



| Guía 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                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | Correo electrónico | david.esteban@udc.es     |          |
|                       | Fernandez Lopez, Alberto A.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                    | 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 del título |                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|-------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Código                  | Competencias 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 del título  |                                          |            |
| Diseñar rutas de síntesis y procedimientos de aislamiento de compuestos de coordinación.                                                                              | AM1<br>AM2<br>AM3<br>AM8 | BM1<br>BM2<br>BM3<br>BM4<br>BM7<br>BM10  | CM1<br>CM3 |
| Identificar la presencia de quiralidad en complejos de coordinación mononucleares y justificar su origen.                                                             | AM1<br>AM2<br>AM3<br>AM8 | BM1<br>BM2<br>BM3<br>BM7<br>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<br>AM2<br>AM3<br>AM8 | BM1<br>BM2<br>BM3<br>BM7<br>BM10<br>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.<br>- Herramientas de caracterización estructural de complejos.<br>Técnicas espectroscópicas.<br>Técnicas espectrométricas.<br>Técnicas difractométricas.<br>Técnicas basadas en propiedades magnéticas.<br>Otras técnicas.                                                                                                                                                   |
| Activación de pequeñas moléculas por compuestos de coordinación.                                                            | ? Estructura y enlace en los complejos de dinitrógeno y dióxígeno: modos de enlace<br>? Métodos de preparación de complejos de dinitrógeno y dióxígeno.<br>? Métodos de caracterización de complejos de dinitrógeno y dióxígeno:<br>Espectroscopías infrarroja y de RMN, espectrometría de masas, difracción de rayos-X de monocristal.<br>? Aplicaciones sintéticas de los complejos de dinitrógeno y dióxígeno. Perspectivas de futuro. |



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

| Planificación                                                                                                                     |                                                |                    |                                          |               |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|--------------------|------------------------------------------|---------------|
| Metodologías / pruebas                                                                                                            | Competencias                                   | Horas presenciales | Horas no presenciales / trabajo autónomo | Horas totales |
| Seminario                                                                                                                         | A1 A2 A3 B1 B2 B3<br>B4 B7 B10 B12 C1<br>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    | 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.                                                              |
| Prueba mixta | Dos de las tutorías serán de asistencia obligatoria.<br><br>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                             | 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.<br>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<br>- J. Rivas Gispert (2008). Coordination Chemistry . Weinheim: Wiley-VCH                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| Complementaria         | - 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 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 Tadaaki Mitani. Framework Control by a Metalloligand Having Multicoordination Ability: New Synthetic Approach 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