Universidad de Navarra

Química de la coordinación y organometálica (F.Ciencias)

Guía docente 2026-27

PRESENTACIÓN

- En la materia “Química de la coordinación y organometálica” se aborda el estudio de diversos aspectos relacionados con los compuestos de coordinación, como son el conocimiento del enlace en este tipo de compuestos, la interpretación de sus espectros electrónicos y vibracionales, su reactividad así como la isomería que pueden presentar. Del mismo modo se estudian aspectos generales referidos a la química de los compuestos organometálicos.
- **Titulación:** Grado en Química
- **Módulo y materia de la asignatura**: Módulo II: Fundamentos teóricos de la química, Materia 3: Química inorgánica
- **ECTS**: 6
- **Curso y semestre**: 3º Química (primer semestre), 3º doble grado Química-Bioquímica (primer semestre)
- **Carácter**: Obligatoria
- **Título**: Química de la coordinación y organometálica
- **Profesor responsable de la asignatura**: Rafael Sirera Bejarano
- **Idioma**: Español
- **Aula**: 34 (edificio de biblioteca de Ciencias)
- **Horario**: Lunes 12-13h, Martes 11-12h, Jueves 10-11h , Viernes 10-11h y 12-13h (seminarios alternos)

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Competencias)

CB1. Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio

CB2. Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.

CB3. Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.

CB4. Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.

CB5. Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

CG1. Planificar y organizar el tiempo y gestionar la propia formación continua, actualizando el conocimiento de las innovaciones del ámbito científico y saber analizar las tendencias de futuro.

CG2. Pensar de forma integrada y abordar los problemas desde diferentes perspectivas. Tener razonamiento crítico. Aportar soluciones a problemas en el ámbito científico.

CG3. Trabajar en equipo, seleccionar y elegir la metodología de trabajo y distribución de funciones. Saber escuchar y hacer uso de la palabra con intervenciones positivas y constructivas.

CG6. Usar correctamente el método de inducción. Ser capaz de generalizar el conocimiento obtenido en una ocasión a otros casos u ocasiones semejantes que puedan presentarse en el futuro.

CE1. Analizar y resolver problemas cualitativos y cuantitativos según modelos previamente desarrollados, así como reconocer nuevos problemas y planificar de estrategias para su resolución.

CE2. Procesar, computar, evaluar, interpretar y sintetizar datos e información Química.

CE7. Conocer los elementos químicos y sus compuestos -orgánicos, inorgánicos y organometálicos- más relevantes, y los grupos funcionales en moléculas orgánicas, así como sus propiedades, aplicaciones y principales vías de obtención o rutas de síntesis.

CB: Competencia básica; CG: Competencia general; CE: Competencia específica

PROGRAMA

1.- Simetría molecular.

Elementos y grupos de simetría en Química. Nomenclatura de Schönflies. Representaciones de los grupos. Propiedades de las representaciones irreducibles. Tablas de caracteres. Reducción de las representaciones reducibles. Tablas de correlación. Producto directo.

2.- Introducción a la química de compuestos de coordinación.

Introducción histórica. Conceptos y definiciones. Nomenclatura y formulación. Clasificaciones de los ligandos. Ligandos más comunes en los compuestos de coordinación. Los efectos quelato, macrocíclico y criptato. Primeras teorías de enlace para estos compuestos. Números de coordinación usuales en Química de la Coordinación.

3.- Enlace en los compuestos de coordinación de metales de transición (I): Teoría del campo cristalino (TCC/CFT) y teoría del campo de los ligandos (TCL/LFT).

Teoría del campo cristalino: Introducción histórica. Efecto de un campo de ligandos sobre los orbitales. Desdoblamiento en energía de los orbitales d para cualquier geometría. Factores que afectan a la energía de estabilización del campo del cristal. Serie espectroquímica. Consecuencias termodinámicas y estructurales de la existencia de la energía de estabilización. Teorema de Jahn-Teller: distorsión de geometrías perfectas. Covalencia en los compuestos de coordinación. Teoría del campo de los ligandos. Efecto nefelauxético. Parámetros de repulsión interelectrónica. Consecuencias magnéticas: paramagnetismo y diamagnetismo, medidas de susceptibilidades magnéticas, leyes de Curie y de Curie-Weiss. Introducción a la resonancia de espín electrónica (R.S.E.). Aplicaciones de R.S.E. en Química de la coordinación.

4.- Enlace en los compuestos de coordinación de metales de transición (II): Teoría de orbitales moleculares (TOM). Modelo del solapamiento angular (MSA/AOM).

Diagrama de orbitales moleculares para complejos octaédricos. Enlaces sigma y pi. Comportamiento de los ligandos como dadores o aceptores. Interpretación de un diagrama de orbitales moleculares. Modelo del solapamiento angular.

5.-Espectros electrónicos en compuestos de coordinación de metales de transición.

