# QUÍMICA INORGÁNICA AVANZADA (2013-14)

## DATOS GENERALES

Código 26031

Créditos ECTS 6

### Departamentos y áreas

| Departamento | Área | Dpt. Resp. | Dpt. Acta |
|---|---|---|---|
| QUIMICA INORGANICA | QUIMICA INORGANICA | SÍ | SÍ |

### Estudios en que se imparte

GRADO EN QUÍMICA

### Contexto de la asignatura

Esta asignatura se imparte en el 5º semestre del grado y completa la formación que han recibido los alumnos sobre Química General y Química Inorgánica en asignaturas de cursos anteriores: Química II en el 1er semestre, donde se han explicado las distintas teorías de enlace y una introducción a la reactividad de los compuestos inorgánicos, Química Inorgánica en el 3er semestre, en la que se aborda el estudio de la Química Inorgánica descriptiva, esto es, el estudio de los elementos químicos y sus compuestos y Sólidos Inorgánicos, en el 4º semestre, en la que realiza una descripción de las teorías de enlace, propiedades y métodos de síntesis de este tipo de compuestos inorgánicos. Así pues, la asignatura Química Inorgánica Avanzada se dedica a profundizar en temas fundamentales de química inorgánica como son: la Química de la Coordinación, la Química Organometálica y la Química Bioinorgánica. Estos tres temas constituyen el nombre de los tres bloques en los que se organizan los contenidos de la asignatura.

# OBJETIVOS

**Objetivos específicos aportados por el profesorado (2013-14)**

# CONTENIDOS

## Contenidos teóricos y prácticos (2013-14)

TEORIA
Bloque I
Tema 1. Descripción de los compuestos de coordinación: ligandos, nomenclatura y geometría. Tipos de ligandos. Nomenclatura y formulación. Estructura: geometría, simetría, isomería. Conceptos de ácido-base duro y blando.
Tema 2. Enlace y estructura electrónica de los compuestos de coordinación. Teorías de enlace. Teoría del campo cristalino: desdoblamiento de orbitales d, energía de desdoblamiento del campo cristalino, delta. Complejos octaédricos. Serie espectroquímica. Conceptos de bajo y alto spin. Justificación de propiedades. Efecto Jahn-Teller. Complejos tetraédricos y planocuadrados. Teoría del campo de los ligandos. Enlaces de tipo sigma y de tipo pi.
Tema 3. Espectros electrónicos de los compuestos de coordinación. Estados electrónicos en los átomos libres y en los complejos. Conceptos de microestados de una configuración. Energía de los términos. Transiciones d-d y de transferencia de carga. Diagramas de correlación y de Tanabe-Sugano.
Tema 4. Reacciones de los compuestos de coordinación. Reacciones de sustitución. Aspectos termodinámicos: constantes de formación; efecto quelato, efectos estéricos. Aspectos cinéticos: labilidad e inercia. Mecanismos de reacción. Hidrólisis básica. Reacciones redox. Reacciones fotoquímicas.
Bloque II
Tema 5. Descripción de los compuestos organometálicos: ligandos, nomenclatura, geometría y enlace. Definición de compuestos organometálicos, tipos de ligandos, concepto de hapticidad, nomenclatura. Enlace. Regla de los 18 (y de los 16) electrones.
Tema 6. Carbonilos. Comportamiento del monóxido de carbono como ligando. Sinergismo y fortaleza de enlaces M-C y C-O. Ligandos afines y relacionados(pi aceptores). Síntesis de carbonilos. Estructura y geometría. Propiedades de los carbonilos y reacciones del ligando CO.
Tema 7. Compuestos con ligandos hidrocarburo. Comportamiento del hidrógeno como ligando. Compuestos con ligandos hidrocarburo de cadena abierta y con ligandos polienos cíclicos. Metalocenos.
Tema 8. Compuestos cluster. Definición. Estructura. Reacciones principales.
Tema 9. Principales reacciones de los compuestos organometálicos. Sustitución de ligandos. Adición oxidativa y eliminación reductiva. Inserción migratoria. Reacciones de inserción 1,2 y eliminación beta de hidruro. Eliminaciones de hidruro y ciclometalaciones. Reacciones de los ligandos coordinados.
Tema 10. Catálisis con compuestos organometálicos. Introducción al campo de la catálisis y conceptos básicos. Catálisis homogénea y heterogénea. Etapas elementales que constituyen un ciclo catalítico homogéneo. Ejemplos de procesos catalíticos en fase homogénea: hidrogenación de alquenos con el catalizador de Wilkinson, hidroformilación de olefinas con catalizadores de Co y de Rh, síntesis de ácido acético (proceso Monsanto) y oxidación de olefinas (proceso Wacker).
Bloque III
Tema 11. Introducción a la Química Bioinorgánica. Participación y funciones de los "elementos inorgánicos" en distintos aspectos de los seres vivos. Función estructural e implicación en procesos químicos.
Tema 12. Sistemas bioinorgánicos. Estructuras y funciones, importancia del entorno orgánico. Metaloproteínas y sistemas no-proteínicos. Hemoglobina y mioglobina, y ferritina. Metaloenzimas (carboxipeptidasa, el citocromo P-450 y el citocromo c, proteínas de hierro-azufre o ferredoxinas y la nitrogenasa (fijación de nitrógeno). Cobalamina y fotosistemas I (clorofila) y II.
Tema 13. Los elementos químicos y la salud. Elementos radiactivos. Elementos y compuestos tóxicos. Elementos y compuestos trazadores. Agentes quelantes. Compuestos con efectos antitumorales, anastésicos, antidepresivos.

