



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|--|--------------------|---|----------|
| Datos Identificativos | | | | 2023/24 |
| Asignatura (*) | Química de Coordinación Aplicada | Código | 610509110 | |
| Titulación | Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2020) | | | |
| Descritores | | | | |
| Ciclo | Período | Curso | Tipo | Créditos |
| Mestrado Oficial | 2º cuatrimestre | Primeiro | Optativa | 3 |
| Idioma | Castelán | | | |
| Modalidade docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química | | | |
| Coordinación | Fernandez Lopez, Alberto A. | Correo electrónico | alberto.fernandez@udc.es | |
| Profesorado | Fernandez Lopez, Alberto A. Platas Iglesias, Carlos | Correo electrónico | alberto.fernandez@udc.es carlos.platas.iglesias@udc.es | |
| Web | | | | |
| Descrición xeral | <p>Este curso enmárcase na especialidade de Química Sintética dedicado ao estudo da síntese e propiedades de diversas especies químicas. Dentro de dita especialidade escolléronse algúns tipos de compostos que, xa sexa polas súas especiais características, xa sexa polas súas aplicacións futuras, merecen un estudo detallado. Tendo isto en conta, a Química da Coordinación merece un estudo aparte, tanto polas particulares características dos compostos de coordinación como polos seus métodos de sínteses. Desde outro punto de vista, os chamados complexos preséntanse nunha variedade estrutural enorme que vai desde especies de dimensión molecular pasando por agregados supramoleculares, polímeros mono-, bi-, e tridimensionais, ata chegar ao chamados Metal Organic Frameworks (MOFs) que forman redes tridimensionais ordenadas. Dada esta enorme variedade estrutural, non é de sorprender que o número de propiedades e aplicacións que presentan sexa tamén diverso. Todas estas razóns xustifican a súa inclusión tanto na especialidade de Química sintética como nun Máster dedicado ao estudo da Química.</p> | | | |

| Competencias do título | |
|------------------------|---|
| Código | Competencias do título |
| A1 | CE1 - Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química |
| A2 | CE2 - Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas |
| A3 | CE4 - Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química. |
| A8 | CE8 - Analizar e utilizar os datos obtidos de forma independente en experimentos de laboratorio complexos relacionándoos coas técnicas químicas, físicas ou biolóxicas axeitadas, incluíndo o uso de fontes bibliográficas primarias |
| B1 | CB6 ? Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación |
| B2 | CB7 - Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo. |
| B3 | CB8 - Que os estudantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrontarse á complexidade de formular xuízos a partir dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vinculadas á aplicación dos seus coñecementos e xuízos |
| B4 | CB9 - Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades. |
| B7 | CG2 - Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación. |
| B10 | CG5 - Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química |
| B12 | CG8 - Avaliar a dimensión humana, económica, xurídica e ética na práctica profesional, así como as implicacións ambientais do seu traballo. |
| C1 | CT1 - Elaborar, escribir e defender publicamente informes de carácter científico e técnico |
| C3 | CT3 - Traballar con autonomía e eficiencia na práctica diaria da investigación ou da actividade profesional. |
| C4 | CT4 - Apreciar o valor da calidade e mellora continua, actuando con rigor, responsabilidade e ética profesional. |



| Resultados da aprendizaxe | | | |
|--|--------------------------|--|------------|
| Resultados de aprendizaxe | Competencias do título | | |
| Deseñar rutas de sínteses e procedementos de illamento de compostos de coordinación | AM1 AM2 AM3 AM8 | BM1 BM2 BM3 BM4 BM7 BM10 | CM1 CM3 |
| Identificar a presenza de quiralidade en complexos de coordinación mononucleares e xustificar a súa orixe. | AM1 AM2 AM3 AM8 | BM1 BM2 BM3 BM7 BM10 | CM4 |
| Describir os factores que permiten a activación de pequenas moléculas mediante a coordinación a centros metálicos, así como as aplicacións destas propiedades. | AM1 AM2 AM3 AM8 | BM1 BM2 BM3 BM7 BM10 BM12 | |

| Contidos | |
|--|--|
| Temas | Subtemas |
| Propiedades estruturais dos compostos de coordinación. Ferramentas de caracterización estrutural. | Propiedades estruturais nos compostos de coordinación Ferramentas de caracterización estrutural de complexos. |
| Activación de pequenas moléculas por compostos de coordinación. | Estrutura e ligazón nos complexos de dinitróxeno e dióxixeno: modos de ligazón Métodos de preparación de complexos de dinitróxeno e dióxixeno. Métodos de caracterización de complexos de dinitróxeno e dióxixeno: Espectroscopías infravermella e de RMN, espectrometría de masas, difracción de raios-X de monocristal. Aplicacións sintéticas dos complexos de dinitróxeno e dióxixeno. Perspectivas de futuro. |
| Compostos de coordinación con aplicacións en medicina: axentes terapéuticos e de diagnóstico. | Metalofármacos antitumorais. Aplicacións de complexos metálicos como radiofármacos. Axentes de contraste en Imaxe por Resonancia Magnética (IRM). |
| Compostos de coordinación no deseño de novos materiais: polímeros de coordinación e MOFs. Propiedades e aplicacións. | Tipos de sistemas que xorden da asociación metal-ligando asociacións discretas e extensas (polímeros de coordinación e MOFs). Principais características estruturais e clasificación. Estratexias de sínteses e técnicas xerais de caracterización Propiedades e aplicacións. |

| Planificación | | | | |
|-----------------------|--|-------------------|---|--------------|
| Metodoloxías / probas | Competencias | Horas presenciais | Horas non presenciais / traballo autónomo | Horas totais |
| Seminario | A1 A2 A3 B1 B2 B3 B4 B7 B10 B12 C1 C3 C4 | 7 | 21 | 28 |
| Proba mixta | A1 A2 A3 A8 B1 B10 | 2 | 18 | 20 |



| | | | | |
|------------------------|--------------------|----|----|----|
| Sesión maxistral | A2 A3 B3 B7 B12 C4 | 12 | 13 | 25 |
| Atención personalizada | | 2 | 0 | 2 |

