

Química Inorgánica Avanzada***GUIA DOCENTE***

I. DATOS INICIALES DE IDENTIFICACION

Nombre de la asignatura:	Química Inorgánica Avanzada
Carácter:	Troncal/ anual/ 9 créditos
Titulación:	Licenciado en Química
Ciclo:	Segundo Ciclo
Departamento:	Química Inorgánica
Profesor responsable:	Juan Faus Payá Edificio F, tercera planta e-mail: Juan.Faus@uv.es Tlf: 963544856

II. INTRODUCCION

La Química Inorgánica Avanzada es una asignatura de carácter troncal y anual que se imparte en el segundo ciclo de la Licenciatura en Química (cuarto curso) y consta de un total de 9 créditos, 6 teóricos y 3 prácticos.

Está dedicada esencialmente al estudio de la Química de Coordinación de los elementos de transición aunque incluye también algunos temas sobre Sólidos Inorgánicos. Es una asignatura esencial en el plan de estudios, ya que los compuestos de coordinación no solo son un tipo de compuestos químicos especialmente importantes sino que representan una forma de enfocar el estudio de la Química Inorgánica aplicable en una enorme variedad de sistemas. Tiene carácter integrador comprendiendo tanto conceptos y teorías como hechos experimentales y abarcando desde la estructura electrónica y molecular a la síntesis y reactividad de las sustancias, termodinámica y cinética, estudios básicos y aplicaciones. Por su naturaleza se extiende desde la Química Teórica a la Bioquímica y en ella se difuminan los límites convencionales entre la Química Inorgánica y la Química Orgánica.

III. VOLUMEN DE TRABAJO

La asignatura tiene 9 créditos. Considerando un crédito de 25 horas, el volumen total de trabajo es de 224 horas que se distribuyen de la siguiente forma:

Asistencia a clases teórico-prácticas	64
Asistencia a tutorías	10
Preparación de trabajos	40
Realización de exámenes	10
Estudio	100

IV. OBJETIVOS GENERALES

Proporcionar al alumno un bagaje conceptual que le permita comprender y facilite recordar el conocimiento acumulado sobre la naturaleza, las propiedades y el comportamiento de los compuestos de coordinación de los metales de transición así como el de los sólidos no moleculares. Familiarizar al estudiante con ejemplos concretos de compuestos importantes, su estructura electrónica y molecular (o cristalina) y sus reacciones químicas. Capacitarlo para que pueda aplicar los conceptos aprendidos en la racionalización de hechos experimentales y en la predicción de comportamientos en sistemas no conocidos de antemano.

V. CONTENIDOS

La asignatura consta de tres partes bien diferenciadas: *i)* Estructura electrónica de los átomos y iones libres de los elementos de transición, *ii)* Compuestos de coordinación y *iii)* Química del estado sólido. En la primera parte (Tema 1) se presenta y discute con detalle el conocimiento actual de la estructura electrónica de estos elementos resultado tanto de cálculos teóricos mecano-cuánticos como del análisis de los espectros atómicos. En la segunda parte que es la más extensa (Temas 2-7) se estudian los diferentes aspectos de la química de los compuestos de coordinación de los elementos de transición. Características generales (Tema 2), enlace químico y resultados de los cálculos teóricos de la estructura electrónica (Tema 3), estudio experimental de la misma través del análisis de los espectros electrónicos y las propiedades magnéticas (Tema 4), estructura molecular y factores de los que depende (Tema 5), tipos principales de reacciones químicas (Tema 6) para terminar con un estudio de la aplicación de complejos de los metales de transición como catalizadores (Tema 7). En la tercera y última parte, mucho más breve (Temas 8-11) se estudian algunos aspectos de los sólidos inorgánicos: introducción y clasificación (Tema 8). El enlace químico a través de la teoría de bandas (Tema 9), compuestos no estequiométricos (Tema 10) y reacciones y métodos de síntesis (Tema 11).

VI. DESTREZAS A ADQUIRIR

Sin pretender establecer una relación exhaustiva, a continuación se indican algunas de las destrezas más importantes que deben adquirir los alumnos a lo largo del curso:

- Escribir correctamente y con rapidez la configuración electrónica, el término fundamental y el nivel de menor energía de cualquier ión de un metal de transición, calculando el número de microestados que contienen.
- Calcular todos los términos de una configuración y todos los niveles de un término.
- Establecer a partir de la fórmula de un complejo el estado de oxidación del ión metálico central y por lo tanto su configuración electrónica.
- Utilizar las tablas de caracteres de los grupos puntuales O_h , D_{4h} y T_d .
- Familiarizarse con los ligandos usuales y conocer su comportamiento como tales.
- Escribir las configuraciones electrónicas fundamental y excitadas de cualquier complejo utilizando la teoría de orbitales moleculares, el modelo de solapamiento angular y la teoría del campo cristalino.
- Utilizar correctamente los diagramas de Orgel y de Tanabe y Sugano.
- Analizar el espectro de absorción en el visible de un complejo y predecir sus propiedades magnéticas.
- Racionalizar y predecir en su caso el índice de coordinación y la estructura molecular de un complejo.
- Calcular el número de isómeros de un complejo.
- Clasificar cualquier reacción química de un complejo a partir de su ecuación.
- Predecir la estabilidad relativa de dos o más complejos, así como su carácter lábil o inerte frente a la sustitución de ligando.
- Deducir a partir del comportamiento observado el mecanismo de una reacción redox.
- Relacionar correctamente la estructura cristalina y la estructura electrónica de los diferentes tipos de sólidos inorgánicos.

VII. COMPETENCIAS Y HABILIDADES SOCIALES

Observación crítica de la realidad.

Análisis y síntesis de información.

Razonamiento personal e independiente.

Expresión escrita y oral clara, precisa y ordenada.

VIII. TEMARIO Y PLANIFICACION TEMPORAL

1 Estructura electrónica de los átomos y iones libres de los metales de transición

1.1 Energías orbitales. Configuraciones electrónicas.

1.2 Repulsión interelectrónica: Términos energéticos. Cálculo de los términos de una configuración d^x : método de factorización de spin. Energía relativa de los términos: parámetros de Racah.

1.3 Acoplamiento spin-órbita: niveles de energía.

1.4 Efecto de un campo magnético externo sobre los niveles de energía de un ión metálico de transición: propiedades magnéticas.

(8 horas)

A) COMPUESTOS DE COORDINACIÓN

2 Compuestos de coordinación de los metales de transición

2.1 Concepto de compuesto de coordinación (complejo metálico).

2.2 Caracteres generales: estado de oxidación. Índice y geometría de coordinación. Complejos cuadrados, tetraédricos y octaédricos. Grupos puntuales de simetría D_{4h} , T_d y O_h : tablas de caracteres.

2.3 Tipos de ligandos. Clasificación: naturaleza del átomo dador, denticidad, naturaleza del enlace metal-ligando.

(5 horas)

3 Naturaleza del enlace y estructura electrónica

3.1 Perspectiva histórica

3.2 Teoría del orbital molecular. Diagramas de orbitales moleculares y configuración electrónica de los complejos octaédricos, tetraédricos y cuadrados. Enlace σ y enlace π . Complejos de spin alto y spin bajo. Estados excitados: tipos de transiciones electrónicas.

3.3 Modelo de solapamiento angular. Diagramas de desdoblamiento energético de los orbitales d en complejos de diferentes simetrías.

3.4 Teoría del campo cristalino: aproximación de campo fuerte y débil. Diagramas de Orgel. Diagramas de Tanabe y Sugano.

(10 horas)

4 Espectros electrónicos y propiedades magnéticas

4.1 Análisis del espectro visible: número, posición, anchura e intensidad de las bandas de absorción.

4.2 Propiedades magnéticas y naturaleza del estado electrónico fundamental.

(8 horas)

5 Estructura molecular

5.1 Factores que determinan la estructura molecular de un complejo metálico.

5.2 Predicción de la estructura molecular: Modelo de solapamiento angular, Modelo VSEPR. Estereoquímica de los complejos organometálicos: regla de los 16 y 18 electrones.

5.3 Estudio particular de los diferentes índices y geometrías de coordinación.

5.4 Isomería en los compuestos de coordinación.

(8 horas)

6 Reacciones de los complejos metálicos: Aspectos termodinámicos y cinéticos

6.1 Reacciones de los complejos metálicos: clasificación.

6.2 *Reacciones de sustitución de ligando*. Iones metálicos en disolución acuosa, canje de agua: iones lábiles e inertes. Equilibrios de formación de complejos metálicos en disolución. Constantes de estabilidad. Factores que determinan la estabilidad. Serie

de Irwing-Williams. Efecto quelado. Cinética y mecanismo de las reacciones de sustitución de ligando: complejos cuadrados y octaédricos.

6.3 *Reacciones redox*. Reacciones de transferencia electrónica. Otros tipos de reacciones redox. Espontaneidad de las reacciones redox: constantes de estabilidad y potenciales redox. Mecanismos de las reacciones redox. Reacciones de adición oxidante y eliminación reductora.

6.4 *Reacciones de los ligandos coordinados*. Efectos de la coordinación a un ión metálico sobre la reactividad de los ligandos. Tipos de reacciones de los ligandos coordinados. Reacciones de inserción.

(12 horas)

7 **Catálisis**

7.1 Los complejos metálicos como catalizadores.

7.2 Hidrogenación de alquenos. Carbonilación del metanol. Reacciones de hidrometilación.

(2 horas)

B) QUIMICA DEL ESTADO SÓLIDO

8 **Introducción**

8.1 Sólidos no moleculares: Clasificación.

(1 horas)

9. **Enlace químico y estructura electrónica de los sólidos no moleculares**

9.1 Conceptos básicos de la teoría de bandas: orbitales cristalinos, zona de Brillouin, curvas de densidad de estados (DOS), curvas COOP.

9.2 Bandas de niveles de energía y estructura electrónica de los sólidos. Óxidos de los metales de transición.

(6 horas)

10 **Compuestos no estequiométricos**

10.1 Defectos cristalinos y no estequiometría.

10.2 No estequiometría en los óxidos de los metales de transición. Agregación, ordenación y eliminación de defectos.

(2 horas)

11.- **Reacciones de los sólidos. Métodos de síntesis**

11.1 Reacciones de los sólidos: clasificación.

11.2 Diagramas de fases. Reactividad.

11.3 Métodos de síntesis.

(2 horas)

IX. BIBLIOGRAFÍA DE REFERENCIA

Temas 1-7

- 1 S. F. A. Kettle, *Physical Inorganic Chemistry. A Coordination Chemistry Approach*, Spektrum Academic Publishers, Oxford, 1996.
- 2 C. E. Housecroft, A. G. Sharpe, *Inorganic Chemistry*, 2nd ed., Pearson/Prentice Hall, 2005.
- 3 F. A. Cotton, G. Wilkinson, P. L. Gaus, *Basic Inorganic Chemistry*, 3rd ed., Wiley, 1995.
- 4 D. F. Schriver, P. W. Atkins, *Inorganic Chemistry*, Oxford University Press, 4th ed. 2006.
- 5 K. F. Purcell, J. C. Kotz, *Inorganic Chemistry*, Saunders, 1977 (existe traducción al castellano, editorial Reverté).
- 6 J. Ribas Gispert, *Química de Coordinación*, Edicions de la Universitat de Barcelona/Ediciones Omega, 2000.

Temas 8-11

- 7 L. Smart, E. Moore, *Solid State Chemistry: An Introduction*, 2nd ed. Chapman and Hall, 1995.
- 8 J. K. Burdett, *Chemical Bonding in Solids*, Oxford University Press, 1995.
- 9 R. Hoffman, *Solid and Surfaces: A Chemist's View of Bonding in Extended Structures*, VCH Publishers, 1988.

X. CONOCIMIENTOS PREVIOS

Todos los alumnos matriculados en esta asignatura han cursado previamente otras dos asignaturas de Química Inorgánica. Los conocimientos adquiridos en las mismas son importantes a la hora de iniciar el estudio de la Química Inorgánica Avanzada. En particular se dará por supuesto un conocimiento previo de nomenclatura y formulación, simetría molecular y conceptos básicos de la teoría de grupos, teorías del enlace químico, estructura molecular, termodinámica y cinética química.

XI. METODOLOGIA

La materia objeto de estudio será presentada y discutida en las horas de clase por el profesor, integrando en el mismo discurso tanto la parte teórica como la práctica, por lo que es muy recomendable la asistencia regular a dichas clases expositivas. El aprovechamiento de las mismas facilita en gran medida el aprendizaje que debe realizar cada alumno. Al mismo tiempo se encarece a todos el completar el estudio con la lectura de los capítulos correspondientes de los textos recomendados para contrastar y ampliar en su caso lo discutido en clase.

En clase se repartirá a los alumnos fotocopias de material gráfico, figuras, tablas etc. referentes a la materia explicada. Estas fotocopias se podrán (y deberán) utilizar libremente en los exámenes.

Después de discutir en clase cada tema del programa se entregará a los alumnos una serie de preguntas y/o ejercicios que deberán contestar por escrito y entregar al profesor en un plazo máximo de 15 días.

En las horas de tutorías se hará una reflexión sobre lo estudiado hasta ese momento, aclarando dudas y estimulando el razonamiento crítico e independiente.

XII. EVALUACION DEL APRENDIZAJE

25% de la calificación total: Los trabajos escritos presentados por cada alumno a lo largo del curso. Se evaluará tanto el fondo como la forma: corrección de las respuestas, razonamientos desarrollados, calidad de la redacción y presentación general).

75% de la calificación total: Se realizarán tres exámenes parciales a lo largo del curso, el último con carácter de examen final. Los dos primeros, que eliminan materia en caso de ser aprobados, se pueden repetir al final de curso. Es necesario aprobar independientemente cada uno de ellos (nota mínima 5).

La nota final será la suma de la nota de los trabajos escritos y la de los tres exámenes parciales dividida por cuatro.