Tipos de espectros de los complejos de elementos de transición. Obtención del término fundamental de un ión libre: reglas de Hund. Niveles electrónicos de los compuestos de coordinación de metales de transición. Desdoblamiento de los términos para un ión libre bajo la influencia de ligandos en un determinado entorno. Método del producto directo para la determinación de los términos de una determinada configuración electrónica. Aproximación a campos débiles y fuertes. Reglas de selección en espectroscopía electrónica. Utilización de los diagramas de Tanabe-Sugano.

6.- Aplicación de la espectroscopía vibracional a la resolución estructural de compuestos de coordinación de metales de transición.

Fundamentos teóricos de la espectroscopía vibracional. Modos normales de vibración y su actividad en IR y Raman. Tensiones y flexiones. Resolución de un espectro vibracional: asignación de bandas. Efectos de estado sólido. Aplicaciones de la espectroscopía vibracional a la resolución estructural. Estereoquímica en torno al átomo central. Modo de coordinación de los ligandos.

7. Mecanismos de reacción en Química de la coordinación.

Mecanismos de reacción en Química Inorgánica: conceptos generales. Tipos de reacciones desde el punto de vista mecanístico. Reacciones de sustitución: generalidades. Reacciones de sustitución en complejos plano-cuadrados: Efecto trans y cis. Reacciones de sustitución en complejos octaédricos. Reacciones de transferencia electrónica: mecanismos de esfera interna y de esfera externa.

8.- Isomería en compuestos de coordinación.

Tipos de isomería. Estereoisomería. Quiralidad en los compuestos de coordinación. Nomenclatura estereoquímica de estos compuestos. Método de Bailar para el recuento de isómeros de un compuesto octaédrico. Técnicas instrumentales para dilucidar la configuración absoluta de un compuesto de coordinación: Dispersión rotatoria óptica y dicroísmo circular.

9. Química organometálica.

Propiedades generales. Ligandos más comunes en la química organometálica. Descriptiva de organometálicos en función del tipo de ligando. Carbonilos metálicos, ligandos alquilos, arilos, alilo y relacionados, ligandos carbeno y carbino, ligandos benceno y arenos, ligandos ciclopentadienilo y similares, metalocenos, ligandos fosfínicos.

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Para comunicaciones, envío de documentos con las cuestiones a tratar en los seminarios y avisos en general se empleará el Aula Virtual ADI, accesible a todos los alumnos.

1. Actividades con presencialidad física en el aula *(50 horas)*

Clases impartidas por el profesor en el aula correspondiente a los temas 1 a 8 del programa.

A través del Aula Virtual ADI al alumno se le suministrarán los documentos que contienen las transparencias utilizadas por el profesor.

Para las clases se utilizará el cañón de proyección y la pizarra (convencional y/o digital).

2. Seminarios *(7 horas):*

Se realizarán seminarios presenciales en el aula de aplicación de los contenidos abordados en las clases teóricas.

El número de seminarios puede verse incrementado a criterio del profesor para reforzar alguna de las competencias.

3. Presentaciones orales *(3 horas)*

El tema 9 del programa será preparado por los alumnos y expuesto en el aula en sesiones orales evaluables.

La evaluación de las presentaciones la realizarán los propios alumnos según una rúbrica detallada.

4. Tutorías*:*

El alumno tendrá a su disposición al profesor en su despacho en las horas convenidas para aclarar aspectos relacionados con la materia.

5.- Trabajo personal del alumno *(80-90h)*

Tiempo dedicado al estudio de la asignatura y a la realización de las distintas actividades formativas aquí descritas.

6. Sesiones de evaluación *(8 h):*

El modo de evaluación se recoge en el apartado Evaluación.

EVALUACIÓN

A continuación se desglosan las actividades evaluables y los porcentajes sobre la NOTA FINAL que los alumnos (también aquellos que hayan cursado la asignatura con anterioridad) podrán conseguir como máximo por cada una de ellas

CONVOCATORIA ORDINARIA

1. El alumno realizará 2 pruebas cortas, ambas evaluables. Calificación de las pruebas cortas realizadas a lo largo del semestre: **20% de la nota** (cada examen tendrá el mismo peso, un **10%**). Se podrán realizar pruebas muy breves y sencillas tipo test a lo largo del semestre para comprobar el grado de comprensión de los temas.

Las pruebas evaluables se realizarán el 29 de septiembre y el 4 de noviembre.

2. Elaboración de una presentación oral sobre el tema 9 del programa: **10% de la nota**

3. Examen final: **70% de la nota**

El examen final constará de ejercicios de aplicación de los contenidos impartidos y de cuestiones cortas.

Los temas tratados en las presentaciones orales no se evaluarán en los exámenes escritos.

Para promediar el examen con el resto de actividades evaluables será necesario obtener un **mínimo de 40 puntos** (sobre 100) **en el examen final**.

La NOTA FINAL se obtiene mediante la suma porcentual de las actividades evaluables reseñadas.

Todas las actividades evaluables (pruebas cortas y exposiciones orales) se realizarán en unas fechas determinada no pudiendo ser recuperables en ningún caso para aquellos alumnos ausentes (a no ser que se justifique convenientemente la no realización de la prueba, en cuyo caso se buscaría una solución consensuada entre alumno y profesor).