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

| Metodoloxías | |
|------------------|--|
| Metodoloxías | Descrición |
| Seminario | Seminarios realizados con profesorado propio do Máster, ou con profesionais convidados da empresa, a administración ou doutras universidades. Sesións interactivas relacionadas coas distintas materias con debates e intercambio de opinións cos alumnos. Resolución de exercicios prácticos (problemas, cuestións tipo test, interpretación e procesamento da información, avaliación de publicacións científicas, etc.) |
| Proba mixta | Realización das diferentes probas para a verificación da obtención tanto de coñecementos teóricos como prácticos e a adquisición de habilidades e actitudes. |
| Sesión maxistral | Clases presenciais teóricas. Clases expositivas (utilización de lousa, computador, canón), complementadas coas ferramentas propias da docencia virtual. |

| Atención personalizada | |
|------------------------|---|
| Metodoloxías | Descrición |
| Seminario | O alumno poderá acudir sempre que o desexe a profesor da materia co fin de resolver cantas dúbidas puidésenlle xurdir. |
| Proba mixta | Será especialmente necesario se non é capaz de resolver os problemas propostos ou as tarefas encomendadas. Dous desas tutorías serán de asistencia obrigatoria. Os alumnos co recoñecemento de adicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia, recibirá especial atención nas tutorías, en concerto, ademais do anteriormente indicado, se adicarán a especialmente a resolución dos boletíns de problemas. |

| Avaliación | | | |
|------------------|--|--|---------------|
| Metodoloxías | Competencias | Descrición | Cualificación |
| Sesión maxistral | A2 A3 B3 B7 B12 C4 | Avaliación continua do alumno mediante preguntas e cuestións orais durante o curso. Tamén se avaliará a asistencia e a participación. | 10 |
| Seminario | A1 A2 A3 B1 B2 B3 B4 B7 B10 B12 C1 C3 C4 | Resolución de problemas e casos prácticos. Tamén se poderán avaliar traballos ou casos prácticos a través dunha exposición oral. Avaliarase a asistencia e a participación activa nas distintas actividades. | 35 |
| Proba mixta | A1 A2 A3 A8 B1 B10 | Exame final, de tipo mixto con cuestións ou problemas relacionados co visto en clase. | 55 |

| Observacións avaliación |
|--|
| O alumno obterá a cualificación ?no presentado? cando non asista a proba mixta. |
| OS alumnos ?co recoñecemento de adicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia? serán avaliados unicamente mediante a proba mixta que computará co 100% da cualificación. |

| Fontes de información | |
|----------------------------|---|
| Bibliografía básica | - J. Rivas Gispert (2000). Química de Coordinación. Omega - J. Rivas Gispert (2008). Coordination Chemistry . Weinheim: Willey-VCH |



| | |
|------------------------------------|---|
| Bibliografía complementaria | <p>- Patrick L. Holland. Metal²dioxygen and metal²dinitrogen complexes: where are the electrons? Dalton Trans. , 2010, 39 , 5415-5425. - Michael P. Shaver, Michael D. Fryzuk. Activation of Molecular Nitrogen: Coordination, Cleavage and Functionalization 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 for Ammonia 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 Antonietta Zoroddu. Noble metals in medicine: Latest advances. Coordination Chemistry Reviews, 2015, 284, 329-350.- A. Merbach, L. Helm and E. Tóth, The Chemistry of Contrast Agents in Medical Magnetic Resonance Imaging: Second Edition , John Wiley & Sons, Chichester, 2013. - Eric W. Price and Chris Orvig. Matching chelators to radiometals for radiopharmaceuticals. Chem. Soc. Rev., 2014, 43, 260-290.- - Stuart R. Batten, Neil R. Champness, Xiao-Ming Chen, Javier Garcia-Martinez, Susumu Kitagawa, Lars Öhrström, Michael O'Keeffe, Myunghyun Paik Suh, and Jan Reedijk. Terminology of metal-organic frameworks and coordination 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 through Coordination Chemistry , Angew. Chem. Int. Ed. 2001, 40, 2022-2043. - Shin-ichiro Noro, Hitoshi Miyasaka, Susumu Kitagawa, Tatsuo Wada, Takashi Okubo, Masahiro Yamashita, and Tadaoki Mitani. Framework Control by a Metalloligand Having Multicoordination Ability: New Synthetic Approach for Crystal Structures and Magnetic Properties . Inorg. Chem. 2005, 44, 133-146.</p> |
|------------------------------------|---|

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

/

Determinación Estructural Avanzada/610509103

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Materias que continúan o temario

Observacións

O alumno debe ter coñecementos básicos da Química da Coordinación, tales como o concepto de composto de coordinación e os seus diversos compoñentes, así como nocións das teorías de ligazón que se empregan para describilos e os métodos básicos empregados para a súa caracterización.

(*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 de acordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías