UNIVERSIDADE DA CORUÑA

Guia docente					
Datos Identificativos					2018/19
Asignatura (*)	Química de Coordinación Aplicada			Código	610509110
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017)				
Descriptores					
Ciclo	Periodo	Curso		Tipo	Créditos
Máster Oficial	Anual	Primero		Optativa	3
Idioma	Castellano				
Modalidad docente	Presencial				
Prerrequisitos					
Departamento	Química				
Coordinador/a	Fernandez Lopez, Alberto A.		Correo electrónico	alberto.fernandez@udc.es	
Profesorado	Esteban Gomez, David Fernandez Lopez, Alberto A.		Correo electrónico	david.esteban@udc.es alberto.fernandez@udc.es	
Web					
Descripción general	Este curso se enmarca en la especialidad de Química Sintética dedicado al estudio de la síntesis y propiedades de diversas especies químicas. Dentro de dicha especialidad se han escogido algunos tipos de compuestos que, ya sea por sus especiales características, ya sea por sus aplicaciones potenciales futuras, merecen un estudio detallado. Teniendo esto en cuenta, la Química de la Coordinación merece un estudio aparte, tanto por las particulares características de los compuestos de coordinación como por sus métodos de síntesis. Desde otro punto de vista, los llamados complejos se presentan en una variedad estructural enorme que va desde especies de dimensión molecular pasando por agregados supramoleculares, polímeros mono-, bi-, y tridimensionales, hasta llegar a los llamados Metal Organic Frameworks (MOF) que forman redes tridimensionales ordenadas. Dada esta enorme variedad estructural, no es de sorprender que el número de propiedades y aplicaciones que presentan sea también diverso. Todas estas razones justifican su inclusión tanto en la especialidad de Química sintética como en un Máster dedicado al estudio de la Química.				

Competencias / Resultados del título	
Código	Competencias / Resultados del título
A1	CE1 - Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A2	CE2 -Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
A3	CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
A8	CE8 - Analizar y utilizar los datos obtenidos de manera autónoma en los experimentos complejos de laboratorio relacionándolos con las técnicas químicas, físicas o biológicas apropiadas, e incluyendo el uso de fuentes bibliográficas primarias
B1	CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
B2	CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
B3	CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
B4	CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
B7	CG2 - Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación
B10	CG5 - Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
B12	CG8 - Valorar la dimensión humana, económica, legal y técnica en el ejercicio profesional, así como el impacto de la química en el medio ambiente y en el desarrollo sostenible de la sociedad.
C1	CT1 - Elaborar, escribir y defender públicamente informes de carácter científico y técnico.
C3	CT3 - Trabajar con autonomía y eficiencia en la práctica diaria de la investigación o de la actividad profesional.

C4	CT4 - Apreciar el valor de la calidad y la mejora continua, actuando con rigor, responsabilidad y ética profesional.

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje	Competencias / Resultados del título		
Diseñar rutas de síntesis y procedimientos de aislamiento de compuestos de coordinación.	AM1 AM2 AM3 AM8	BM1 BM2 BM3 BM4 BM7 BM10	CM1 CM3
Identificar la presencia de quiralidad en complejos de coordinación mononucleares y justificar su origen.	AM1 AM2 AM3 AM8	BM1 BM2 BM3 BM7 BM10	CM4
Describir los factores que permiten la activación de pequeñas moléculas mediante la coordinación a centros metálicos, así como las aplicaciones de estas propiedades.	AM1 AM2 AM3 AM8	BM1 BM2 BM3 BM7 BM10 BM12	

Contenidos	
Tema	Subtema
Propiedades estructurales en los compuestos de coordinación. Herramientas de caracterización en compuestos de coordinación.	Propiedades estructurales en los compuestos de coordinación. - Herramientas de caracterización estructural de complejos. Técnicas espectroscópicas. Técnicas espectrométricas. Técnicas difractométricas. Técnicas basadas en propiedades magnéticas. Otras técnicas.
Activación de pequeñas moléculas por compuestos de coordinación.	? Estructura y enlace en los complejos de dinitrógeno y dioxígeno: modos de enlace ? Métodos de preparación de complejos de dinitrógeno y dioxígeno. ? Métodos de caracterización de complejos de dinitrógeno y dioxígeno: Espectroscopías infrarroja y de RMN, espectrometría de masas, difracción de rayos-X de monocristal. ? Aplicaciones sintéticas de los complejos de dinitrógeno y dioxígeno. Perspectivas de futuro.

