



GUÍA DOCENTE 2013-2014
Química Inorgánica II

1. Denominación de la asignatura:

Química Inorgánica II

Titulación

Grado en Química

Código

5279

2. Materia o módulo a la que pertenece la asignatura:

Química Inorgánica

3. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:

Química

4.a Profesor que imparte la docencia (Si fuese impartida por mas de uno/a incluir todos/as) :

M^a Remedios Pedrosa Sáez y Javier García Tojal

4.b Coordinador de la asignatura

Javier García Tojal

5. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:

2º curso, 4º semestre



6. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)

Obligatoria

7. Requisitos de formación previos para cursar la asignatura:

No se han establecido requisitos previos para esta asignatura, si bien se recomienda haber aprobado Química General I.

8. Número de créditos ECTS de la asignatura:

6

9. Competencias que debe adquirir el alumno/a al cursar la asignatura

Los códigos asignados a las competencias (transversales T, generales G y específicas E) son los proporcionados en el archivo Competencias Grado en Química que se adjunta como Recurso a esta Guía Docente.

Competencias Transversales: T1-T6, T8-T12, T17-T22.

Competencias Generales: G1-G5, G7-G9, G11-G16.

Competencias Específicas: E1-E9, E11-E13.

10. Programa de la asignatura

10.1- Objetivos docentes
1.- Definir y aplicar herramientas para abordar la química de los metales de transición, lantánidos y actínidos. 2.- Enfocar el estudio de estos elementos desde la perspectiva de los compuestos de coordinación, organometálicos y estado sólido. 3.- Introducir aspectos fundamentales de la bioinorgánica, catálisis y nanomateriales. 4.- Sintetizar algunos compuestos-tipo que ejemplifican conceptos estudiados. 5.- Realizar e interpretar algunas medidas espectroscópicas.
10.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)



Unidad 1

1. Introducción a la química de la coordinación.

Desarrollo histórico. Números de coordinación y geometría. Complejos polimetálicos. Clasificación de ligandos por tipo de enlace que generan, σ , π , dadores, aceptores y no-inocentes, y por posiciones de coordinación que ocupan. Ligandos neutros, cargados, monodentados, polidentados, puentes y quelantes. Isomerías: de enlace, de ionización, de hidratación, de coordinación y estereoisomería. Estados de oxidación, configuraciones electrónicas y recuento de electrones d. Comparación de los elementos de la primera serie de transición por su configuración electrónica dn .

2. Teoría de grupos y modelos de enlace en los compuestos de coordinación.

Teoría del campo cristalino. Propiedades magnéticas y electrónicas. Uso de la tabla de caracteres. Teoría de orbitales moleculares. Ligandos π dadores y/o aceptores. Modelo de solapamiento angular. Factores energéticos que determinan el número y la geometría de coordinación.

3. Estabilidad de los compuestos de coordinación.

Constantes de formación escalonadas y totales. Factores que afectan a la estabilidad. Naturaleza del ión metálico: clases a, b y límite. Naturaleza del ligando. Serie de Irving-Williams. Efectos quelato y macrocíclico. Influencia de las constantes de estabilidad en la química redox.

4. Mecanismos de las reacciones de los compuestos de coordinación (I).

Reacciones de transferencia de átomos o grupos de átomos. Mecanismos D, A, I. La etapa determinante de la velocidad: Da , Dd , Aa , Ad , Ia , Id . Criterios para asignar mecanismos. Factores que afectan a la reactividad de los complejos planocuadrados: naturaleza del ligando entrante (nucleofilia), efecto trans, efecto cis, naturaleza del ión central. Reacciones de sustitución en complejos octaédricos. El mecanismo de Eigen-Wilkins. Estereoquímica de la sustitución. Hidrólisis catalizada por bases: mecanismo de la base conjugada. Síntesis plantilla.

5. Mecanismos de las reacciones de los compuestos de coordinación (II).

Reacciones de transferencia electrónica. Mecanismos de esfera externa (proceso túnel). Reacciones de autointercambio. La ecuación de Marcus y de Marcus-Hush. La región invertida de Marcus. Mecanismos de esfera interna. Transferencia de dos electrones. Aplicaciones de las reacciones de transferencia electrónica. Transferencia electrónica en estados excitados. Reacciones fotoquímicas redox. Apagado de estados excitados. Quimioluminiscencia. Diseño de una celda fotoelectroquímica. Transferencia electrónica intramolecular: compuestos de valencia mixta.



