

UNIVERSIDAD INTERAMERICANA DE PUERTO RICO
RECINTO _____
DEPARTAMENTO DE _____
PROGRAMA DE QUÍMICA

PRONTUARIO

I. Información General

Título del Curso	:	Química Inorgánica Avanzada
Código y número	:	CHEM 4200
Creditaje	:	3 créditos
Término Académico	:	
Profesor	:	
Horario de oficina	:	
Teléfono de oficina	:	
Correo electrónico	:	

II. Descripción

Estudio de las reacciones, propiedades y aplicaciones de los compuestos inorgánicos y de coordinación. Análisis de las teorías de enlace de valencia, de orbitales moleculares y de campo cristalino. Estado sólido, simetría y sus aplicaciones. Requisitos: CHEM 2222, 3320 y PHYS 3002.

III. Objetivos

Visión a nivel Macro

1. Utilizar o aplicar los diferentes modelos de la teoría de estructura atómica para predecir los estados energéticos y orbitales atómicos, términos de estado, carga nuclear efectiva, transiciones electrónicas (aspecto atómico) y electronegatividad.
2. Distinguir entre las diferentes teorías de enlace químico y utilizar estas para el entendimiento y predicción del comportamiento de la materia, tanto sus propiedades químicas como físicas.
3. Identificar y describir los diferentes tipos de estructuras cristalinas para los sólidos covalentes, iónicos y metálicos. Correlacionar eficiencia de empaque y defectos cristalinos con los tipos de estructuras y sus propiedades químicas y físicas. Utilizar la energía reticular y parámetros termodinámicos para determinar la estabilidad de los sólidos iónicos.
4. Reconocer las diferentes definiciones de ácido y base y categorizar las especies y reacciones químicas de acuerdo a estas definiciones.
5. Conocer y calcular el estado de oxidación de compuestos inorgánicos. Determinar el agente oxidante y el agente reductor dado una reacción tipo redox.
6. Aplicar los principios de teoría de grupo para determinar los elementos de simetría y grupos puntual de una molécula, para explicar la formación de orbitales moleculares y predecir las bandas de absorción fundamentales según los espectros de Infrarrojo y Raman.
7. Aplicar las diferentes teorías asociadas a coordinación química para predecir estructura, reactividad y espectro electrónico de complejos metálicos. Aplicar las teorías asociadas a la

cinética para describir rapidez, orden de reacción y mecanismo para los compuestos de coordinación.

8. Identificar los complejos organometálicos y los ligandos más comunes en organometálica. Utilizar la Regla de los 18-electrones para predecir estabilidad y reactividad de los complejos organometálicos.

Terminales y Capacitantes

1. Estructura Atómica

a. Espectroscopia

1. Conocer contribución de la espectroscopía al concepto moderno de estructura electrónica
2. Definir y utilizar las relaciones entre: energía, frecuencia, largo de onda las unidades en que éstas se pueden expresar.
 - a. Asociar E con las distintas transiciones electrónicas.
 - b. Dualidad Partícula-Onda
 1. Entender la relación de De-Broglie
 2. Utilizar esta relación (De-Broglie)

b. Ecuación de Schrödinger. Conocer:

1. Tránsito histórico de la ecuación de Schrödinger.
2. Contribución del conocimiento de esta ecuación, para el desarrollo de mecánica cuántica, utilizando el modelo del átomo de hidrógeno.
3. Función de onda (Ψ), cuadrado de (Ψ^2) y probabilidad, y sus implicaciones.

c. Números Cuánticos. Conocer:

1. Origen de los números cuánticos
2. Valores de cada uno de los números cuánticos.
3. Uso de los números cuánticos en cuanto a: configuración electrónica, diagramas de energía, tipos de orbitales (s, p, contornos de los orbitales (s, p, d), variación de la energía de los orbitales atómicos con números atómicos. Principio de Exclusión de Pauli. Regla de Máxima multiplicidad de Hund.
4. Definir y conocer punto nodal.

d. Representación gráfica de funciones de onda.

