

Compostos de coordinació

Codi 20571

1er semestre

Professor: J. Casabó, P. González

Requisits: Química inorgànica I (aprovada), Química inorgànica II (aprovada), Espectroscòpia (matricular-se)

- **Introducció i generalitats.**
Introducció històrica. Teoria de l'enllaç de valència dels compostos de coordinació. Classificació dels lligands segons la seva naturalesa electrònica: sigma-donadors, pi-acceptors i pi-donadors. Classificació dels lligands segons el nombre d'àtoms enllaçats.
- **Elements de transició.**
Característiques generals dels elements de transició. Propietats químiques, estats d'oxidació i nombres de coordinació.
- **Estereoquímica de coordinació.**
Nombres de coordinació 2 i 3. Nombres de coordinació 4: complexos tertaèdrics i isomeria òptica. Nombre de coordinació 5: fluxionalitat. Nombre de coordinació 6. Distorsions de la geometria octaèdrica: tetragonal i trigonal. Isomera geomètrica i isomeria òptica. Nombres de coordinació superiors a 6. Altres tipus d'isomeria.
- **Teoria del camp cristal·lí.**
Generalitats. Desdoblament dels orbitals d per acció dels camps electroestàtics de diferents simetries. Complexos d'spin alt i spin baix. Sèrie electroquímica. Energia d'estabilització del camp cristal·lí. Efecte Jahn-Teller.
- **Espectres electrònics.**
Mètode del camp feble. Nivells energètics d'un ió lliure i acoblament Russell-Saunders. 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 nefelauxètica.
- **Teoria d'orbitals moleculars.**
Introducció. Complexos octaèdrics i tetraèdrics. Sèrie espectroquímica. Regla dels 18 electrons.
- **Magnetisme.**
Tipus de comportament magnètic. Diamagnetisme. Paramagnetisme: Llei de Curie. Moment magnètic dels ions lliures dels metalls de transició. Cooperació magnètica: antiferromagnetisme i ferromagnetisme.

- **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. Síntesi de compostos de coordinació.
- **Bioinorgànica.**
Metal·lobiomolècules. proteïnes de transport de ions. Transport d'oxigen.
Metal·loproteïnes amb funcions catalítiques no redox: enzims de zinc. Metal·loproteïnes amb funcions redox: citocroms. Fixació de nitrogen. Fotosíntesi.