UNIVERSIDADE DA CORUÑA

Guía Docente					
Datos Identificativos					2014/15
Asignatura (*)	Química Inorgánica Avanzada			Código	610311402
Titulación					
Descriptores					
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos	
1º e 2º Ciclo	Anual	Cuarto	Troncal	8	
Idioma	CastelánGalego				
Prerrequisitos					
Departamento	Química Fundamental				
Coordinación	Rodriguez Blas, Maria Teresa	Correo electrónico	teresa.rodriguez.blas@udc.es		
Profesorado	Rodriguez Blas, Maria Teresa	Correo electrónico	teresa.rodriguez.blas@udc.es		
Web					
Descrición xeral	Asignatura troncal do 2º Ciclo da Licenciatura en Química (4º curso). Espérase que os alumnos que cursen esta asignatura teñan cursado con aproveitamento as asignaturas do 1º Ciclo da Licenciatura "Química Inorgánica I e II", "Química Física" e "Introducción á espectroscopía". Asemade, esta asignatura está intimamente relacionada coa asignatura troncal de 4º curso "Experimentación en Química Inorgánica" (4º curso, 2º cuadrimestre), polo que é recomendable cursar estas dúas asignaturas simultaneamente. Esta asignatura está en extinción e non se imparte docencia dela. Os alumnos só teñen dereito a exame.				

Competencias da titulación	
Código	Competencias da titulación

Resultados da aprendizaxe			
Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)	Competencias da titulación		
Utilizar a terminoloxía química, nomenclatura, convenios e unidades.	A1		
Coñecer as características dos diferentes estados da materia e as teorías empregadas para describilos.	A3		
Coñecer os compostos de coordinación, as súas formas de obtención, estrutura, propiedades e reactividade.	A4 A5 A6 A8 A9 A12 A14 A16 A25	B3 B4	C1
Coñecer os principais tipos de sólidos non moleculares, as súas formas de obtención, estrutura, propiedades e reactividade.	A4 A5 A6 A8 A9 A12 A14 A16 A25	B3 B4	C1
Racionalización dos principais tipos de estructuras que presentan os sólidos cristalinos en función das propiedades periódicas.	A1 A2 A24	B1 B2 B3 B4	C1

Adquirir os coñecementos necesarios da materia con proxección a un exercicio profesional futuro.	A1 A2 A3 A4 A5 A6 A8 A9 A12 A14 A16 A21 A25 A27	B1 B2 B3 B4 B6 B7	C1 C4 C7 C8
Deseñar compostos de coordinación con estructura e propiedades determinadas.	A1 A2 A4 A6 A9 A12 A14 A15 A16	B1 B2 B3 B4	C1 C4 C6 C8
Coñecer os principais métodos de elucidación estructural de compostos de coordinación e a súa aplicación.	A2 A3 A6 A8 A9 A12 A14 A16 A25	B1 B3 B4	C1
Manexar as fontes bibliográficas básicas en Química Inorgánica e utilizalas de modo eficaz.	A16	B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7	C1 C3 C4 C6 C7 C8
Relacionar a Química Inorgánica con outras disciplinas e recoñecer e valorar os procesos químicos na vida diaria.	A25		
Coñecer os principais métodos de elucidación estructural de sólidos cristalinos e a súa aplicación.	A2 A3 A6 A8 A9 A14 A16 A25	B1 B3 B4	C1

Comprender a importancia dos compostos de coordinación e as súas aplicacións na vida diaria, así como as súas implicacións no benestar da sociedade.	A25	B3 B6	C1 C4 C6 C7 C8
Comprender a importancia dos sólidos non moleculares e as súas aplicacións na vida diaria, así como as súas implicacións no benestar da sociedade.	A25	B3 B6	C1 C4 C6 C7 C8

Contidos	
Temas	**Subtemas**
Seminario de repaso de conceptos básicos	Nocións básicas de simetría e mecánica cuántica.
Introducción á Química da Coordinación	Interaccións ácido-base de Lewis: concepto de ácido/base duro e brando de Pearson. Definición de composto de coordinación. Terminoloxía. Números e poliedros de coordinación. Características dos ligandos. Cuestións e problemas.
Enlace nos Compostos de Coordinación	Teoría do Campo Cristalino. Consecuencias do desdobramento de orbitais por efecto do campo cristalino. Teoría do Campo ligando. Teoría de Orbitais Moleculares. Efecto Jahn-Teller. Cuestións e problemas.
Isomería nos Compostos de Coordinación	Introducción. Tipos de Isomería: Isomería de ionización, Isomería de coordinación, Isomería conformacional, Isomería estructural, Estereoisomería... Cuestións e problemas.
Estabilidade Termodinámica dos Complexos	Constantes de formación. Efectos quelato, macrocíclico e criptato. Cuestións e problemas.
Determinación Estructural de Compostos de Coordinación (I)	Introducción. Análise químico. Espectrometría de masas. Conductividade molar. Momentos dipolares. Espectroscopía vibracional. Cuestións e problemas.
Determinación Estructural de Compuestos de Coordinación (II): Espectroscopia Electrónica de Absorción	Introducción. Regras de Selección. Orixe das bandas: Bandas ligando-ligando, Bandas de Transferencia de Carga, Bandas d-d. Termos espectroscópicos e estados electrónicos. Diagramas de Orgell e diagramas de Tanabe-Sugano. Interpretación dos espectros electrónicos e aplicacións na determinación estructural. Cuestións e problemas.

