



Universitat Autònoma de Barcelona

TITULACIÓ: Química

NOM DE L'ASSIGNATURA: 20571 Compostos de coordinació

CURS: 2002/2003

CRÈDITS: 6

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

PROGRAMA DE TEORIA

- 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 tetraèdrics i isomeria òptica. 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.

- Teoria del camp cristal·lí

Generalitats. Desdoblament dels orbitals d per acció dels camps electroestàtics de diferents simetries. Complexes 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.