Unidad 2

6. Bioinorgánica.

Aplicaciones de las reacciones de formación de complejos y de transferencia electrónica en procesos biológicos. Objetivos de la química bioinorgánica. Funciones de las especies inorgánicas en los sistemas biológicos. Macroelementos y elementos traza: esencialidad y toxicidad. Biodisponibilidad. Captación y transformación de los elementos inorgánicos en los seres vivos. Transporte y almacenamiento de oxígeno: hemoglobina y mioglobina. Fijación del nitrógeno: nitrogenasa de molibdeno. Vitamina B12. Sensores. Aplicaciones en medicina.

7. Compuestos organometálicos.

Desarrollo Histórico. Regla de los 18 y 16 electrones. Ligandos y recuento de electrones: sistema covalente o ligando neutro y sistema iónico o dador de pares. Carbonilos metálicos. Frecuencias de grupo y caracterización de carbonilos mediante infrarrojo. "Clusters" y reglas de Wade-Mingos-Lahuer (PSEPT-TPEEP: Teoría de los pares de electrones del esqueleto poliédrico). Tipos de compuestos según el ligando: alquilos y arilos, alquenos, alquinos y dienos no conjugados. Alilos y ciclopentadienilos. Alcanos, hidrógenos agósticos y gases nobles. Reacciones de los compuestos organometálicos de los metales de transición.

8. Química del estado sólido (I).

Estado cristalino y defectos. Descripción de los cristales ideales. Representaciones mediante redes de poliedros. Defectos puntuales, defectos lineales y defectos extensos. Sólidos no estequiométricos. Aspectos termodinámicos y estructurales. Intervalos de composición en fases no estequiométricas. Asimilación y eliminación de defectos. Soluciones sólidas.

9. Química del estado sólido (II).

Métodos preparativos. Principios generales. Procedimientos experimentales. Preparación de precursores para reacciones en estado sólido: coprecipitación. Cinética de reacciones en estado sólido. Cristalización de disoluciones, fundidos, vidrios y geles. Métodos de transporte en fase gaseosa: "chemical vapor deposition". Modificaciones de estructuras ya existentes mediante reacciones de intercambio iónico e intercalación. Métodos de reducción electroquímica. Preparación de capas finas. Crecimiento de monocristales. Métodos de altas presiones y síntesis hidrotermal.

10. Catálisis homogénea y heterogénea.

Naturaleza de los catalizadores. Ciclos catalíticos y etapas. Hidrogenación e hidroformilación de alquenos. Síntesis del amoníaco. Oxidación del SO₂. Interconversión de compuestos aromáticos por zeolitas. Electrocatalisis.



11. Nanomateriales, nanociencia y nanotecnología.

Fabricación y caracterización. Materiales dispuestos en capas. Autoensamblaje y química supramolecular. Nanocompuestos híbridos orgánico-inorgánicos. Nanomateriales bioinorgánicos.

12. Prácticas de laboratorio.

10.3- Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F., (2006) Inorganic chemistry, 4ª, Oxford University Press, New York,
- Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F., (2008) Química inorgánica, 4ª, McGraw-Hill Interamericana, México D. F.,
- Cotton, F. A., (1990) Chemical applications of group theory, 3ª, John Wiley & Sons, New York,
- Douglas, B. E.; McDaniel, D. H.; Alexander, J. J., (1994) Concepts and models in inorganic chemistry, 3ª, John Wiley & Sons, New York,
- Douglas, B. E.; McDaniel, D. H.; Alexander, J. J., (1987) Conceptos y modelos de química inorgánica, 2ª, Reverté, Barcelona,
- Faus, Juan. María Vallet (coord.) ; Juan Faus, Enrique García-, Introducción a la química bioinorgánica, Madrid : Síntesis, D.L. 2003,
- Housecroft, Catherine E.; Sharpe Alan G., (2008) Inorganic chemistry, 3ª, Pearson Education Limited, New Jersey,
- Housecroft, Catherine E.; Sharpe Alan G., (2006) Química inorgánica, 2ª, Pearson Educación S. A., Madrid,
- Huheey, James E.; Keiter, Ellen A.; Keiter, Richard L., (1993) Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, 4ª, Harper Collins, New York,
- Huheey, James E.; Keiter, Ellen A.; Keiter, Richard L., (1997) Química inorgánica. principios de estructura y reactividad, 4ª, Oxford University Press, México D. F.,
- Kettle, S. F. A., (1998) Physical inorganic chemistry: a coordination chemistry approach, 1ª, Oxford University Press, New York,
- Lawrance, G. A., (2010) Introduction to coordination chemistry, 1ª, Wiley, Chichester,
- Nakamoto, K., (2009) Infrared and raman spectra of inorganic and coordination compounds, 6ª, John Wiley & Sons, New York, (Vols. 1 y 2)
- Ribas Gispert, J., (2000) Química de coordinación, 1ª, Omega, Barcelona,
- Ribas Gispert, J., (2008) Coordination chemistry, 1ª, Wiley-VCH, Weinheim,