Determinación Estructural de Compostos de Coordinación (III): Propiedades Magnéticas	Diamagnetismo e paramagnetismo. Momento magnético efectivo. Contribucións ao paramagnetismo: contribución de espín e contribución orbital. Aplicacións na determinación estructural. Cuestións e problemas.
Introducción á Química do Estado Sólido	Sólidos: Definición e Clasificación
Sólidos ideais: Principais tipos de estruturas.	Tipos de estruturas derivadas de empaquetamentos compactos e non compactos. A: Metais, diamante, grafito. AB: CsCl, NaCl, NiAs, ZnS. AB2: CaF2, TiO2, CdI2, CdCl2. A2B3: Al2O3. AB3: ReO3. ABxCy: Perovskita, ilmenita e espinela.
Métodos de preparación de sólidos non moleculares	Introduccion xeral aos métodos de obtencion e os principais tipos de reaccións implicadas. Reaccións sólido-sólido, sólido-líquido, sólido-gas. Método cerámico. Métodos de Química suave: método de coprecipitación, de descomposición de nitratos, método de Pechini, reaccións de intercalación e de intercambio iónico. Método hidrotermal.
Principais métodos de caracterización de sólidos	Presentación xeral das distintas técnicas difractométricas (difracción de RX, de electróns e de neutróns) con énfase na difracción de RX en po cristalino. Técnicas espectroscópicas Métodos térmicos. Microscopía electrónica (de transmisión e de varrido).
Sólidos ideais: Factores que influen no tipo de estructura	Regra dos radios. Enerxía de rede, Ecuación de Kapustinskii e de Born-Landé. Valoración crítica do modelo iónico. Direccionalidade do enlace. Mapas estructurais.
Sólidos Ideais: Estrutura Electrónica	Modelo de bandas. Concepto de orbitais do cristal, bandas de enerxía, ancho de banda, densidade de estados, enerxía de Fermi, intervalos de enerxía prohibidos. Estrutura de bandas de metais, illantes e semicondutores.
Sólidos reais: Defectos nos sólidos.	Sólidos reais vs sólidos ideais. Aspectos termodinámicos. Clasificación dos defectos: i) Defectos puntuais: Schottky, Frenkel, centros de cor, desorde antiestructural, disolucións sólidas. ii) Defectos complexos: clústers, superestruturas. iii) Defectos lineais: dislocacións de arista e de hélice. Defectos extensos estructurais e composicionais: fronteiras de antifase, defectos de apilamento, planos de macla, planos de cizalladura cristalográfica, estructuras en bloque, intercrecimientos, etc. Acomodación da non estequiometría.
Sólidos reais: Propiedades dependentes da existencia de defectos	Difusión: leis de Fick, aproximación atomística, evidencia experimental dos mecanismos de difusión. Conductividade iónica en haluros iónicos e en electrolitos sólidos.

Planificación

Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Proba mixta	4	196	200
Atención personalizada	0	0	0
*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado			

Metodoloxías	
Metodoloxías	**Descrición**
Proba mixta	O nivel de competencia alcanzado polo alumnado na mesma únicamente avaliarase a través dunha proba escrita na que se plantexarán tanto o desenvolvemento de cuestións amplas como de a resposta a cuestións máis concretas e a resolución de problemas numéricos.

Atención personalizada	
Metodoloxías	**Descrición**
Proba mixta	Non hai docencia desta materia, pero os alumnos poden facer calquera tipo de consulta sobre os contidos da materia en horas de tutoría do profesor.

Avaliación		
Metodoloxías	**Descrición**	**Cualificación**
Proba mixta	O nivel de competencia alcanzado polo alumnado na materia avaliarase a través dunha proba escrita na que se plantexarán tanto o desenvolvemento de cuestións amplas como de resposta a cuestións máis concretas e a resolución de problemas numéricos e casos prácticos.	100
Outros		

Observacións avaliación
Esta materia está en extinción, e os alumnos soamentes teñen dereito a exame. Para aprobar a asignatura é preciso acadar, como mínimo, un 5 sobre 10 no mesmo. Para a realización de dita proba os alumnos poderán axudarse das "táboas de caracteres", que deberán traer ao exame sen anotacións de ningún tìpo. Estas táboas están a disposición dos alumnos na plataforma "Moodle" da materia.

Fontes de información	
Bibliografía básica	- A. R. West (1999). Basic Solid State Chemistry. John Wiley and Sons, Chichester - M.T. Weller (1999). Inorganic Materials Chemistry. Oxford University Press, Oxford - S. F. A. Kettle (1998). Physical Inorganic Chemistry. A Coordination Chemistry Approach. Oxford University Press - J. Rivas Gispert (2000). Química de Coordinación. Ediciones Omega S.A. - D. F. Shriver, P. W. Atkins, C. H. Langford (1998). Química Inorgánica. Editotial Reverté S. A. - L. Smart, E. Moore (2005). Solid State Chemistry: an Introduction. Taylor & Francis, Third Edition - L. Smart, E. Moore (1995). Una introducción a la química del estado sólido. Editorial Reverté, Barcelona
Bibliografía complementaria	- D. Nicholls (1979). Complexes and First-Row Transition Elements. McMillan Press - N.N. Greenwood (1970). Cristales iónicos, defectos reticulares y no estequiometría. Alhambra, Madrid - D. Sutton (1975). Espectros Electrónicos de los Complejos de los Metales de Transición. Reverté, Barcelona - A. R. West (1999). Solid State Chemistry. John Wiley and Sons, Chichester - A.F. Wells (1984). Structural Inorganic Chemistry, 5th Ed.. Oxford Univesity Press, London

Recomendacións
Materias que se recomenda ter cursado previamente
Ampliación Química Inorgánica/610311503

Materias que se recomenda cursar simultaneamente
Experimentación en Química Inorgánica/610311406
Materias que continúan o temario
Química Inorgánica II/610311204 Química Inorgánica I/610311105 Química Física/610311202 Introdución a Espectroscopia/610311304
Observacións

(*)A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías