



UNIVERSIDAD DE JAÉN

**TITULACIÓN: GRADO EN QUÍMICA**

**CENTRO: FACULTAD DE CIENCIAS EXPERIMENTALES**

**CURSO ACADÉMICO: 2011-12**

## GUÍA DOCENTE

### 1. DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

NOMBRE: Química Inorgánica II

CÓDIGO: 10312011

CURSO ACADÉMICO: 2011-12

TIPO: Obligatoria

Créditos ECTS: 6

CURSO: 3º

CUATRIMESTRE: 1º

### 2. DATOS BÁSICOS DEL PROFESORADO

NOMBRE: Miguel N. Moreno Carretero

CENTRO/DEPARTAMENTO: Fac. C. Experimentales/Química Inorgánica y Orgánica

ÁREA: Química Inorgánica

Nº DESPACHO: B3-445

E-MAIL:

mmoreno@ujaen.es

TLF: 953212738

URL WEB:

NOMBRE: Sonia B. Jiménez Pulido

CENTRO/DEPARTAMENTO: Fac. C. Experimentales/Química Inorgánica y Orgánica

ÁREA: Química Inorgánica

Nº DESPACHO: B3-466

E-MAIL:

sjimenez@ujaen.es

TLF: 953212150

URL WEB:

NOMBRE: Nuria A. Illán Cabeza

CENTRO/DEPARTAMENTO: Fac. C. Experimentales/Química Inorgánica y Orgánica

ÁREA: Química Inorgánica

Nº DESPACHO: B3-463

E-MAIL:

naillan@ujaen.es

TLF: 953212949

URL WEB:



UNIVERSIDAD DE JAÉN

### 3. PRERREQUISITOS, CONTEXTO Y RECOMENDACIONES

#### PRERREQUISITOS:

Se requiere una buena base de conocimientos en enlace químico y estructura de la materia, termodinámica y cinética de las reacciones químicas y nociones de simetría.

#### CONTEXTO DENTRO DE LA TITULACIÓN:

Esta asignatura pertenece al currículo básico de Química Inorgánica en la Titulación de Grado en Química ya que su objetivo consiste en ampliar los conocimientos de Química Inorgánica adquiridos en cursos anteriores, incidiendo en tópicos importantes dentro de la disciplina. Viene a completar lo aprendido en la asignatura de Química Inorgánica I que se imparte en 2º curso del grado y con las asignaturas prácticas Laboratorio de Química Inorgánica I y Laboratorio de Química Inorgánica II, que se imparten en 2º y 3º curso, respectivamente.

#### RECOMENDACIONES Y ADAPTACIONES CURRICULARES:

- Tener aprobadas las asignaturas: Química General I, Química General II, Operaciones Básicas de Laboratorio I, Operaciones Básicas de Laboratorio II, Cristalografía, Mineralogía y Geoquímica, Química Inorgánica I y Laboratorio de Química Inorgánica I.
- Conocimiento medio de inglés a nivel de traducción.
- Convalidable por Química Inorgánica Avanzada (Plan 1997).

### 4. COMPETENCIAS Y RESULTADOS DE APRENDIZAJE

<b>código</b>	<b>Denominación de la competencia</b>
B2	Capacidad de organización y planificación
B9	Razonamiento crítico
Q1	Capacidad para demostrar el conocimiento y comprensión de los hechos esenciales, conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química
Q3	Competencia para evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química
C6	Aplicar los principios de mecánica cuántica en la descripción de la estructura y propiedades de átomos y moléculas
C16	Relacionar el fundamento de las técnicas instrumentales y sus aplicaciones
<b>Resultados de aprendizaje</b>	
Resultado 1	Conocer y poder razonar sobre la estructura, propiedades y reactividad de los compuestos de coordinación.
Resultado 2	Conocer y poder razonar sobre la estructura y las relaciones estructura-propiedad de los sólidos.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Resultado 3	Conocer las características más relevantes de los compuestos organometálicos así como su uso en catálisis.
Resultado 4	Conocer el fundamento y ámbito de uso de las principales técnicas instrumentales usadas en la determinación estructural de compuestos inorgánicos.

## 5. CONTENIDOS

### 0.- PRESENTACIÓN

Presentación de la asignatura: Situación dentro de la disciplina y la titulación. Objetivos, contenidos y método de trabajo. Bibliografía. Evaluación.