West, A R., (1999) Basic solid state chemistry, 2ª, John Wiley & Sons, Chichester,

11. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante:

La asignatura consta de un número de sesiones presenciales (que completan 53 h) y trabajo no presencial (tanto individual como, menos frecuentemente, en grupos reducidos de tres personas, que representa las 97 h restantes).

Las sesiones presenciales se dividen en: (a) clases que simultanean dinámicas expositivo-magistrales con ejercicios prácticos; (b) prácticas en laboratorio; (c) seminarios fundamentalmente prácticos; y (d) dos exámenes, al final de sendas Unidades, el primero de los cuales permite liberar materia siempre que su calificación sea igual o superior a 5 puntos sobre 10.

El trabajo no presencial está dirigido a asegurar la lectura y comprensión de lo impartido en clase, su aplicación, la búsqueda de información que permita completar aspectos puntuales y la integración de las competencias y conceptos implícitos en los objetivos de la asignatura. Para ello exigiremos una serie de entregas, evaluables.

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
Clases teóricas	T1-T4, T6, T8, T9, T11, T12, T17-T22. G1-G5, G12, G14-G16. E1-E9, E11-E13.	24	36	60
Prácticas de laboratorio	T1-T6, T8, T9, T11, T12, T17-T22. G1-G5, G7-G9, G11-G16. E1-E9, E11-E13.	10	18	28
Seminarios, Debates	T1-T4, T6, T8, T10-T12, T17-T22. G1-G4, G12, G14-G16. E1-E9, E11-E13.	14	33	47
Evaluación-Exámenes	T1, T2, T5, T6, T8, T11, T17, T19, T22.	5	10	15



	G1-G4, G12, G14-G16. E1-E9, E11-E13.			
Total		53	97	150

12. Sistemas de evaluación:

Para aprobar la asignatura se requerirá alcanzar en cada uno de estos bloques una calificación mínima del 30 % y un mínimo de 5 puntos sobre 10 en la nota ponderada que incluye todos los procedimientos anteriores.

Se considerarán como recuperables las pruebas escritas: seminarios, entregas y exámenes. El resto de los procedimientos son no recuperables por su propia naturaleza.

Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
Seminarios y entregas	40 %	40 %
Prácticas de laboratorio y tareas relacionadas	20 %	20 %
Exámenes	40 %	40 %
Total	100 %	100 %

Evaluación excepcional:

Entrega de un cuaderno, con las prácticas de la asignatura desarrolladas	(20%)
Prueba escrita sobre los conocimientos adquiridos en la Unidad 1	(40%)
Prueba escrita sobre los conocimientos adquiridos en la Unidad 2	(40%)

13. Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial:

La docencia se desarrolla en el aula con apoyo de pizarra, recursos de red (plataforma UBUVirtual y contenidos de internet) y medios de proyección audiovisual.

El apoyo tutorial se lleva a cabo por los procedimientos establecidos en la UBU (<http://www.ubu.es/quimica>)



14. Calendarios y horarios:

Los establecidos por la Facultad y publicados en la página web del título
(<http://www.ubu.es/quimica>)

15. Idioma en que se imparte:

Español (posibilidad de algunos recursos en inglés)