

Dr. Pilar González Duarte

COMPOSTOS DE COORDINACIÓ

I. Introducció i generalitats

Introducció històrica. Teoria de l'enllaç de valència dels compostos de coordinació. Classificació dels lligands segons la seva naturalesa electrònica: σ -donadors, π -acceptors i π -donadors. Classificació dels lligands segons el nombre d'àtoms enllaçats.

II. Elements de transició

Característiques generals dels elements de transició. Propietats químiques, estats d'oxidació i nombres de coordinació.

III. 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.

IV. Teoria del camp cristal·lí

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

V. **Espectres electrònics**

Nivells energètics d'un ió lliure: termes espectrals. Mètode del camp feble: Desdoblament dels termes energètics d'un ió lliure per efecte del camp cristal·lí. Diagrames d'Orgel. Diagrames de Tanabe-Sugano: aplicacions quantitatives. Espectres electrònics dels compostos de coordinació. Regles de selecció de les transicions electròniques. Assignació de les bandes d'absorció d'un espectre. Validesa i limitacions del model del camp cristal·lí. Teoria del camp de lligands. Sèrie nefeleuxètica.

VI. **Teoria dels orbitals moleculars**

Introducció. Complexos octaèdrics, tetraèdrics i plano-quadrats. Sèrie espectroquímica. Regla dels 18 electrons.

VII. **Magnetisme**

Tipus de comportament magnètic. Diamagnetisme. Paramagnetisme: LLei de Curie. Moments magnètics dels ions lliures dels metalls de transició. Cooperació magnètica: antiferromagnetisme i ferromagnetisme.

VIII. **Cinètica i mecanismes de reacció dels compostos de coordinació**

Introducció. Reaccions de substitució de lligands en general. Reaccions de substitució en complexos octaèdrics. Reaccions de substitució en complexos plano-quadrats. Reaccions de transferència electrònica. Reaccions d'addició oxidant. Síntesis de compostos de coordinació.

IX. **Bioinorgànica**

Metal·lobiomolècules. Elements essencials. Funcions biològiques d'elements metàl·lics de grups principals: Na, K, Mg i Ca. Metal·loproteïnes de Zinc. Funcions estructurals: centres de Zn que interaccionen amb el DNA. Funcions catalítiques: ADH, anhidrasa carbònica i carboxipeptidasa. Transport d'oxigen: hemoglobina i mioglobina. Fotosíntesis i respiració. Metal·loproteïnes amb funcions redox: centre de Mn responsable de l'oxidació de l'aigua, citocroms i proteïnes ferro-sofre. Fixació del nitrogen.

LLIBRES RECOMANATS

- *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).
- *D.F. Shriver, P.W. Atkins & C.H. Langford, Inorganic Chemistry*, 2nd ed., Oxford University Press, 1994.
- *W.W. Porterfield, Inorganic Chemistry. A Unified Approach*", 2nd ed., Academic Press, Inc., 1993.
- *N. N. Greenwood & A. Earnshaw, Chemistry of the Elements*, Pergamon Press, 1986.
- *T. Moeller, Química Inorgànica*, Ed. Reverté, 1988.
- *G. Davidson, Introducción a la teoría de grupos para químicos*, Ed. Reverté, 1979.
- *J. Sales i J. Vilarrasa, Introducción a la nomenclatura Química Inorgànica i Orgànica*, EDUNSA, 1994.