### QUÍMICA DE LA COORDINACIÓN

#### 1.- EL ENLACE EN LOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN (I): TEORÍA DEL ENLACE DE VALENCIA Y DEL CAMPO DEL CRISTAL

Introducción histórica. Teoría del enlace de valencia: aplicación, ventajas e inconvenientes. Teoría del campo cristalino. Desdoblamiento energético de los orbitales *d* en campos de simetría octaédrica, tetraédrica y plano-cuadrada. Serie espectroquímica. Efecto Jahn-Teller. Limitaciones de la teoría del campo cristalino.

#### 2.- EL ENLACE EN LOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN (y II): TEORÍA DE LOS ORBITALES MOLECULARES

Evidencias experimentales del carácter covalente del enlace metal-ligando. Teoría de los orbitales moleculares. Complejos con ligandos  $\pi$  aceptores y  $\pi$  dadores. Modelo del solapamiento angular.

#### 3.- ESPECTROS ELECTRÓNICOS Y PROPIEDADES MAGNÉTICAS

Niveles de energía en el ión libre. Parámetros de Racah. Diagramas de correlación: diagramas de Orgel y de Tanabe-Sugano. Interpretación de los espectros electrónicos. Estudio de las propiedades magnéticas. Correlaciones magneto-estructurales.

#### 4.- ASPECTOS ESTRUCTURALES: ESTEREOQUÍMICA E ISOMERÍA

Estereoquímicas habituales de las diversas configuraciones electrónicas. Índices de coordinación poco comunes. Estructuras estereoquímicamente no rígidas. Tipos de isomería en los compuestos de coordinación.

#### 5.- ASPECTOS TERMODINÁMICOS: ESTABILIDAD EN DISOLUCIÓN

Definición de los equilibrios de estabilidad de un complejo y sus constantes respectivas. Factores que afectan a la estabilidad. Efectos quelato, criptato y macrocíclico. Determinación experimental de las constantes de estabilidad.

#### 6.- ASPECTOS CINÉTICOS: MECANISMOS DE LAS REACCIONES DE SUSTITUCIÓN Y TRANSFERENCIA ELECTRÓNICA



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Reacciones de sustitución en complejos plano-cuadrados y octaédricos. Mecanismos disociativo, asociativo y de intercambio. Efecto e influencia *trans*. Reacciones de transferencia electrónica. Mecanismos de esfera externa e interna. Ejemplos de aplicación en síntesis.

7.- ASPECTOS BIOLÓGICOS: INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA BIOINORGÁNICA  
Los elementos metálicos y sus complejos en sistemas biológicos. Transporte y almacenamiento de oxígeno. Procesos de transferencia electrónica. La fijación del nitrógeno. Aplicaciones farmacológicas.

### **QUÍMICA ORGANOMETÁLICA**

8.- COMPLEJOS CON LIGANDOS  $\pi$ -ACEPTORES: CARBONILOS Y NITROSILOS METÁLICOS

Regla del número atómico efectivo. Clasificación de los carbonilos. Síntesis y propiedades. Estructura y naturaleza del enlace. Tipos de reacciones de los carbonilos. Derivados de los carbonilos metálicos: aniones carbonilato, hidruros y haluros. Nitrosilos metálicos. Estructura, enlace y propiedades. Otros complejos con ligandos aceptores  $\pi$ .

9.- INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA ORGANOMETÁLICA

Introducción. Clasificación de los compuestos organometálicos por tipos de enlace. El enlace metal-carbono: energía, polaridad y reactividad. Factores que afectan a la estabilidad del enlace metal-carbono. Compuestos con enlace  $\sigma$  metal-carbono y  $\pi$  metal-carbono: Características y tipos de ligandos. Compuestos  $\pi$ -olefínicos. Metalocenos.

10.- APLICACIONES EN CATÁLISIS

Generalidades. Catálisis homogénea y heterogénea. Los compuestos organometálicos y la catálisis. Ejemplos.

### **QUÍMICA DEL ESTADO SÓLIDO**

11.- ESTRUCTURA DE LOS SÓLIDOS

Introducción. Importancia de estudio de la estructura de los sólidos. Sólidos cristalinos y amorfos. Redes cristalinas. Estructuras basadas en empaquetamientos compactos: El modelo de esferas rígidas (HSM). Predicción de estructuras en función del tipo de enlace.

