



FACULTADE DE QUÍMICA

Universidade de Vigo

Máster en Industria e Investigación Química

Complejos Metálicos

Guía Docente

curso 2014-15

Guía Docente

1. Datos descriptivos de la materia.

Carácter: Optativa

Convocatoria: 1^{er} cuatrimestre

Créditos: 3 ECTS

Profesorado:

Manuel R. Bermejo Patiño

Catedrático de Química Inorgánica,
del Departamento de Química Inorgánica,
Facultad de Química

Universidade de Santiago de Compostela
Clases expositivas y Grupos de seminario

Alberto Fernández López

Catedrático de Química Inorgánica,
del Departamento de Química Fundamental,
Facultad de Ciencias

Universidade da Coruña
Grupos de seminario

Jesús A. Castro Fojo

Profesor Titular de Química Inorgánica,
del Departamento de Química Inorgánica,
Facultad de Química

Universidade de Vigo
Grupos de seminario

Idioma en que es impartida: Gallego y Español.

2. Situación, significado e importancia de la materia en el ámbito de la titulación.

2.1. Especialidad a la que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona.

Especialidad de Química Sintética. La materia se relaciona con las restantes de su especialidad. Por ejemplo, los complejos metálicos tienen muchas características en común con los compuestos organometálicos, ya que sus estructuras se pueden justificar utilizando las mismas teorías de enlace y muchas de las reacciones que experimentan transcurren por mecanismos similares. Los complejos de coordinación también se emplean como catalizadores, tanto a nivel de laboratorio como a nivel industrial.

2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios.

Este curso se enmarca en la especialidad de Química Sintética dedicado al estudio de la síntesis de diversas especies químicas tanto desde el punto de vista investigador como a nivel industrial. Dentro de dicha especialidad se han escogido algunos tipos de compuestos que, ya sea por sus especiales características, ya sea por sus aplicaciones potenciales futuras, merecen un estudio detallado. Teniendo esto en cuenta, la Química de la Coordinación merece un estudio aparte, tanto por las particulares características de los compuestos de coordinación como por sus particulares métodos de síntesis. Desde otro punto de vista los llamados complejos se presentan en una variedad estructural enorme que va desde especies de dimensión molecular pasando por agregados supramoleculares, polímeros mono-, bi-, y tridimensionales hasta llegar a los llamados Metal Organic Frameworks (MOF) que forman redes tridimensionales ordenadas. Dada esta enorme variedad estructural, no es de sorprender que el número de propiedades y aplicaciones que presentan sea también diverso. Todas estas razones justifican su inclusión tanto en la especialidad de Química sintética como en un Máster dedicado al estudio de la Química.

2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.

El alumno debe tener conocimientos básicos de la Química de la Coordinación, tales como el concepto de compuesto de coordinación y sus diversos componentes, así como nociones de las teorías de enlace que se emplean para describirlos.

3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.

3.1. Objetivos del aprendizaje.

- Ser capaz de diseñar rutas de síntesis y aislamiento de compuestos de coordinación.
- Ser capaz de identificar la presencia de quiralidad en compuestos de coordinación mononucleares identificando su origen.
- Describir los factores que permiten la activación de pequeñas moléculas mediante la coordinación a centros metálicos, así como las aplicaciones que estas propiedades pueden tener.

- Describir los mecanismos de las reacciones de sustitución y oxidación-reducción en los compuestos de coordinación, así como sus aplicaciones en síntesis química.

3.2. Competencias generales.

- Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación
- Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
- Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional.
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

3.3. Competencias específicas.

- Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la química.
- Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades de la química.
- Aplicar los materiales y las biomoléculas en campos innovadores de la industria e ingeniería química.
- Operar con instrumentación avanzada para el análisis química y la determinación estructural.

3.4. Competencias transversales.

• 4. *Contenidos del curso.*

4.1. Epígrafes del curso:

Contenidos teóricos:

1. Qué son los compuestos de coordinación y cómo se preparan.
2. Algunas propiedades interesantes de los compuestos de coordinación: quiralidad, efecto del átomo del metal sobre la reactividad de los ligandos.
3. Aspectos termodinámicos de la formación de los compuestos de coordinación.
4. La cinética de los compuestos de coordinación.
5. Aplicaciones de los compuestos de coordinación: los complejos metálicos como catalizadores y otras aplicaciones.

4.2. Bibliografía recomendada

- J. Rivas Gispert (2000). "Química de Coordinación". Ediciones Omega S.A. J. Ribas Gispert (2008). Coordination Chemistry (versión en inglés de Química de Coordinación). Willey-VCH, Weinheim
- P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller y F. A. Armstrong (2008). "Química Inorgánica de Shriver y Atkins" Versión en español de la 4ª edición de "Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry". McGraw-Hill Interamericana P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller and F. A. Armstrong. (2009). "Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry" 5th ed. W. H. Freeman and company, New York

TEMA 1. Compuestos de coordinación: preparación y propiedades.

