

Facultad de Ciencias

Grado en Química

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA :

**Química de la Coordinación
(2018 - 2019)**

1. Datos descriptivos de la asignatura

| | |
|---|--------------------------|
| Asignatura: Química de la Coordinación | Código: 329173105 |
| <ul style="list-style-type: none">- Centro: Facultad de Ciencias- Lugar de impartición: Facultad de Ciencias- Titulación: Grado en Química- Plan de Estudios: 2009 (Publicado en 2009-11-25)- Rama de conocimiento: Ciencias- Itinerario / Intensificación:- Departamento/s: Química- Área/s de conocimiento: Química Inorgánica- Curso: 3- Carácter: Obligatoria- Duración: Primer cuatrimestre- Créditos ECTS: 6,0- Modalidad de impartición: Presencial- Horario: Enlace al horario- Dirección web de la asignatura: http://www.campusvirtual.ull.es- Idioma: Castellano e Inglés (0,3 ECTS en Inglés) | |

2. Requisitos para cursar la asignatura

Requisitos previos recomendados: Química Inorgánica, Química Física, Química Cuántica y Termodinámica Estadística y Ampliación de Química Física

3. Profesorado que imparte la asignatura

| | |
|--|---|
| Profesor/a Coordinador/a: PEDRO FRANCISCO MARTIN ZARZA | |
| <ul style="list-style-type: none">- Grupo: 1, PA101, TU101, TU102, TU103- Departamento: Química- Área de conocimiento: Química Inorgánica | |
| Tutorías Primer cuatrimestre: | |
| Horario: Lunes de 16:30 a 18:30 horas; martes, miércoles y jueves de 16 a 17 horas; viernes de 12 a 13 horas | Lugar: Lunes, martes, miércoles y jueves: Aula de usos múltiples del Área de Química Inorgánica. Segunda planta del Edificio anexo de la Sección de Química. Viernes: Despacho 6 de la U.D. de Química Inorgánica, Departamento de Química, Sección de Farmacia |

Tutorías Segundo cuatrimestre:

Horario:

Lunes de 16:30 a 18:30 horas; martes, miércoles y jueves de 16 a 17 horas; viernes de 12 a 13 horas

Lugar:

Lunes, martes, miércoles y jueves: Aula de usos múltiples del Área de Química Inorgánica. Segunda planta del Edificio anexo de la Sección de Química. Viernes: Despacho 6 de la U.D. de Química Inorgánica, Departamento de Química, Sección de Farmacia

- Teléfono (despacho/tutoría): **922845257**
- Correo electrónico: **pfmartin@ull.edu.es**
- Web docente: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

Profesor/a: ERASMO JOSE CHINEA PIÑERO

- Grupo: **1, PA101, TU101, TU102, TU103**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Inorgánica**

Tutorías Primer cuatrimestre:

Horario:

Lunes y martes 11:30 a 13:30 horas; miércoles de 15:00 a 17:00 horas

Lugar:

Despacho 5 de la U.D. de Química Inorgánica, Departamento de Química, Sección de Farmacia

Tutorías Segundo cuatrimestre:

Horario:

Lunes y martes de 11:30 a 13:30 horas; miércoles de 15:00 a 17:00 horas

Lugar:

Despacho 5 de la U.D. de Química Inorgánica, Departamento de Química, Sección de Farmacia

- Teléfono (despacho/tutoría): **922318445**
- Correo electrónico: **ejchinea@ull.es**
- Web docente: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

4. Contextualización de la asignatura en el plan de estudio

Bloque formativo al que pertenece la asignatura: **Química Inorgánica**
Perfil profesional:

5. Competencias

Específica

- CET01** - Aspectos principales de terminología química, nomenclatura, convenios y unidades
- CET04** - Tipos principales de reacción química y sus principales características asociadas