1. Utilizando funciones de onda de átomo de hidrógeno y distintos números cuánticos conocer las representaciones para funciones radiales y de momentos angulares.

e. Tabla Periódica. Conocer y utilizar:

1. Orden de llenar orbitales atómicos y su relación con la tabla periódica.
2. Principio de Aufbau y su relación con los niveles de energía.
3. Conocer periodicidad de los elementos.
4. Conocer y aplicar las propiedades que varían en la tabla periódica y la definición de cada una de estas (radio atómico, radio iónico, energía de ionización, afinidad electrónica, electronegatividad y abundancia natural).
5. Definir radio de Van der Waals, radio covalente, radio iónico y radio metálico. Utilizar esta información para predecir distancia de enlaces.
6. Conocer la relación diagonal de los elementos en la tabla periódica.
7. Memorizarse los elementos de la tabla periódica.

2. Enlace Covalente

a. Formación de enlace

1. Explicar el concepto de solape (enlazante, antienlazante y no enlazante).
2. Explicar biometría y tipos de enlace.

3. Explicar en qué consiste la estabilidad relativa que se obtiene al formar un enlace
 4. Explicar la variación de energía (en moléculas diatómicas), con la distancia internuclear (r).
- b. Orbitales moleculares
1. Explicar el concepto de orbital molecular.
 2. Explicar la formación de orbitales moleculares, a partir de los orbitales atómicos.
 3. Definir los orbitales moleculares localizados y deslocalizados.
 4. Explicar casos sencillos de orbitales moleculares para moléculas diatómicas, homonucleares y heteronucleares.
 5. Conocer y explicar la formación de orbitales moleculares en moléculas poliatómicas (tipos AB_2 , AB_3).
- c. Definir y conocer con ejemplo los siguientes conceptos relacionados con enlace covalente.
1. Carácter iónico parcial
 2. Regla de Bent
 3. Orden de enlace
 3. Energía de enlace, sencillo, doble y triple
 - d. Explicar e interrelacionar energía de enlace, orden de enlace y largo de enlace.
- e. Fuerzas Intermoleculares
1. Definir fuerzas intermoleculares
 2. Conocer los distintos tipos de fuerzas intermoleculares (Van der Waals, ión dipolo, dipolo-dipolo, ión-dipolo inducido, dipolo-dipolo inducido, dipolo inducido-dipolo inducido, puentes de hidrógeno).
 3. Determinar estas fuerzas en un sistema.
 4. Utilizar las reglas de Fajans en la predicción de carácter polar relativo.

3. Estado Sólido

- a. Eficiencia de empaque ("packing efficiency")
1. Determinar los sitios o huecos creados al empacar (huecos tetrahedrales, huecos octahedrales).
 2. De ejemplos de estructuras cristalinas donde se observan estos arreglos: (estructura Spinel, Perovskite, etc.)
- b. Tipos de Cristales
1. Caracterizar un cristal de acuerdo a los ángulos
 2. Calcular diferencias entre átomos dentro de una celda unitaria.
 3. Utilizar la regla de Slater al determinar radios iónicos.
 4. Aplicar razón de radio (radius ratio) para predecir teóricamente el tipo de estructura cristalina obtenida.
 5. Describir en detalles (tipo de celda unidad, número de coordinación, ubicación de los átomos, cantidad de átomos) algunos tipos de cristales, como por ejemplo: Na Cl, diamante, TiO_2 (Rutilo), Grafito, Cs Cl, CaF_2 ("Fluorite"), ZnS, "Zinc Blende", etc.).
 6. Bandas de conducción en los cristales, describirlas.
 7. Los defectos en las estructuras cristalinas y los semiconductores.
- c. Energía de Red Cristalina
1. Definir las fuerzas de atracción y repulsión presentes en los cristales.
 2. Describir la naturaleza y utilidad de la constante de Madelung.
 3. Determinar la energía de red cristalina y determinar los factores que pueden afectar esta energía utilizando las ecuaciones de Born-Landé y Kaputinski.

4. Reconocer y utilizar distintas entidades termodinámicas para construir un Ciclo de Born-Haber y describir la estabilidad energética del compuesto, como una forma de calcular energía de red cristalina (estimar).
5. Comparar la estabilidad del retículo en cuanto a energía y estructura del mismo.

