

COMPOSTOS DE COORDINACIÓ

Codi de l'assignatura : 20571

Grups 1 i 2

Prof. Pilar González-Duarte



pilar.gonzalez.duarte@uab.es (C7-354)

1. Generalitats

Característiques generals dels elements de transició. Propietats químiques, estats d'oxidació i nombres de coordinació. Teoria de l'enllaç de valència dels compostos de coordinació. Classificació dels lligands segons el nombre d'àtoms enllaçats. Efectes quelant i macrocíclic.

2. Estereoquímica de coordinació

Nombres de coordinació 2 i 3. Nombre de coordinació 4: complexos tetraèdrics i isomeria òptica, complexos plano-quadrats i isomeria geomètrica. Nombre de coordinació 5: fluxionalitat. Nombre de coordinació 6. Distorsions de la geometria octaèdrica: tetragonal i trigonal. Isomeria geomètrica i isomeria òptica. Nombres de coordinació superiors a 6. Altres tipus d'isomeries.

3. Teoria del camp cristal·lí

Generalitats. Desdoblament dels orbitals d per l'acció de camps electrostàtics de diferents simetries. Complexos de espín alt i de espín baix. Sèrie espectroquímica. Energia d'estabilització del camp cristal·lí.

4. Teoria de l'orbital molecular

Simetria dels orbitals del metall i del grup de lligands. Complexos octaèdrics, tetraèdrics i plano-quadrats. Sèrie espectroquímica. Regla dels 18 electrons.

5. Propietats òptiques

Mètode del camp feble: diagrames d'Orgel. Mètode del camp fort. diagrames de Tanabe-Sugano. Interpretació dels espectres electrònics dels compostos de coordinació. Regles de selecció de les transicions electròniques. Teoria del camp de lligands. Sèrie nefelauxètica.

6. Propietats magnètiques

Tipus de comportament magnètic: diamagnetisme i paramagnetisme. Llei de Curie. Cooperació magnètica: antiferromagnetisme i ferromagnetisme

7. Elements lantànids i actínids

Compostos de coordinació dels elements del bloc f. Espectres electrònics i comportament magnètic.

8. Cinètica i mecanismes de reacció dels compostos de coordinació

Reaccions de substitució de lligands. Reaccions de substitució en complexos octaèdrics. i plano-quadrats. Reaccions de transferència electrònica. Reaccions d'addició oxidant.

9. Química supramolecular

La química supramolecular com a generalització de la química de coordinació. Reconeixement molecular, complementarietat i auto-assemblatge. Estructures.

10. Bioinorgànica

Bioelements: essencialitat i toxicitat. Metal·lobiomolècules. Classificació de les metal·lobiomolècules. Funcions biològiques dels elements del bloc s: Na i K; Mg i Ca. Funcions biològiques dels elements del bloc d. Elements d que no intervien en processos redox: Zn. Elements d que participen en processos redox: Fe, Co, Cu, Mo i Mn. Transport d'electrons i transport d'oxigen. Activació de molècules petites: fixació del nitrogen.



BIBLIOGRAFIA

- J.E. Huheey, E. A. Keiter & R. L. Keiter, **Inorganic Chemistry**, 4th ed., Harper-Collins Publishers Inc., 1993. ("Química Inorgànica", Ed. Harla, traducció castellana de la 1^a edició).
- W.W. Porterfield, **Inorganic Chemistry. A Unified Approach**, 2nd ed., Academic Press, Inc., 1993.
- D.F. Shriver & P.W. Atkins, **Inorganic Chemistry**, 3rd ed., Oxford University Press, 1999. Traducció al castellà de la 2^a edició: Vol. 1 i 2, Editorial Reverté, 1998.
- N. N. Greenwood & A. Earnshaw, **Chemistry of the Elements**, 2nd ed. Butterworth-Heinemann, 1998.
- Joan Ribas Gispert, **Química de Coordinación**, Edicions de la Universitat de Barcelona / Edicions Omega, Barcelona 2000.
- J. S. Casas, V. Moreno, A. Sánchez, J. L. Sánchez, J. Sordo, **Química Bioinorgànica**, Editorial Síntesis, 2002.
- J. Sales i J. Vilarrasa, **Introducció a la nomenclatura Química Inorgànica i Orgànica**, 5^o Ed., Editorial Reverté, 2003.



L'AUTÒNOMA INTERACTIVA

En el campus virtual de la UAB (<https://ticeu.uab.es/>) podreu trobar les transparències, els problemes, models d'examen i el programa d'aquesta assignatura. A més a més, a l'apartat *enllaços* podreu accedir a un recull de webs que us poden ser útils i interessants per ampliar i aprofundir en determinats temes.