CET07 - Propiedades de los compuestos orgánicos, inorgánicos y órgano metálicos

CET11 - Relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales: incluyendo macromoléculas (naturales y sintéticas), polímeros, coloides y otros materiales

CEP01 - Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con las áreas de la Química

General

CG04 - Resolución de problemas

CG10 - Razonamiento crítico

CG12 - Aprendizaje autónomo

6. Contenidos de la asignatura

Contenidos teóricos y prácticos de la asignatura

- Profesor: Erasmo José China Piñero
- Temas: bloque I temas 2 y 3; bloque II temas 4 y 5; bloque III temas 6, 7;

-Profesor: Pedro Martín Zarza

-Temas: Tema 1; bloque IV temas 8, 9, bloque V temas 10, 11, 12; bloque VI tema 13; bloque VII temas 14, 15, 16, 17; bloque VIII tema 18

EPÍGRAFES:

Introducción

- Tema 1.- Conceptos básicos. Formulación y nomenclatura de los compuestos de coordinación.

Bloque I. Estructura de los compuestos de coordinación

- Tema 2.- Estereoquímica en los compuestos de coordinación. Números de coordinación. Isomerismo en los compuestos de coordinación. Isómeros constitucionales. Estereoisómeros. Estereoquímica no rígida: fluxionalidad.
- Tema 3.- Simetría. Elementos y operaciones de simetría. Grupos puntuales y simetría molecular. Representaciones irreducibles y tablas de caracteres. Grupos puntuales de simetría más frecuentes en los compuestos de coordinación.

Bloque II. Enlace en los compuestos de coordinación

- Tema 4.- Teoría del campo cristalino. Efectos del campo cristalino. Energía de estabilización de campo cristalino. Factores que afectan a la magnitud de delta. Éxitos y limitaciones de la teoría del campo cristalino. Evidencias experimentales de covalencia en el enlace metal-ligando: teoría del campo de los ligandos.
- Tema 5.- Teoría de los orbitales moleculares. Complejos octaédricos. Complejos tetraédricos y planos. Enlace pi y evidencias experimentales de su existencia.

Bloque III. Espectros electrónicos de los complejos de los metales de transición

- Tema 6.- El hamiltoniano electrónico para los complejos de los metales de transición: efectos del campo de los ligandos y del acoplamiento espín-órbita en los niveles de energía. Campo intermedio y campo fuerte: diagramas de correlación. Campo arbitrario: diagramas de Tanabe-Sugano. Influencia de la configuración electrónica en la geometría de los complejos. Estados electrónicos no degenerados y degenerados: el efecto Jahn-Teller.
- Tema 7.- Características más importantes de los espectros electrónicos de los complejos: reglas de selección e intensidad

de las bandas, energías de las bandas y ancho y formas de las bandas. Influencia del acoplamiento vibrónico en la intensidad de las bandas. Series espectroquímica y nefelauxética. Espectros de transferencia de carga.

Bloque IV. Propiedades magnéticas en los complejos de los metales de transición

- Tema 8.- Introducción a la magnetoquímica. Propiedades magnéticas de los complejos de los metales de transición: consideraciones generales. Diamagnetismo y paramagnetismo. Magnetismo cooperativo: antiferromagnetismo y ferromagnetismo.
- Tema 9.- Ecuaciones fundamentales del magnetismo molecular: ecuación de Van Vleck. Simplificaciones de la ecuación de Van Vleck: leyes de Curie y Curie-Weiss. Paramagnetismo independiente de la temperatura. Propiedades magnéticas del ión libre. Propiedades magnéticas de los iones de los metales de transición en campos intermedios y fuertes. Propiedades magnéticas en complejos polinucleares.