Compuestos de coordinación con aplicaciones en Medicina: agentes terapéuticos y de diagnóstico.	? Metalofármacos antitumorales: Familias de complejos según la naturaleza del centro metálico y su estructura. Mecanismo de actuación. Métodos de preparación. ? Aplicaciones de complejos metálicos como radiofármacos. Propiedades y características de los ligandos y el radioisótopo. Técnicas de diagnóstico (PET, SPEC) y terapia. ? Agentes de contraste en Imagen por Resonancia Magnética (IRM). Agentes de relajación de protón T1 (Gd3+, Mn2+ y Fe3+) y T2. Parámetros que afectan a la eficiencia de los agentes. Agentes basados en la transferencia de saturación por intercambio químico (CEST). Agentes basados en otros núcleos (19F, 31P). Hiperpolarización.
Compuestos de coordinación en el diseño de nuevos materiales: polímeros de coordinación y MOFs. Propiedades y aplicaciones.	? Tipos de sistemas que surgen de la asociación metal-ligando asociaciones discretas y extensas (polímeros de coordinación y MOFs). Principales características estructurales y clasificación. ? Estrategias de síntesis y técnicas generales de caracterización ? Propiedades y aplicaciones.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciales y virtuales)	Horas trabajo autónomo	Horas totales
Seminario	A1 A2 A3 B1 B2 B3 B4 B7 B10 B12 C1 C3 C4	7	21	28
Prueba mixta	A1 A2 A3 A8 B1 B10	2	18	20
Sesión magistral	A2 A3 B3 B7 B12 C4	12	13	25
Atención personalizada		2	0	2
(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Seminario	Seminarios realizados con profesorado propio del Máster, o con profesionales invitados de la empresa, la administración o de otras universidades. Sesiones interactivas relacionadas con las distintas materias con debates e intercambio de opiniones con los alumnos. Resolución de ejercicios prácticos (problemas, cuestiones tipo test, interpretación y procesamiento de la información, evaluación de publicaciones científicas, etc.)
Prueba mixta	Realización de las diferentes pruebas para la verificación de la obtención tanto de conocimientos teóricos como prácticos y la adquisición de habilidades y actitudes.
Sesión magistral	Clases presenciales teóricas. Clases expositivas (utilización de pizarra, ordenador, cañón), complementadas con las herramientas propias de la docencia virtual.

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción

Seminario Prueba mixta	El alumno podrá acudir siempre que lo desee al profesor de la material con el fin de resolver cuantas dudas se le pudiesen plantear. Será especialmente necesario si no es capaz de resolver os problemas propuestos o las tareas encomendadas. Dos de las tutorías serán de asistencia obligatoria. Los alumnos con ?reconocimiento de dedicación a tiempo parcial? recibirán una atención especial en las tutorías, en concreto, además de lo arriba indicado, se dedicaran especialmente a la resolución de los boletines de problemas entregados.

Evaluación			
Metodologías	**Competencias / Resultados**	**Descripción**	**Calificación**
Sesión magistral	A2 A3 B3 B7 B12 C4	Evaluación continua del alumno mediante preguntas y cuestiones orales durante el curso. También se evaluará la asistencia y la participación continua a lo largo de todo el curso.	10
Seminario	A1 A2 A3 B1 B2 B3 B4 B7 B10 B12 C1 C3 C4	Resolución de problemas y casos prácticos. También se evaluará la asistencia y la participación activa en las distintas actividades.	20
Prueba mixta	A1 A2 A3 A8 B1 B10	Examen final, de tipo mixto con cuestiones y problemas relacionados con lo visto en clase.	70

Observaciones evaluación
El alumno obtendrá la calificación de "no presentado" cuando no asista a la prueba mixta. Los alumnos con ?con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia? serán evaluados únicamente mediante la prueba mixta, que computará con el 100% de la calificación.

Fuentes de información	
Básica	- J. Rivas Gispert (2000). Química de Coordinación. Omega - J. Rivas Gispert (2008). Coordination Chemistry . Weinheim: Willey-VCH
Complementária	- Patrick L. Holland. Metal?dioxygen and metal?dinitrogen complexes: where are the electrons? Dalton Trans. , 2010, 39 , 5415?5425. - Michael P. Shaver, Michael D. Fryzuk. Activation of Molecular Nitrogen: Coordination, Cleavage andFunctionalization of N2 Mediated By Metal Complexes. Adv. Synth. Catal.2003, 345 , 1061- 1076 - Hiromasa Tanaka, Yoshiaki Nishibayashi, and Kazunari Yoshizawa, Interplay between Theory and Experiment forAmmonia Synthesis Catalyzed by Transition Metal Complexes, Acc. Chem. Res.2016, 49, 987?995.- Serenella Medici, Massimiliano Peana,Valeria Marina Nurchi, Joanna I. Lachowicz,Guido Crisponi, Maria AntoniettaZoroddu. Noble metalsin medicine: Latest advances. CoordinationChemistry Reviews, 2015, 284, 329?350.- A. Merbach, L. Helm and E. Tóth, The Chemistry of Contrast Agents inMedical Magnetic Resonance Imaging: Second Edition , John Wiley & Sons,Chichester, 2013. - Eric W. Price and Chris Orvig. Matchingchelators to radiometals for radiopharmaceuticals. Chem. Soc. Rev., 2014, 43,260-290.- - Stuart R. Batten, Neil R. Champness, Xiao-MingChen, Javier Garcia-Martinez, Susumu Kitagawa, Lars Öhrström, MichaelO?Keeffe7, Myunghyun Paik Suh, and Jan Reedijk. Terminology of metal?organic frameworks andcoordination polymers (IUPAC Recommendations 2013) . Pure Appl. Chem., 2013, 85, 1715?1724. - - Bradley J. Holliday and Chad A. Mirkin, Strategies for the Construction of Supramolecular Compounds throughCoordination Chemistry , Angew. Chem. Int. Ed. 2001, 40, 2022-2043. - Shin-ichiroNoro, Hitoshi Miyasaka, Susumu Kitagawa, Tatsuo Wada,Takashi Okubo, MasahiroYamashita, and Tadaoki Mitani. FrameworkControl by a Metalloligand Having Multicoordination Ability: New SyntheticApproach for Crystal Structures and Magnetic Properties . Inorg.Chem. 2005, 44, 133-146.

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
/ Determinación Estructural Avanzada/610509103
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Asignaturas que continúan el temario
Otros comentarios
El alumno debe tener conocimientos básicos de la Química de la Coordinación, tales como el concepto de compuesto de coordinación y sus diversos componentes, así como nociones de las teorías de enlace que se emplean para describirlos y los métodos básicos empleados para su caracterización.

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías