

Llicenciatura de Química**Compostos de Coordinació**

- 1. 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.
- 2. Elements de transició.** Característiques generals dels elements de transició. Propietats químiques, estats d'oxidació i nombres de coordinació.
- 3. Estereoquímica de coordinació.** Nombres de coordinació 2 i 3. Nombres de coordinació 4: complexos tetraèdrics i isomeria òptica, complexos planoquadrats 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.
- 4. Teoria del camp cristal·lí.** Generalitats. Desdoblatament dels orbitals d per acció de camps electrostàtics de diferents simetries. Complexos d'spin alt i d'spin baix. Sèrie espectroquímica. Energia d'estabilització de camp cristal·lí. Efecte Jahn-Teller.
- 5. Espectres electrònics.** Mètode del camp feble. Nivells energetics d'un ió lliure i acoblament Russell-Saunders. Desdoblatament dels termes energetics 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 nefelauxètica.
- 6. Teoria d'orbitals moleculars.** Introducció. Complexos octaèdrics i tetraèdrics. Sèrie espectroquímica. Regla dels 18 electrons.
- 7. Magnetisme.** Tipus de comportament magnètic. Diamagnetisme. Paramagnetisme: Llei de Curie. Moment magnètic dels ions lliures dels metalls de transició. Cooperació magnètica: antiferromagnetisme i ferromagnetisme.
- 8. 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 planoquadrats. Reaccions de transferència electrònica. Reaccions d'addició oxidant. Síntesi de compostos de coordinació.
- 9. Bioinorgànica.** Metallobiomolècules. Proteïnes de transport d'ions. Transport d'oxigen. Metalloproteïnes amb funcions catalítiques no redox: enzims de Zinc. Metalloproteïnes amb funcions redox: citocroms. Fixació de nitrogen. Fotosíntesi.

Bibliografia

- DAVIDSON, G. *Introducción a la teoría de grupos para químicos*. Reverté, 1979.
 HUHEEY, J.E. *Inorganic chemistry*. 4th ed. Harper-Collins Publishers, 1993. (*Química Inorgànica*, Harla).
 MOELLER, T. *Química Inorgànica*. Reverté, 1988.
 PORTERFIELD, W.W. *Inorganic chemistry. A unified approach*. 2nd ed. Academic Press, 1993.
 SHRIVER, D. F.; ATKINS, P.W.; LANGFORD, C.H. *Inorganic chemistry*. Oxford University Press, 1990.
 SUTTON, D. *Espectros electrónicos de los complejos de los metales de transición*. Reverté, 1975.