Bloque V. Química de los compuestos organometálicos

- Tema 10.- Regla del número atómico efectivo (NAE). Principales familias de compuestos organometálicos: clasificación por tipos de enlace. Complejos de carbonilo con metales de transición: propiedades, estructuras y reactividades. Complejos iónicos de carbonilo.
- Tema 11.- Complejos organometálicos con enlace sigma metal-carbono. Alquilos y arilos metálicos. Propiedades, estructuras y reactividades.
- Tema 12.- Complejos organometálicos con enlaces pi metal-carbono. Carbenos metálicos. Clasificación, propiedades y reactividad de los carbenos. Carbinos metálicos. Complejos pi de olefinas, polienos y enilos. Metalocenos y complejos sándwich.

Bloque VI. Estabilidad de los compuestos de coordinación

- Tema 13.- Estabilidad de los complejos de metales de transición en disolución acuosa. Tendencias en los valores de las constantes de estabilidad de complejos de metales de transición. Efectos estadístico, quelato y macrocíclico. Importancia química de las constantes de formación.

Bloque VII. Reactividad de los compuestos de coordinación

- Tema 14.- Reacciones de sustitución de ligandos en complejos de metales de transición. Reacciones de sustitución en complejos octaédricos. Reacciones de isomerización y racemización. Reacciones de sustitución en complejos planos d8. Efecto cinético trans.
- Tema 15.- Reacciones redox en complejos de metales de transición. Procesos de transferencia de electrones. Mecanismo de esfera externa. Mecanismo de esfera interna. Reacciones de transferencia de dos electrones.
- Tema 16.- Reacciones en complejos organometálicos. Reacciones que ocurren sobre el metal: adición oxidativa, eliminación reductiva, reacciones de sustitución y eliminación. Reacciones que tienen lugar sobre los ligandos.
- Tema 17.- Catálisis homogénea. Conceptos fundamentales. Estudio de algunos procesos catalíticos homogéneos.

Bloque VIII. Química de la biocoordinación

- Tema 18.- Funciones biológicas de los elementos inorgánicos. Procesos biológicos controlados por metaloproteínas.

Actividades a desarrollar en otro idioma

Durante tres de las horas de seminarios y/o tutorías, el alumno, utilizando el inglés, deberá destacar los aspectos más relevantes tratados en las clases de teoría y/o seminarios. Esta actividad se realizará de forma oral o escrita.

7. Metodología y volumen de trabajo del estudiante

Descripción

La metodología docente de la asignatura contempla las siguientes actividades formativas:

- Clases teóricas. En ellas se explican cada uno de los aspectos básicos del temario transmitiendo los conocimientos necesarios que le brindarán al alumno una información organizada sobre los distintos conceptos tratados en la asignatura. Se hará uso de diferentes recursos didácticos, como la pizarra, que representará el recurso más utilizado. Como apoyo a éste y para presentar una información más amplia se utilizará el cañón de proyecciones con programas apropiados de presentación. En el aula virtual de la asignatura se pondrá a disposición de los alumnos los ficheros con las presentaciones y otro material suplementario necesario para el seguimiento de las clases de teoría.
- Clases de problemas. Se resolverán problemas numéricos relacionados con aspectos tratados en las clases de teoría. En el aula virtual de la asignatura se pondrá a disposición de los alumnos colecciones de ejercicios y problemas.
- Seminarios. Actividades monográficas supervisadas con participación compartida que se dedicarán a la discusión y desarrollo de temas programados para complementar el proceso de aprendizaje del alumno.
- Tutorías. Se organizarán en grupos reducidos de alumnos, de acuerdo con el calendario propuesto por la Facultad de Química. En ellas, se supervisará el proceso de aprendizaje mediante la revisión y discusión del material bibliográfico y lecturas recomendadas en las clases de teoría y en los seminarios, así como mediante la resolución de supuestos y ejercicios, cuestionarios y test por parte de los alumnos. También se resolverán y discutirán todas las dudas que hayan podido surgir tanto en las clases de teoría como en las clases de problemas.

