
- Descripción, clasificación, topología de redes y ejemplos significativos. Red, conjunto de nodos y enlaces. Análisis topológico. Descripción y símbolos para redes 2D, 3D y poliedros de coordinación (Símbolos de Schläfli, del Vértice (M. O'Keeffe), del Punto (A. F. Wells). Ejemplos de redes más comunes encontradas en PCs: NbO, Sodalita, Diamante, Cuarzo (SiO₂), Moganita (SiO₂), SrAl₂, Redes tri- y tetra-conectadas, etc. Medios disponibles para el análisis topológico de redes en polímeros de coordinación. Bibliografía de interés sobre redes y PCs.
- Revisión de algunos MOFs más significativos.
- Motivaciones que han conducido a la expansión explosiva del área de investigación de los MOFs.
- Selección de redes basadas en unidades de construcción SBUs: i) MOF-2, ii) HKUST-1, iii) MOF-14, v) MOF-5, vi) Serie iso-reticular IRMOFs, vii) MOF-177, viii) Serie MIL-nº: MIL-101 y MIL-5, ix) Series UiO-nº y PCN-nº, x) Serie NU-nº, xi) MOFs con centros de coordinación insaturados, xii) ZIFs, xiii) Covalent organic frameworks (COFs).
- Métodos de síntesis clásicos de la química de coordinación: solvotermal, mecanoquímico, Método sonoquímico, Método solvotermal asistido por microondas. Activación de MOFs: liofilización, CO₂(l) supercrítico.
- MOFs fotónica, catálisis, propiedades magnéticas.



3. Química supramolecular

- Reconocimiento molecular. Cationes esféricos. Metales de transición. Especies aniónicas y neutras. Aspectos termodinámicos y cinéticos del reconocimiento molecular.
- Procesos de transporte en Química Supramolecular. Bípode de procesos de transporte: transporte activo y pasivo. Transporte de cationes. Transporte de aniones. Procesos acoplados de transporte. Procesos de transporte acoplados a fotones.
- Catálisis supramolecular. Catálisis metalo-independiente. Catálisis metalo-dependiente. Activación de nucleótidos y oligonucleótidos.
- Dispositivos supramoleculares. Semioquímica. Fotoquímica supramolecular. Rotaxanos y catenanos.

4. Química organometálica

- Introducción.
- Estructura y enlace.
- Compuestos con ligandos dadores sigma. Compuestos con ligandos dadores pi.
- Activación de moléculas pequeñas. Compuestos con ligandos fósforo dadores.
- Carbonilos metálicos. Clústeres metálicos. Reglas de Wade.
- Analogía isolobular: paralelismo entre la química del grupo principal y la química organometálica.
- Reactividad: i) Reacciones de sustitución. Reacciones de adición oxidativa. Reacciones de eliminación reductiva; ii) Reacciones de inserción y eliminación. Reacciones de adición y abstracción electrofílica y nucleofílica sobre los ligandos coordinados.
- Catálisis: Reacciones con olefinas y otros compuestos insaturados. Procesos industriales con catalizadores homogéneos. Reacciones de acoplamiento.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	40,00	100
Tutorías regladas	5,00	100
Seminarios	5,00	100
Elaboración de trabajos individuales	15,00	0
Estudio y trabajo autónomo	30,00	0
Lecturas de material complementario	10,00	0
Preparación de actividades de evaluación	20,00	0
TOTAL	125,00	



METODOLOGÍA DOCENTE

- Clases magistrales teóricas participativas. El profesor dará una visión global del tema objeto de estudio haciendo especial hincapié en los conceptos claves o de especial complejidad y asesorará sobre los recursos más adecuados para complementar el tema. Además, motivará al estudiante a participar en las discusiones que se planteen durante la exposición del mismo.
- Seminarios. Estas sesiones se orientarán a la puesta en práctica de los conocimientos adquiridos por el estudiante en las clases expositivas, mediante el análisis de artículos científicos sobre aspectos específicos del tema, la resolución de cuestiones, ...
- Aula Virtual. En este espacio profesor y estudiantes depositarán material relacionado con el desarrollo de las distintas materias (textos, ejercicios, artículos...).

