

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA****Codi:** 36466**Nom:** Química de Coordinació**Cicle:** Grau**Crèdits ECTS:** 6**Curs acadèmic:** 2025-26**TITULACIONS**

Titulació	Centre	Curs	Període
1110 - Grau de Química	Facultat de Química	4	Segon quadrimestre

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
1110 - Grau de Química	Química Inorgànica Aplicada	OPTATIVA

COORDINACIÓ

LLORET PASTOR FRANCISCO

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'estudis 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 s'ha especificat 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 / RESULTATS D' APRENENTATGE

**1110 - Grau de Química**

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudianta podrà identificar els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudianta sabrà identificar l'estructura i reactivitat de les principals classes de biomolècules i la química dels principals processos biològics.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudianta sabrà interpretar la relació de la variació de les propietats característiques dels elements químics amb la taula periòdica.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant podrà descriure les característiques i comportament dels diferents estats de la matèria i les teories emprades per a explicar-los.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant podrà enumerar els principis de la mecànica quàntica i els sabrà aplicar a la descripció de l'estructura i les propietats d'àtoms i molècules.

Al final de la matèria l'estudiant/l'estudiant podrà relacionar la química amb altres disciplines.

Capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític en l'aplicació del mètode científic.

Comprendre les particularitats comptables que presenta la regulació juridicomercantil de les empreses, relacionant la legislació mercantil aplicable als diferents tipus d'operacions societàries amb la comptabilitat dels fets econòmics que es regulen. Aprendre a relacionar les lleis mercantils que s'ocupen dels concursos de creditors amb la comptabilitat, adquirint pràctica en el maneig de determinats textos legals vigents.

Contribuir en el disseny, desenvolupament i execució de solucions que donen resposta a demandes socials, tenint en compte com a referent els Objectius de Desenvolupament Sostenible.

Expressar-se correctament, tant de manera oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.

Ser capaços d'analitzar la influència que sobre el disseny del sistema d'informació de costos, exercixen, tant l'activitat concreta desenrotllada per l'entitat com la tecnologia utilitzada, l'estructura organitzativa i l'estil de direcció. Calcular costos preestablits i relacionar-los amb la planificació i el control de l'activitat interna. Seleccionar aquells indicadors de gestió que faciliten l'exercici personal, establint la freqüència i el format en funció de l'usuari de destí.

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 d'una configuració dn: mètode de factorització despi. Energia relativa dels termes: paràmetres de Racah.

1.3.- Acoblament espí-òrbita: nivells d'energia.

1.4.- Efecte d'un camp magnètic extern sobre els nivells d'energia d'un 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 permeses i després prohibides. Regla de selecció de Laporte.
- 3.3.- Transicions electròniques després permeses. Anàlisi de l'espectre d'absorció en el visible dels complexos octaèdrics i tetraèdrics dels metalls de transició. Transicions després prohibides.

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 imanació en complexos mono i polinuclears.

VOLUM DE TREBALL (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Tutories	9,00
Teoria	51,00
Total hores	60,00

ACTIVITATS NO PRESENCIALS



Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	0,00
Estudi i treball autònom	70,00
Preparació de classes	0,00
Preparació d'activitats d'avaluació	20,00
Resolució de casos pràctics	0,00
Total hores	90,00

METODOLOGIA DOCENT

Classes expositives. En les dites classes el professor donarà una visió general del tema objecte d'estudifent 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.

ho considera el professor.

AVALUACIÓ

PRIMERA CONVOCATÒRIA

Els coneixements adquirits s'avaluaran mitjançant prova final en la data establerta per la Facultat i suposaran el 80% de la nota final. L'examen constarà de preguntes objectives sobre els coneixements que es consideren bàsics (veure la llista de resultats de l'aprenentatge) i de problemes numèrics i de relació que obliguen a considerar els aspectes de l'assignatura que apareixen en els diferents temes.

Es valorarà amb un 20% de la nota final la participació de l'estudiant en qualsevol de les activitats que es plantegen durant el període lectiu i que estiguen relacionades amb la matèria, entre les quals cal destacar:

- Presentació de problemes i exercicis resoltos.
- Assistència i participació raonada i clara en les discussions que es plantegen.
- Resolució de problemes i plantejament de dubtes.
- Realització de treballs i/o exposicions orals.
- Realització de proves escrites.
- Qualsevol altra activitat formativa complementària que determine el professor o professora.

La nota final serà la de la prova final més la que s'obtinga en totes les activitats que es plantegen, amb el



percentatge indicat per a cadascuna d'elles.

Per a aprovar l'assignatura l'alumne ha d'obtindre una nota mínima de 5 en la prova final.

SEGONA CONVOCATÒRIA

En segona convocatòria es mantindrà la nota d'avaluació contínua, amb les mateixes condicions i percentatges descrits per a la primera convocatòria. L'examen escrit de segona convocatòria es realitzarà en la data fixada per la Facultat.

Advertiment final

La còpia o plagi manifest de qualsevol tasca que forma part de l'avaluació suposarà la impossibilitat de superar l'assignatura.

Cal tindre en compte que, d'acord amb l'article 13 d) de l'Estatut de l'Estudiant Universitari (RD 1791/2010, de 30 de desembre), *¿és deure d'un estudiant abstindre's en la utilització o cooperació en procediments fraudulents en les proves d'avaluació, en els treballs que es realitzen o en documents oficials de la Universitat¿.*

BIBLIOGRAFIA

- 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).
- 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.



VNIVERSITAT ID VALÈNCIA

Guia Docent
36466 Química de Coordinació