4. Ácidos, Bases y Disoluciones

- a. Defina un solvente en cuanto a sus características prótico y aprótico, constante dieléctrica y polaridad.
- b. Examine distintos tipos de solventes (acuosos y no-acuosos) y determine sus características. Vea su posible utilización.
- c. Determine los criterios a utilizarse, al seleccionar un solvente, para un análisis o reacción específica (Ejemplo R_x Redox).

5. Oxidación y Reducción

- a. Conocer y calcular el estado de oxidación de compuestos inorgánicos.
- b. Determinar el agente oxidante y el agente reductor dado una reacción tipo redox.

6. Teoría de Grupo

- a. Conocer y utilizar los elementos de simetría
- b. Utilizar las operaciones de simetría
- c. Determinar grupo puntual ("point group")
- d. Explicar la importancia y aplicaciones de la teoría de grupo en enlazamiento químico y en espectroscopía de infrarrojo y Raman.

7. Química de Coordinación

- a. Definiciones Básicas. Defina e identifique:
 1. Ión central
 2. Número de coordinación
 3. Ligando
 4. Dado un complejo inorgánico, el número de oxidación
 5. Carga neta de un ión complejo
 6. Back Bonding
- b. Identificar y escribir:
 1. Los ligandos más comunes, como por ejemplo: monodentado, bidentado y tridentado, incluyendo iones y moléculas.
 2. La geometría del compuesto coordinado, así como la evidencia para asignarle esa geometría.
 3. Dada la fórmula de un complejo inorgánico, determine el ion central y determine el número de coordinación.
 4. Dada la fórmula de un complejo inorgánico, predecir la posibilidad de estereoisomerismo: para tetrahedral y planar cuadrado B_2 , MA_2 , $M(CD)_2$ donde DC es un ligando bidentado asimétrico como por ejemplo $NH_2CH_2CH_2PH_2$; para complejo octahedral $MA_2B_2C_2$ e identificar cual(es) de estos isómeros son ópticamente activo.
- c. Enlace
 1. Explicar con ejemplos las teorías de enlaces: enlace de valencia (Valence Bond), teoría de campo cristalino (crystal field theory) o "Ligand Field", y orbitales moleculares, para la formación de complejos coordinados.
- d. Teoría de Campo Cristalino ("Crystal Field Theory")

1. Definir y diferenciar los distintos tipos de campos cristalinos, a saber: octahedral, tetrahedral, cuadrado planar, etc.
 2. Determinar para los orbitales d, la separación energética de estos en presencia de campos octaédricos y tetraédricos.
 3. Determine los niveles y valores de energía en los distintos campos cristalinos.
 4. Determine la energía de estabilización por campo cristalino ("CFSE") en los distintos arreglos (expresados en D_q).
 5. Considere las posibilidades de alto y bajo espín en los distintos campos ("high and low spin"). Calcule CFSE en cada caso.
 6. Considere el efecto de las diferencias en energía, en base al tipo de campo fuerte o débil. ("Strong and/or weak field"). Considere la serie espectroquímica, en este análisis.
 7. Considere ambos efectos de ligando y catión en la diferencia de energía ($10 D_q$).
 8. Considere y de ejemplos en los que usando teoría de campo cristalino, pueda predecir: estabilidad relativa de un complejo; valores relativos de energía para distintos tipos de cationes en una reacción en particular (Ej: Hidratación), etc.
 9. Determine el efecto en los orbitales, si hay estados degenerados (Jahn-Teller Effect). Establezca el efecto en la geometría del compuesto.
 10. Determine diagrama de energía por orbitales moleculares, para complejos. Compare el arreglo de orbitales obtenido, con el que se obtiene usando teoría de campo cristalino.
 11. Utilice la evidencia experimental, para determinar la magnitud de la separación de niveles en el campo cristalino.
 12. Analice las posibles transiciones electrónicas usando el diagrama de orbitales moleculares y los diagramas de Orgel.
 13. Analice la evidencia de estabilización de energía.
- e. Cinética de Compuestos de Coordinación. Reacciones y mecanismos
1. Dar ejemplos de sustituciones de complejos lábiles (labile) de cobalto y platino.
 2. Prediga productos, posibles isómeros y efecto de la geometría final de los productos, usando el efecto TRANS.
 3. Defina y utilice el efecto del Quelato ("Chelating effect") para predecir estabilidad relativa de productos.
 4. Describa una reacción redox ejemplar para cambios "inner sphere" y "outer sphere".
 5. Describa mecanismos de reacción para sustituciones, isomerizaciones y oxidación-reducción.
 6. Proponga orden de reacción y ley de rapidez de acuerdo al mecanismo postulado.
- f. Número Atómico y Efectivo
1. Defina el concepto del número atómico efectivo (effective atomic number) usado para determinar estructura de un compuesto coordinado
 2. Determine posibles tipos de estructuras (usando el concepto de número atómico efectivo), incluyendo: iones, compuestos neutrales y la posibilidad de enlace metal-metal; en compuestos donde hay presentes como ligandos carbonilos, nitrosilos, etc. Presente posibilidad de equilibrio entre isómeros de éstos compuestos.