Actividades formativas en créditos ECTS, su metodología de enseñanza-aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante

| Actividades formativas | Horas presenciales | Horas de trabajo autónomo | Total horas | Relación con competencias |
|---|--------------------|---------------------------|-------------|---|
| Clases teóricas | 38,00 | 76,00 | 114,0 | [CG04], [CG10], [CG12], [CET01], [CET04], [CET07], [CET11], [CEP01] |
| Realización de seminarios u otras actividades complementarias | 4,00 | 6,00 | 10,0 | [CG04], [CG10], [CG12], [CET01], [CET04], [CET07], [CET11], [CEP01] |
| Realización de exámenes | 4,00 | 0,00 | 4,0 | [CG04], [CG10], [CG12], [CET01], [CET04], [CET07], [CET11], [CEP01] |
| Asistencia a tutorías | 6,00 | 0,00 | 6,0 | [CG04], [CG10], [CG12], [CET01], [CET04], [CET07], [CET11], [CEP01] |
| Resolución de problemas | 8,00 | 8,00 | 16,0 | [CG04], [CG10], [CG12], [CET01], [CET04], [CET07], [CET11], [CEP01] |
| Total horas | 60.0 | 90.0 | 150.0 | |

Total ECTS

6,00

8. Bibliografía / Recursos

Bibliografía Básica

1. "Inorganic Chemistry", G.L. Miessler, T. J. Fisher and D. A. Tarr, 5ª ed, Tirson 2014
2. "Electronic Structure and Properties of Transition Metal Compounds. Introduction to the Theory", I. B. Bersuker, Wiley 2010..
3. "Coordination Chemistry", J. Ribas Gispert, Wiley-VCH, 2008.
4. "Inorganic Chemistry", C. E. Housecroft and A. G. Sharpe, Prentice-Hall 2005.

Bibliografía Complementaria

1. "Chemistry of Elements", N. N. Greenwood and A. Earnshaw, Butterworth-Heinemann 1997
2. "Química Cuántica", I. N. Levine, Prentice-Hall 2001.
3. "Los grupos en Química. Las herramientas", F. G. Manrique, E. Medina de la Rosa y P. Martín Zarza, ARTE La Laguna 2002.
4. "Organometallics" 1 y 2, M. Bochman, Oxford Chemistry Primers, 1994.
5. "The Mechanisms of Reactions at Transition Metal Sites", R. A. Henderson, Oxford Chemistry Primers 1995.
6. "Ligand Field Theory and its Applications", B. N. Figgis and M. A. Hitchman, Wiley 2000.
7. "Magnetism and Transition Metal Complexes", F. E. Mabbs and D. J. Machin, Chapman and Hall 1973.
8. "Advanced Inorganic Chemistry" E. A. Cotton, G. Wilkinson, C. A. Murillo and M. Bochman, Wiley (6ª ed.) 1999.
9. "Physical Inorganic Chemistry. Principles, Methods and Models", A. Bakac, John Wiley and Sons, Inc., 2010.
10. "Reaction Mechanisms of Inorganic and Organometallic Systems", R.B. Jordan, 2nd Edition, Oxford University Press, New York, 1998.
11. "Redox Mechanisms in Inorganic Chemistry", A.G. Lappin, Ellis Horwood, New York, 1994.
12. "Organometallic Chemistry", G.O. Spessard, G.L. Miessler, Prentice Hall, New Jersey, 1997.
13. "Inorganic Chemistry", M.Weller, T.Overton, J. Rourke, F. Armstrong, 6th Edition, Oxford University Press, Oxford, OX2 6DP, 2014.