1. Sentido del tema (Introducción)

En este tema se hará un breve repaso al concepto de compuesto de coordinación y su desarrollo histórico, así como a sus principales métodos de preparación. También se estudiarán algunas de las propiedades características de los complejos metálicos, entre las que cabe destacar la quiralidad.

2. Epígrafes del tema.

Desarrollo histórico. Constitución. Índice de coordinación y estereoquímica. Métodos de obtención. Isomería. Quiralidad.

3. Bibliografía

- J. Rivas Gispert (2000). "Química de Coordinación". Ediciones Omega S.A. J. Ribas Gispert (2008). Coordination Chemistry (versión en inglés de Química de Coordinación). Willey-VCH, Weinheim
- P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller y F. A. Armstrong (2008). "Química Inorgánica de Shriver y Atkins" Versión en español de la 4ª edición de "Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry". McGraw-Hill Interamericana P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller and F. A. Armstrong. (2009). "Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry" 5th ed. W. H. Freeman and company, New York

4. Actividades a desarrollar.

El alumno tendrá que realizar los ejercicios relacionados con este tema indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar en el horario de tutorías con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 2. Aspectos termodinámicos de la formación de complejos metálicos.

1. Sentido del tema (Introducción)

Este tema está enfocado a que el alumno conozca algunos de los factores que influyen en la mayor o menor estabilidad de los complejos con el objetivo de que sea capaz de utilizarlos para el diseño inteligente de nuevos compuestos de coordinación.

2. Epígrafes del tema.

Factores que influyen en la estabilidad de los compuestos de coordinación. Estabilización de complejos con índices de coordinación elevados y altos estados de oxidación.

3. Bibliografía

- J. Rivas Gispert (2000). "Química de Coordinación". Ediciones Omega S.A. J. Ribas Gispert (2008). Coordination Chemistry (versión en inglés de Química de Coordinación). Willey-VCH, Weinheim.
- P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller y F. A. Armstrong (2008). "Química Inorgánica de Shriver y Atkins" Versión en español de la 4ª edición de "Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry". McGraw-Hill Interamericana P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller and F. A. Armstrong. (2009). "Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry" 5th ed. W. H. Freeman and company, New York.

4. Actividades a desarrollar.

El alumno tendrá que realizar los ejercicios relacionados con este tema indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar en el horario de tutorías con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 3. La cinética de los compuestos de coordinación

1. Sentido del tema (Introducción)

Una vez vistos algunos de los principales factores que influyen en la estabilidad de los complejos, se resaltarán la diferencia que existe entre el concepto de estabilidad/inestabilidad y el de inercia/labilidad. A continuación, se estudiará el mecanismo de algunos de los principales tipos de reacciones que experimentan los complejos metálicos.

2. Epígrafes del tema.

Termodinámica vs. cinética. Clasificación de los mecanismos de reacción. Mecanismos en reacciones no oxidantes. Mecanismos en los procesos de transferencia de electrones.

3. Bibliografía

- J. Rivas Gispert (2000). "Química de Coordinación". Ediciones Omega S.A. J. Ribas Gispert (2008). Coordination Chemistry (versión en inglés de Química de Coordinación). Willey-VCH, Weinheim.
- P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller y F. A. Armstrong (2008). "Química Inorgánica de Shriver y Atkins" Versión en español de la 4ª edición de "Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry". McGraw-Hill Interamericana P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller and F. A. Armstrong. (2009). "Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry" 5th ed. W. H. Freeman and company, New York.

4. Actividades a desarrollar.

El alumno tendrá que realizar los ejercicios relacionados con este tema indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar en el horario de tutorías con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 4. Propiedades y aplicaciones de los compuestos de coordinación.

1. Sentido del tema (Introducción)

En este tema se estudiarán algunas de las aplicaciones más interesantes de este tipo de compuestos así como sus perspectivas de futuro. Entre sus aplicaciones cabe destacar la catálisis, pero también se estudiarán otras propiedades tales como la modificación de la reactividad de los ligandos coordinados que permite explicar su presencia y entender su actividad en los seres vivos y sus potenciales aplicaciones en química médica.

2. Epígrafes del tema.

La influencia de los complejos metálicos en la química sintética. Los complejos metálicos en catálisis. Algunas propiedades importantes de los complejos metálicos.