8. Química Organometálica

- Defina la Regla de los 18-electrones y utilice esta para predecir si el complejo organometálico es estable y su posible estructura.
- Identifique y escriba los ligandos más comunes en química organometálica.
- Categorice los ligandos de acuerdo al número de electrones que dona el metal.
- Dado el nombre o la fórmula de un complejo organometálico, dibuje la estructura.
- Conocer ejemplos clásicos o típicos de reactividad química y catalítica exhibida por los complejos organometálicos.
- Predecir estructura de los aglomerados metálicos (Clusters) simples y reconocer la importancia de estos en catálisis química.

COMPETENCIAS DEL PERFIL DE EGRESADO QUE SE ATIENDE EN ESTE CURSO

- Demostrar comunicación efectiva escrita y oral, en español e inglés en la redacción y análisis de textos técnicos.

IV. Contenido Temático

Tópicos	Secciones Asignadas
Estructura Atómica	1 (1.1-1.7)
Enlace Covalente	2 (2.1-2.16)
Estado Sólido	3 (3.1-3.20)
EXAMEN PARCIAL #1	
Ácidos, Bases y Disoluciones	4 (4.1-4.13)
Oxidación y Reducción	5 (5.1-5.11)
Teoría de Grupo	6 (6.1-6.9)
EXAMEN PARCIAL #2	
Química de Coordinación (Definiciones Básicas, Métodos de Difracción, Estructura Electrónica y Propiedades, Enlace)	7 (7.1-7.11), 8 (8.1 y 8.2)
Química de Coordinación (Teoría de Campo Cristalino ("Crystal Field Theory"), Cinética de Compuestos de Coordinación Reacciones y mecanismos)	20 (20.1), 21 (21.1-21.12)
Química Organometálica	22 (22.1-22.7, 22.14, 22.17-22.18)
EXAMEN PARCIAL #3	
EXAMEN FINAL: fecha asignada por el departamento en semana de finales.	

V. Actividades

A. Prácticas de Laboratorio

N/A

B. Estrategias de Enseñanza

Se recomienda utilizar estrategias como las siguientes:

1. trabajo en grupo
2. aprendizaje cooperativo
3. descubrimiento dirigido
4. demostraciones
5. recopilación y discusión de datos en grupo
6. películas
7. simulaciones
8. aplicación de "software" para tratamiento de datos y discusiones grupales
9. mapas conceptuales

VI. Evaluación

Criterio de Evaluación	Puntos	%
Examen Parcial # 1	100	20.0
Examen Parcial # 2	100	20.0
Examen Parcial # 3	100	20.0
Examen FINAL (comprehensivo)	100	20.0
Reseña Crítica	100	10.0
Presentación Oral	100	10.0