12.- DESORDEN Y NO ESTEQUIOMETRÍA EN SÓLIDOS

Defectos en cristales: defectos puntuales vacantes (Schottky) e intersticiales (Frenkel). Defectos lineales: Dislocaciones de arista y hélice. Compuestos no estequiométricos.

13.- SÍLICE Y SILICATOS

Sílice: estructura cristalina y polimorfía. Silicatos: Caracteres estructurales y



UNIVERSIDAD DE JAÉN

clasificación: aniones discretos, lineales, laminares y tridimensionales.

#### 14.- ÓXIDOS METÁLICOS

Clasificación y tipos de enlace. Carácter ácido-base. Descripción de las estructuras más frecuentes. Óxidos mixtos: Clasificación, estructura y propiedades.

#### 15.- ISO Y HETEROPOLIANIONES

Estructura de los isopolianiones. Estructura de los heteropolianiones. Propiedades generales.

### MÉTODOS EXPERIMENTALES PARA LA DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL EN COMPUESTOS INORGÁNICOS

#### 16.- MÉTODOS TÉRMICOS

Análisis termogravimétrico y análisis térmico diferencial. Calorimetría diferencial de barrido. Métodos basados en técnicas acopladas: TG-FTIR, TG-MS y TG-CG.

#### 17.- MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS

Espectroscopía electrónica. Espectroscopía infrarroja. Espectroscopía de resonancia magnética nuclear. Espectroscopía de resonancia de espín electrónico.

#### 18.- MÉTODOS DE DIFRACCIÓN

Difracción de rayos X en polvo y en monocristal.

## 6. METODOLOGÍA Y ACTIVIDADES

ACTIVIDADES	HORAS PRESENCIALES	HORAS DE TRABAJO AUTÓNOMO	TOTAL DE HORAS	CRÉDITOS ECTS	COMPETENCIAS (Códigos)
Clases magistrales	36	54	90	3.6	B2,C6,C16
Seminarios y actividades dirigidas con presencia del profesor	20	30	50	2.0	B9,Q3
Tutorías individuales	2	3	5	0.2	Q1,Q3
Examen	2	3	5	0.2	B2,B9,Q1,Q3
<b>TOTALES:</b>	<b>60</b>	<b>90</b>	<b>150</b>	<b>6.0</b>	



UNIVERSIDAD DE JAÉN

## 7. SISTEMA DE EVALUACIÓN

ASPECTO	CRITERIOS	INSTRUMENTO	PESO
Conceptos de la materia y resolución de ejercicios y cuestiones relacionados con dichos conceptos.	Dominio de los conocimientos de la materia teóricos y prácticos.	Examen	70%
Asistencia, participación en la resolución de ejercicios, y presentación y exposición de temas y cuestiones relacionadas con los contenidos de la asignatura.	Implicación, dominio y habilidad en la resolución de cuestiones y ejercicios relacionados con contenidos de la asignatura.  Uso correcto del lenguaje químico, organización de ideas y claridad en la expresión durante la exposición de cuestiones y temas relacionados con contenidos de la asignatura.	Valoración de la participación activa de los alumnos en la resolución de ejercicios y cuestiones.  Valoración de la participación activa de los alumnos en la exposición oral de cuestiones y temas relacionados con contenidos de la asignatura.	30%

*El sistema de calificación se regirá por lo establecido en el RD 1125/2003 de 5 de septiembre por el que se establece el sistema europeo de créditos y el sistema de calificaciones en las titulaciones universitarias de carácter oficial.*

## 8. DOCUMENTACIÓN/BIBLIOGRAFÍA

### BÁSICA:

HOUSECROFT C.E. y SHARPE A.G. (2007); "Inorganic Chemistry" 3ª ed., Pearson Education. (ISBN 0-13-175553-6)  
HOUSECROFT C.E. y SHARPE A.G. (2006); "Química Inorgánica" 2ª ed., Prentice Hall. (ISBN 84-205-4847-2)  
MIESSLER G.L. y TARR D.A. (2004); "Inorganic Chemistry" 3ª ed., Prentice Hall. (ISBN 0-13-120198-0)  
RODGERS G.E. (2002); "Descriptive Inorganic, Coordination and Solid State



UNIVERSIDAD DE JAÉN

Chemistry" 2ª ed., Thomson. (ISBN 0-12-592060-1)  
SHRIVER D.F. y ATKINS P.W. (2009); "Inorganic Chemistry" 5ª ed., Oxford University Press. (ISBN 0-19-923617-6)  
WEST A.R. (1999); "Basic Solid State Chemistry" 2ª ed., Wiley and Sons. (ISBN 0-471-98756-5)

### **ESPECÍFICA:**

#### Química de la Coordinación

BUTLER I.S. y HARROD J.F. (1992); "Química Inorgánica: Principios y Aplicaciones", Addison Wesley Interamericana.

