

I. INTRODUCCIÓ ALS COMPOSTOS DE COORDINACIÓ

1. Generalitats

Característiques generals dels compostos de coordinació dels elements de transició. Propietats químiques, estats d'oxidació i nombres de coordinació. Classificació dels lligands segons el nombre d'àtoms enllaçats.

2. Estereoquímica de coordinació

Nombres de coordinació dels compostos de coordinació 1, 2 i 3. Nombre de coordinació 4: complexos tetraèdrics i plano-quadrats. Nombre de coordinació 5: fluxionalitat. Nombre de coordinació 6. Distorsions de la geometria octaèdrica: tetragonal i trigonal. Nombres de coordinació superiors a 6. Isomeria en els compostos de coordinació. Isomeria estructural o constitucional: isòmers d'enllaç. Isomeria configuracional o estereoisomeria: definicions. Estereoisòmers en les coordinacions 4 i 6. Isomeria òptica.

II. TEORIES DE L'ENLLAÇ EN ELS COMPOSTOS DE COORDINACIÓ

3. Teoria de l'enllaç de valència i del camp cristal·lí

Teoria de l'enllaç de valència. Teoria del camp cristal·lí: fonaments Grups puntuals de simetria i taules de caràcters. Desdoblament dels orbitals *d* per l'acció de camps electrostàtics de diferents simetries. Complexos d'espín alt i d'espín baix. Sèrie espectroquímica. Energia d'estabilització del camp cristal·lí. Distorsions de la geometria octaèdrica. Teoria del camp del lligand. Covalència en els compostos de coordinació. Sèrie nefelauxètica.

4. Teoria de l'orbital molecular

Simetria dels orbitals del metall i del grup de lligands. Aplicació de la teoria a complexos octaèdrics, tetraèdrics i plano-quadrats. TOM i la sèrie espectroquímica. Regla dels 18 electrons.

III. PROPIETATS ESPECTROSCÒPIQUES I MAGNÈTIQUES DELS COMPOSTOS DE COORDINACIÓ.

5. Espectroscòpia UV-Vis

Termes espectrals: estats d'energia dels ions lliures. Desdoblament dels termes en un camp octaèdric. Regles de selecció de les transicions electròniques. Mètode del camp feble: diagrames d'Orgel. Càlcul de *Dq* i *B*. Diagrames de Tanabe-Sugano. Mètode del camp fort. Interpretació dels espectres electrònics dels compostos de coordinació. Transferència de càrrega.

6. Propietats magnètiques

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

IV. REACCIONS DELS COMPOSTOS DE COORDINACIÓ

7. Estabilitat termodinàmica.

Consideracions termodinàmiques; Constants de formació. Efectes quelant i macrocíclic.

8. Mecanismes de reacció

Consideracions cinètiques. Reaccions de substitució i mecanismes. Reaccions de transferència electrònica. Reaccions d'addició oxidant.

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).
- C. Housecroft, A. G. Sharpe, **Química Inorgànica**, 2a ed., Pearson, 2006.
- Shriver & Atkins, **Inorganic Chemistry**, 4th ed., Oxford, 2006
- W.W. Porterfield, **Inorganic Chemistry. A Unified Approach**", 2nd ed., Academic Press, Inc., 1993.
- N. N. Greenwood & A. Earnshaw, **Chemistry of the Elements**, 2nd ed. Butterworth-Heinemann, 1998.
- Joan Ribas Gispert, **Química de Coordinació**, Edicions de la Universitat de Barcelona / Edicions Omega, Barcelona 2000.
- J. Sales i J. Vilarrasa, **Introducció a la Nomenclatura Química Inorgànica i Orgànica**, 5^o Ed., Editorial Reverté, 2003.