Otros Recursos

- Oxford online resource centre: www.oxfordtextbooks.co.uk/orc/ichem5e/
- Housecroft's Inorganic Chemistry second edition. Companion website: www.pearsoned.co.uk/housecroft
- Tabla periódica interactiva: <http://www.phtable.com/?lang=es>
- IUPAC recommendations: <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/index.html>

9. Sistema de evaluación y calificación

Descripción

La calificación de la convocatoria de enero se basará en la evaluación continua que consta de los siguientes elementos:

a) Participación en la resolución de supuestos y ejercicios en los seminarios y tutorías y cuestionarios que se propondrán al finalizar cada bloque temático. Este apartado supondrá el 30% de la calificación según esta modalidad. Las tareas, cuestionarios y test asignados que no sean entregados o presentados, se puntuarán con un 0,0. No podrá superar la asignatura el alumnado que obtenga una calificación inferior a 5 sobre 10 en este apartado

b) Pruebas escritas, se realizarán tres pruebas a lo largo del curso sobre los contenidos teóricos y prácticos de diferentes partes del temario:

b.1.) Prueba I (20%): Formulación y Simetría, a realizar en el mes de septiembre. La nota de esta prueba será la media de las notas de los ejercicios de Formulación y Simetría. Los alumnos que hayan obtenido una calificación media igual o superior a 5 sobre 10 en esta prueba y que, en cada una de las partes, obtengan al menos un 3,5 sobre 10 podrán optar a la modalidad de evaluación continua.

b.2.) Prueba II (25%) de los temas 1 a 9 y Prueba III (25%) de los temas 10 a 18. Se realizarán en el mes de noviembre y antes de los llamamientos oficiales, respectivamente. Constituyen el 80% restante de b). Para aprobar mediante evaluación continua la asignatura, la media de estas dos pruebas deben ser al menos de 3,5 sobre 10 siempre que no se obtenga menos de 3,5 sobre 10 en alguna de estas dos pruebas.

Para aprobar mediante la evaluación continua se debe haber asistido, al menos, al 80% de todas las actividades del curso: clases, seminarios y tutorías.

En las convocatorias de junio y julio, los alumnos que hayan obtenido una calificación de, al menos, 5 sobre 10 en el apartado a) de la evaluación continua podrán presentarse a los exámenes de recuperación del apartado b). Las partes en las que no se haya alcanzado el mínimo de 3,5 sobre 10 en la evaluación continua, podrán recuperarse en cada una de estas convocatorias oficiales, para lo cual estos exámenes se ofertarán con una estructura que permita a cada alumno adaptarse a sus necesidades.

El alumnado podrá renunciar a la incorporación de las calificaciones de la evaluación continua en las convocatorias de junio y julio y realizar la evaluación única descrita más abajo. La renuncia deberá realizarse, por escrito, ante el profesorado responsable de la asignatura antes del inicio del periodo de exámenes fijado en el calendario académico. La renuncia, de efectuarse, tendrá carácter definitivo en las restantes convocatorias del curso.

En las convocatorias de junio y julio, los alumnos que hayan obtenido una calificación menor de 5 sobre 10 en el apartado a) de la evaluación continua serán evaluados mediante la evaluación única que consistirá en una prueba escrita sobre los contenidos de la asignatura y su calificación final será la correspondiente a dicho examen. Esta prueba constará de tres partes:

a) Parte I: Formulación (5%) y simetría (5%)

b) Parte II: Temas 1 a 9 (45%)

c) Parte III: Temas 10 a 18 (45%)

No se podrá aprobar la asignatura si no se obtiene, al menos, un 5 sobre 10 en cada una de las partes anteriores

Estrategia Evaluativa

| Tipo de prueba | Competencias | Criterios | Ponderación |
|---|---|---|-------------|
| Resolución de supuestos, ejercicios y cuestionarios | [CG04], [CG10], [CG12], [CET01], [CET04], [CET07], [CET11], [CEP01] | Las tareas, cuestionarios y test asignados que no sean entregados o presentados, se puntuarán con un 0. (Para más detalles consultar la "Descripción" del apartado 9 de la Guía) | 30 % |

| | | | |
|-------------------|---|--|------|
| Pruebas parciales | [CG04], [CG10], [CG12], [CET01], [CET04], [CET07], [CET11], [CEP01] | Se realizarán tres pruebas sobre los contenidos teóricos y prácticos de diferentes partes del temario. (Para más detalles consultar la "Descripción" del apartado 9 de la Guía) | 70 % |
|-------------------|---|--|------|

10. Resultados de Aprendizaje

Describir e interpretar los principios físico-químicos fundamentales que rigen a la Química Inorgánica y sus relaciones con otras áreas científicas.