EVALUACIÓN

La calificación de la asignatura tanto para la primera como para la segunda convocatòria se obtendrá a partir de:

- **Exámenes escritos:** Al final de cada uno de los cuatro apartados de que consta la asignatura de Química Inorgánica Avanzada se realizarán sendas pruebas escritas basadas en los resultados del aprendizaje y de los objetivos específicos de la asignatura. Para aprobar se exigirá una calificación mínima de 5 en cada prueba de cada uno de los contenidos de que consta la asignatura. Estos resultados supondrán el 80% de la evaluación.
- La **preparación y exposición oral** por parte de los estudiantes de **cuestiones planteadas** por el profesor al final de cada tema supondrá el 20% de la evaluación.

La nota necesaria para aprobar es 5.

REFERENCIAS

Básicas

- R.H.Crabtree; The Organometallic Chemistry of the Transition Metals, 6th Ed., Ed. Wiley Interscience John Wiley and Sons, 2014.
- M.Bochmann; Organometallics and Catalysis: An Introduction, Oxford University Press, 2014.
- Ch.Elschenbroich; Organometallics, 3rdEd., Ed. Wiley-VCH. 2006.
- G.O.Spessard; G.L. Miessler; Organometallic Chemistry, 2nd Ed. Oxford University Press, 2010.
- J. S. Casas, V. Moreno, A. Sánchez, J. L. Sánchez, J. Sordo. Química Bioinorgánica. Ed. Síntesis, 2002.



- R. R. Crichton. Biological Inorganic Chemistry. An Introduction. Ed. Elsevier, 2008.
- W. Kaim, B. Schwederski. Bioinorganic Chemistry: Inorganic Elements in the Chemistry of Life. An Introduction and Guide. Ed. Wiley, 2013.
- H.-B. Kraatz, N. Metzler-Nolte (ed.). Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry. Ed. Wiley-VCH, 2006.
- M. Vallet, J. Faus, E. García-España, J. Moratal. Introducción a la Química Bioinorgánica. Ed. Síntesis, 2003.
- J.W. Steed and J. L. Atwood. Supramolecular Chemistry. John Wiley and sons, (New York) 2000.
- A. Bianchi, K. Bowman-James, E. García-España (Editores). Supramolecular Chemistry of Anions. Wiley-VCH (New York) 1997.
- S. R. Batten, S. M. Neville, D. R. Turner; Coordination Polymers. Design, Analysis and Application, RSC Publishing, 2009.
- Functional Porous Coordination Polymers; S. Kitagawa, R. Kitaura, S. Noro, Angew.Chem.Int.Ed. 2004, 43, 2334-2375.

Complementarias

- D. M. Mingos, Historical introduction to nitrosyl complexes, Struct. Bond. 2014, 153, 1-44.
- N. Lehnert, W. R. Scheidt, M. W. Wolf, Structure and Bonding in HemeNitrosyl Complexes and Implications for Biology, Struct. Bond. 2014, 154, 155-224.
- A. P. Hunt, N. Lehnert, Heme-Nitrosyls: Electronic Structure Implications for Function in Biology, Acc. Chem. Res. 2015, 48, 2117-2125.
- Z. J. Tonzetich, L. E. McQuade, S. J. Lippard, Detecting and Understanding the Roles of Nitric Oxide in Biology, Inorg. Chem. 2010, 49, 6338-6348.
- A. R. Butler, I. L. Megson, Non-Heme Iron Nitrosyls in Biology, Chem. Rev. 2002, 102, 1155-1165.
- D. D. Thomas, Breathing new life into nitric oxide signaling: A brief overview of the interplay between oxygen and nitric oxide, RedoxBiology 2015, 5, 225-233.
- J. C. Toledo Jr., O. Augusto, Connecting the Chemical and Biological Properties of Nitric Oxide, Chem. Res. Toxicol. 2012, 25, 975-989.
- T. Nagano, T. Yoshimura, Bioimaging of nitric oxide, Chem. Rev. 2002, 102, 1235-1269.
- E. Culotta, D. E. Koshland Jr., No news is good news, Science 1992, 258, 1862-1902
- L. Öhrström, K. Larsson, Molecule-Based Materials: The structural network approach, Elsevier, 2005