El examen final en convocatoria ordinaria está previsto realizarlo en modo escrito y de forma presencial en el aula.

Se calificará con NO PRESENTADO a aquel alumno que no se presente al examen final aunque haya realizado alguna de las actividades evaluables. En caso de no alcanzar 40 puntos en el examen final, la calificación que aparecerá en el acta será la obtenida en el examen final.

CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA

En la convocatoria extraordinaria **se mantendrán las calificaciones obtenidas en los puntos 1 y 2 del apartado anterior referido a la convocatoria ordinaria (30% de la calificación) y el examen final** de la convocatoria extraordinaria también supondrá un **70% de la nota final, siempre y cuando aplicar estos porcentajes no conduzca a una calificación inferior de la obtenida en el examen final, si esto ocurriera las pruebas evaluables no se tendrían en cuenta, y sus porcentajes se sumarían al del examen final. En todos los casos** será necesario obtener un **mínimo de 40 puntos** (sobre 100) **en el examen final** para que se pueda hacer promedio con el resto de actividades evaluables.

El examen final en su convocatoria extraordinaria está previsto realizarlo en modo escrito y de forma presencial en el aula.

Se calificará con NO PRESENTADO solamente a aquel alumno que no se presente a la realización del examen final extraordinario aunque haya realizado alguna de las actividades evaluables. En caso de no alcanzar 40 puntos en el examen final, la calificación que aparecerá en el acta será la obtenida en el examen final.

COMÚN A AMBAS CONVOCATORIAS

No se admitirán la copia, el plagio y el empleo de IA en ninguna de las actividades evaluables. Asimismo, queda prohibido estar en posesión de cualquier dispositivo electrónico durante la realización de las pruebas evaluables escritas (teléfonos móviles o relojes inteligentes, entre otros), siguiendo las instrucciones que a tal efecto dará el profesor al inicio de la prueba. En caso de que se produjera algunas de las situaciones anteriores en el examen final, y dada la gravedad de los hechos, el alumno suspendería la asignatura en la convocatoria correspondiente, con la calificación numérica de 0 en el examen, solo en este caso la nota que aparezca en el acta tendrá en cuenta las actividades evaluables. En caso de que se produjera algunas de las situaciones anteriores en una actividad evaluable no escrita se calificaría ésta con un cero, lo que supone una penalización en la calificación final de la asignatura acorde al porcentaje que suponga dicha actividad en la nota final de la asignatura.

Si entre los alumnos hubiera alguno que requiriese necesidades educativas especiales, deberá entregar al profesor a lo largo del semestre la autorización correspondiente a las adaptaciones emitida por la Coordinación de estudios de la Facultad. En tal caso se podrían adaptar las actividades formativas y el sistema de evaluación sin que ello supusiera algún tipo de agravio con el resto de los alumnos y sin que tampoco se vieran alteradas las competencias y objetivos a alcanzar por parte del alumno implicado. Sin dicha autorización por parte de dirección de estudios no se tendrán en cuenta las alegaciones por parte del alumno implicado.

HORARIOS DE ATENCIÓN

Dr. Rafael Sirera Bejarano (rsirera@unav.es)

- Despacho 0070 Edificio de investigación. Planta baja
- Horario de tutoría: Concertar cita previamente por correo electrónico

Solo se atenderán dudas para el examen en su convocatoria extraordinaria (junio) hasta el 28 de mayo.

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía básica

J. Ribas Gispert. "Química de coordinación" Omega. Localízalo en la Biblioteca

F.A.Cotton. *"*La teoría de grupos aplicada a la Química*"* Limusa. Localízalo en la Biblioteca

Bibliografía complementaria

Robert L.Carter. *"Molecular symmetry and group theory"* Wiley. Localízalo en la Biblioteca

A.Vincent. *"Molecular symmetry and group theory"* Wiley. Localízalo en la Biblioteca

G.L.Miessler y D.A.Tarr. *"Inorganic Chemistry"* Prentice Hall 2nd edition. Localízalo en la Biblioteca

Universidad de Navarra

C.E.Housecroft y A.G.Sharpe. *"Química Inorgánica"* Pearson-Prentice Hall 2ª edición. Localízalo en la Biblioteca (*Libro electrónico*)

B.E.Douglas, D.H.McDaniel y J.J.Alexander. *"Conceptos y modelos de Química Inorgánica"* Reverté 2ª edición. Localízalo en la Biblioteca

J.E.Huheey, E.A.Keiter y R.L.Keiter. *"Química Inorgánica. Principios de estructura y reactividad"* Oxford University Press Harla 4ª edición. Localízalo en la Biblioteca

D.Sutton. *"Espectros electrónicos de los complejos de los metales de transición"* Reverté. Localízalo en la Biblioteca

R.H.Crabtree. *"Química organometálica de los metales de transición"* Universidad Jaume I. Localízalo en la Biblioteca