1. Se aplicará la siguiente escala de evaluación en la nota final.

- 100-85 A
- 84-75 B
- 74- 65 C
- 64-55 D
- 54-0 F

VII. Notas Especiales

- A. Servicios auxiliares o necesidades especiales:** Todo estudiante que requiera servicios auxiliares o asistencia especial deberá solicitar los mismos al inicio del curso o tan pronto como adquiera conocimiento de que los necesita, a través del registro correspondiente, en la Oficina de Orientación con _____.
- B. Honradez, fraude y plagio:** La falta de honradez, el fraude, el plagio cualquier otro comportamiento inadecuado con relación a la labor académica constituyen infracciones mayores sancionadas por el Reglamento General de Estudiantes. Las infracciones mayores, según dispone el Reglamento General de Estudiantes, pueden tener como consecuencia la suspensión de la Universidad por un tiempo definido mayor de un año o la expulsión permanente de la Universidad, entre otras sanciones.
- C. Uso de dispositivos electrónicos:** Se desactivarán los teléfonos celulares y cualquier otro dispositivo electrónico que pudiese interrumpir los procesos de enseñanza y aprendizaje o alterar el ambiente conducente a la excelencia académica. Las situaciones apremiantes serán atendidas, según corresponda. Se prohíbe el manejo de dispositivos electrónicos que permitan acceder, almacenar o enviar datos durante evaluaciones o exámenes.
- D. Cumplimiento con las disposiciones del Título IX:** La Ley de Educación Superior Federal, según enmendada, prohíbe el discrimen por razón de sexo en cualquier actividad académica, educativa, extracurricular, atlética o en cualquier otro programa o empleo, auspiciado o controlado por una institución de educación superior independientemente de que esta se

realice dentro o fuera de los predios de la institución, si la institución recibe fondos federales.

Conforme dispone la reglamentación federal vigente, en nuestra unidad académica se ha designado un(a) Coordinador(a) Auxiliar de Título IX que brindará asistencia y orientación con relación a cualquier alegado incidente constitutivo de discrimen por sexo o género, acoso sexual o agresión sexual. Se puede comunicar con el Coordinador(a) Auxiliar _____ extensión _____, o al correo electrónico _____

El Documento Normativo titulado **Normas y Procedimientos para Atender Alegadas Violaciones a las Disposiciones del Título IX** es el documento que contiene las reglas institucionales para canalizar cualquier querrela que se presente basada en este tipo de alegación. Este documento está disponible en el portal de la Universidad Interamericana de Puerto Rico (www.inter.edu).

VIII. Recursos Educativos

A. Libro de Texto:

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G. *Inorganic Chemistry*; 3rd Edition, Pearson-Prentice Hall, 2008.
ISBN: 978-0-13-17553-6

IX. Bibliografía

A. Libros

1. Gary L. Miessler, Paul J. Fischer and Donald A. Tarr "Inorganic Chemistry", Prentice Hall, 5th edition, 2014. ISBN-13: 978-0321811059, ISBN-10: 0321811054.
2. Alan Vincent, "Molecular Symmetry and Group Theory: A Programmed Introduction to Chemical Application" John Wiley and Sons, 2nd edition, 2001. ISBN-13: 978-0471489399, ISBN-10: 0471489395.
3. F. Albert Cotton "Chemical Applications of Group Theory", John Willey and Sons, 3rd edition, 1990. ISBN-13: 978-0471510949, ISBN-10: 0471510947.
4. F.A. Cotton, G. Wilkinson, Carlos A. Murrillo and Manfred Bochmann. "Advanced Inorganic Chemistry", John Willey and Sons, 6th edition 1999. ISBN-13: 978-0471199571, ISBN-10: 0471199575.
5. James E. Huheey, "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity". Benjamin Cummings, 4th edition, 1997, ISBN-13: 978-0060429959, ISBN-10: 006042995X.
7. F.A. Cotton, G. Wilkinson, and Paul L. Gaus, "Basic Inorganic Chemistry", John Wiley and Sons, 3rd edition, 1994. ISBN-13: 978-0471505327, ISBN-10: 0471505323.
8. Valenzuela C. "Introducción a la Química Inorgánica, McGraw Hill, Primera edición, 1999, ISBN-10: 8448124820, ISBN-13: 978-8448124823.

B. Recursos Electrónicos

1. http://cw.prenhall.com/bookbind/pubbooks/housecroft_ema/
2. <http://www.chem.purdue.edu/gchelp/cchem/>

Fecha de Revisión: noviembre 2018