PRÁCTICAS. Se realizaran 3 de las siguientes prácticas. Además, se dedicará una sesión a previa a realizar la intrducción del trabajo en el laboratorio y normas de seguridad y preparacion de los experimentos a realizar. Al final, se dedicará una sesión a la revisión y análsis de los resultados obtenidos.
1. Preparación del complejo [Ni(tmen)(acac)]+ y estudio de sus propiedades solvatocrómicas.
2. Preparación de un complejo macrocíclico de cobre y estudio de su estabilidad.
3. Preparación de [Co(NO3)(NH3)5](NO3)2
4. Determinación de las constantes de estabilidad de los complejos [Ni(glicinato)n](2-n)+
5. Preparación del compuesto de coordinación [MoO2Cl2(DMSO)2] y su aplicación como catalizador de la oxidación de PPh3 a OPPh3

# EVALUACIÓN

## Instrumentos y criterios de Evaluación 2013-14

* Para aprobar la asignatura se debe obtener una calificación igual o superior a 4,0 en la prueba final.
* El cálculo de la nota final se realizará como una media ponderada de las calificaciones obtenidas en las distintas actividades que se valoran en la evaluación.
* Si no se obtiene una puntuación mayor o igual que 4,0 en el examen final, la asignatura se calificará del modo siguiente:
a) Si la media ponderada de las distintas actividades de evaluación resulta ser mayor o igual que 4,5, la calificación será 4,5.
b) Si la media ponderada de las distintas actividades de evaluación resulta ser menor que 4,5, la calificación será el valor de dicha media.

* Para una posible recuperación se tendrá en cuenta lo siguiente:
i) Si no se ha obtenido la calificación mínima exigida en la prueba final, se podrá realizar de nuevo una prueba de las mismas características en el segundo periodo de evaluación.
ii) Las calificaciones obtenidas en el resto de actividades de evaluación solo serán válidas durante el curso en el que se han obtenido. Es decir, no se mantendrán de un curso académico al siguiente, salvo en algún caso excepcional en el que el profesor lo considere oportuno.
iii) Las actividades de evaluación continua no son recuperables. En algún caso excepcional, el profesor puede proponer actividades de evaluación extra que compensen la falta (o muy baja calificación) de alguna de las actividades de evaluación programadas en el curso.

Las notas que obtenga el alumno en todas las actividades de evaluación continua se utilizarán para calcular la media ponderada tanto en el periodo de evaluación de enero como en el segundo periodo de evaluación de julio

| Tipo | Criterio | Descripción | Ponderación |
|---|---|---|---|
| EXAMEN FINAL | Prueba escrita consistente en 8-10 preguntas de respuesta corta y con una duración aproximada de 2-3 horas. | Prueba escrita-examen final | 50 |
| ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE | Se valorará la capacidad del alumno para resolver, de forma autónoma, cuestiones relacionadas con la temática de la asignatura y la preparación de un trabajo de forma cooperativa | Resolución de cuestiones y elaboración de trabajos | 15 |
| ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE | Tres cuestionarios de control que se realizarán en clase (tiempo 45 minutos) en los que se propondrán cuestiones teóricas y/o prácticas relacionadas con los conceptos trabajados en las clases teóricas y prácticas. | Pruebas escritas teórico-prácticas | 20 |
| ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE | Se valorará la participación del alumno en el desarrollo de las clases prácticas de laboratorio y el análisis de los resultados obtenidos reflejados en el cuaderno de laboratorio. Se valorará la elaboración del diario y las respuestas a las cuestiones propuestas. | Asistencia a prácticas, cuaderno de laboratorio y cuestiones sobre prácticas | 15 |