3. Bibliografía

- J. Rivas Gispert (2000). "Química de Coordinación". Ediciones Omega S.A. J. Ribas Gispert (2008). Coordination Chemistry (versión en inglés de Química de Coordinación). Willey-VCH, Weinheim.
- P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller y F. A. Armstrong (2008). "Química Inorgánica de Shriver y Atkins" Versión en español de la 4ª edición de "Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry". McGraw-Hill Interamericana P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller and F. A. Armstrong. (2009). "Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry" 5th ed. W. H. Freeman and company, New York.

4. Actividades a desarrollar.

El alumno tendrá que realizar los ejercicios relacionados con este tema indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar en el horario de tutorías con el profesor para recibir el apoyo necesario.

5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

5.1. Atribución de créditos ECTS.

TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA	HORAS	TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO	HORAS
Clases expositivas en grupo grande	12	Estudio autónomo individual o en grupo	33
Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)	7	Preparación y resolución de boletines de problemas u otros trabajos.	21
Tutorías en grupo muy reducido	2		
Total horas trabajo presencial en el aula o en el laboratorio	21	Total horas trabajo personal del alumno	54

5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del profesor

A) *Clases expositivas en grupo grande*: Se llevarán a cabo 12 sesiones de clases magistrales en grupo único donde se desarrollarán los contenidos teóricos de la materia acompañados de los correspondientes ejemplos ilustrativos. Consistirá mayoritariamente en presentaciones de Power Point. Los alumnos tendrán, con suficiente antelación, las copias de las correspondientes presentaciones, con el fin de que el alumno pueda preparar previamente la materia que se va a impartir, además de facilitar el seguimiento de las explicaciones. Se fomentará en todo momento la participación interactiva del alumno. La asistencia a estas clases no es obligatoria, pero resulta muy recomendable.

B) *Clases interactivas en grupo reducido*: Se propone llevar a cabo 7 sesiones de seminarios de problemas de grupo reducido donde los alumnos resolverán los problemas planteados por el profesor en los boletines correspondientes. Los alumnos dispondrán con suficiente antelación de dichos boletines para que los elaboren individualmente antes del inicio de estas clases. Se utilizarán también para resolver las dudas que vayan surgiendo al dar el temario. La asistencia a estas clases es obligatoria.

D) *Tutorías en grupo muy reducido*: Tutorías programadas por el profesor y coordinadas por el Centro. En general, supondrán para cada alumno 2 horas. Estarán orientadas fundamentalmente a la resolución de dudas, tanto en lo referido a la materia impartida en las clases expositivas como, sobre todo, a aquellas que surjan al alumno durante la preparación de los problemas y que no puedan ser resueltas en las clases de grupo reducido.

5.3. Recomendaciones para el estudio de la materia

- Es muy importante asistir a las clases expositivas.
- Es fundamental mantener el estudio de la materia "al día".
- La resolución de problemas es clave para el aprendizaje de esta materia.

- **5.4. Calendario de actividades.**

6. Indicaciones sobre la evaluación.

6.1. Procedimiento de evaluación.

La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua y la realización de un examen final, estando condicionado el acceso al examen a la participación en al menos el 80% de las actividades docentes presenciales de asistencia obligatoria (seminarios de problemas y tutorías).

La evaluación continua (N1) tendrá un peso del 40% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: clases interactivas de grupo reducido (seminarios) y clases interactivas de grupo muy reducido (tutorías). Los seminarios y las tutorías incluirán los siguientes elementos resolución de problemas y casos prácticos (15%), realización de trabajos e informes escritos (5%), exposición oral [(casos prácticos, problemas), 10%] y cuestiones orales durante el curso (10%).

El examen final (N2) versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura.

La calificación del alumno se obtendrá cómo resultado de aplicar la fórmula siguiente:

$$\text{Nota final} = \text{máximo } (0.4 \times N1 + 0.6 \times N2)$$

Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 la nota numérica del examen final (escala 0-10).

Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez.

6.2. Recomendaciones de cara a la evaluación.

El alumno debe repasar los conceptos teóricos introducidos en los distintos temas. El grado de acierto en la resolución de los ejercicios propuestos proporciona una medida de la preparación del alumno para afrontar el examen final de la asignatura. Aquellos alumnos que encuentren dificultades importantes a la hora de trabajar las actividades propuestas deben acudir en las horas de tutoría del profesor, con el objetivo de que éste pueda analizar el problema y ayudar a resolver dichas dificultades. Es muy importante a la hora de preparar el examen resolver los ejercicios.

6.3. Recomendaciones de cara a la recuperación.

El profesor analizará con aquellos alumnos que no superen con éxito el proceso de evaluación, y así lo deseen, las dificultades encontradas en el aprendizaje de los contenidos de la asignatura. También les proporcionará material adicional (cuestiones, ejercicios, exámenes, etc.) para reforzar el aprendizaje de la materia.