Describir y justificar el enlace en los compuestos de coordinación, sus espectros electrónicos, propiedades magnéticas, estructura y tipos de reacciones más importantes, incluyendo aspectos termodinámicos y cinéticos.

Describir y justificar cómo es el enlace químico en los compuestos organometálicos, su estructura, reacciones y propiedades más importantes.

Reconocer y describir aspectos destacados del papel de la Química de la coordinación en algunos procesos biológicos relevantes.

11. Cronograma / calendario de la asignatura

Descripción

La distribución de los temas por semana es orientativa, puede sufrir cambios según las necesidades de organización docente.

Para estar mejor informado sobre el calendario de las diferentes actividades de la asignatura, se debe consultar el horario por semana del curso en el enlace habilitado al efecto por la Sección de Química para este curso escolar

<http://www.ull.es/view/centros/quimica/Horarios/es>

Primer cuatrimestre

| Semana | Temas | Actividades de enseñanza aprendizaje | Horas de trabajo presencial | Horas de trabajo autónomo | Total |
|-----------|----------------------|---|-----------------------------|---------------------------|-------|
| Semana 1: | 1(1) 2(1) 3(1) | teóricas: 2h problemas:1h | 3.00 | 7.00 | 10.00 |
| Semana 2: | 3(4) | teóricas: 3h seminario: 1h tutoría:1h | 5.00 | 8.00 | 13.00 |

| | | | | | |
|-----------------|-------------------------|--|-------|-------|--------|
| Semana 3: | 3(3) | teóricas: 2h problemas 1h | 3.00 | 7.00 | 10.00 |
| Semana 4: | 4(3) | teóricas: 3h tutoría: 1h | 4.00 | 8.50 | 12.50 |
| Semana 5: | 5(3) | teóricas: 2h problemas 1h | 3.00 | 4.50 | 7.50 |
| Semana 6: | 5(2) | teóricas: 1h seminario: 1h tutoría: 1h | 3.00 | 6.00 | 9.00 |
| Semana 7: | 6(4) | teóricas: 3h problemas 1h | 4.00 | 5.50 | 9.50 |
| Semana 8: | 6(1) 7(2) | teóricas: 2h problemas 1h | 3.00 | 5.50 | 8.50 |
| Semana 9: | 7(1) 8(3) | teóricas: 2h seminario:1h problemas 1h tutoría:1h | 5.00 | 6.50 | 11.50 |
| Semana 10: | 9(4) | teóricas: 3h problemas 1h | 4.00 | 6.00 | 10.00 |
| Semana 11: | 10(1) 11(1) 12(1) | teóricas: 3h tutoría: 1h | 4.00 | 6.00 | 10.00 |
| Semana 12: | 13(1) 14(2) 15(1) | teóricas: 3h problemas: 1h | 4.00 | 5.00 | 9.00 |
| Semana 13: | 15(2) 16(1) | teóricas: 3h tutoría: 1h | 4.00 | 4.00 | 8.00 |
| Semana 14: | 16(2) 17(1) | teóricas: 3h seminario: 1h | 4.00 | 8.50 | 12.50 |
| Semana 15: | 17(2) 18(1) | teóricas:2h problemas: 1h | 3.00 | 2.00 | 5.00 |
| Semana 16 a 18: | Evaluación | Evaluación y trabajo autónomo del alumno para la preparación de la evaluación. | 4.00 | 0.00 | 4.00 |
| Total | | | 60.00 | 90.00 | 150.00 |