FIGGIS B.N. Y HITCHMAN M.A. (2000); "Ligand Field Theory and its Applications", Wiley-VCH.

GREENWOOD N.N. y EARNSHAW A. (1997); "Chemistry of the Elements" 2ª ed., Butterworth Heinemann.

HUHEEY J.E., KEITER E.A., KEITER R.L. (2000); "Química Inorgánica: Principios de Estructura y Reactividad" 4ª ed., Oxford Univ. Press.

PURCELL K.F. y KOTZ J.C. (1979); "Química Inorgánica", Reverté.

RODGERS G.E. (1995); "Química Inorgánica: Introducción a la Química de la Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill.

SHRIVER D.F., ATKINS P.W. y LANGFORD C.H. (1997); "Química Inorgánica" 2ª ed., Reverté.

#### Química del Estado Sólido

ADAMS D.M. (1986); "Sólidos Inorgánicos", Alhambra.

BRUCE D.W. y O'HARE D. (1996); "Inorganic Materials" 2ª ed., Wiley-VCH.

BURDETT J.K. (1995); "Chemical Bonding in Solids", Oxford University Press.

LADD M. (1994); "Chemical Bonding in Solids and Fluids", Ellis Horwood.

RODGERS G.E. (1995); "Química Inorgánica: Introducción a la Química de la Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva", McGraw-Hill.

#### Química Organometálica

ASTRUC, D. (2003); "Química Organometálica" Reverté.

PURCELL K.F. y KOTZ J.C. (1979); "Química Inorgánica", Reverté.

SHRIVER D.F., ATKINS P.W. y LANGFORD C.H. (1997); "Química Inorgánica" 2ª ed., Reverté.

#### Determinación Estructural

EBSWORTH E.A.V., RANKIN D.W.H. Y CRADOCK S. (1991); "Structural Methods in Inorganic Chemistry" 2ª ed., Blackwell Scientific Publications.

OOI, L.L. (2009); "Principles of X-ray Crystallography", Oxford University Press.



UNIVERSIDAD DE JAÉN

## 9. CRONOGRAMA (primer cuatrimestre)

SEMANA	Clases magistrales	Seminarios (grupos A/B)	Trabajo autónomo	Tutorías	Exámenes	Observaciones	
1ª: 26-30/09/11	4	-	<i>Unas 90 horas (aprox. 5 horas a la semana) según necesidades de cada alumno</i>	-	-	Inauguración de curso	
2ª: 03-07/10/11	4	1/2		-	-		
3ª: 10-14/10/11	4	1		-	-	El Pilar (12/10)	
4ª: 17-21/10/11	2	1		-	-	S. Lucas (17 y 18/10)	
5ª: 24-28/10/11	4	2/1		-	-		
6ª: 31/10-04/11/11	1	1		-	-	Los Santos (1/11)	
7ª: 07-11/11/11	-	1		1	-		
8ª: 14-18/11/11	3	1/2		-	-	S. Alberto (15/11)	
9ª: 21-25/11/11	-	1		-	-	Sta. Catalina (25/11)	
10ª: 28/11-02/12/11	2	1		-	-		
11ª: 05-09/12/11	-	1		-	-	Constitución (6/12), Inmaculada (8/12)	
12ª: 12-16/12/11	4	3/1		-	-		
13ª: 19-23/12/11	4	1		-	-		
<b>24/12/11-08/01/12</b>							<b>Vacaciones de Navidad</b>
14ª: 09-13/01/12	4	2/3		-	-		
15ª: 16-20/01/12	-	3	1	-			
<b>21/01/12-18/02/12</b>	-	-	-	2		<b>Examen</b>	
<b>HORAS TOTALES:</b>	<b>36</b>	<b>20</b>	<b>90</b>	<b>2</b>	<b>2</b>		