



Universidad
de Alcalá

GUÍA DOCENTE

COMPUESTOS INORGÁNICOS PARA LA CIENCIA MODERNA (660028)

Grado en Química
Universidad de Alcalá

Curso Académico 2022/2023
4º Curso – 2º Cuatrimestre

GUÍA DOCENTE

Nombre de la asignatura:	COMPUESTOS INORGÁNICOS PARA LA CIENCIA MODERNA
Código:	660028
Titulación en la que se imparte:	GRADO EN QUÍMICA
Departamento y Área de Conocimiento:	Dpto. Química Orgánica y Química Inorgánica Área: Química Inorgánica
Carácter:	OPTATIVA
Créditos ECTS:	6 ECTS (4,5 teóricos + 1,5 prácticos)
Curso y cuatrimestre:	4º Curso, 2º cuatrimestre
Profesorado:	Dra. Eva Royo Cantabrana (Coordinadora)
Horario de Tutoría:	Mediante cita previa
Idioma en el que se imparte:	Español

1. PRESENTACIÓN

En esta asignatura se estudian las contribuciones y aplicaciones más significativas de la Química Inorgánica en los campos de la catálisis y la química bioinorgánica, con especial hincapié en los retos que aún quedan por alcanzar y el desarrollo del área en I+D. Fundamentada en conocimientos ya adquiridos por los alumnos en asignaturas y/o cursos previos, la asignatura les permitirá valorar el enorme impacto social, económico y científico de la química inorgánica.

Prerrequisitos y Recomendaciones (si es pertinente)

Se requiere poseer los conocimientos impartidos en las asignaturas de Química Inorgánica I y II de los cursos anteriores. Las asignaturas de Bioquímica, Química Física (3º) y Química Organometálica facilitarán algunos de los conceptos básicos utilizados en la asignatura.

2. COMPETENCIAS

Competencias genéricas:

1. Capacidad de análisis y de síntesis.
2. Capacidad de comprensión de textos científicos escritos en inglés
3. Capacidad de crítica y autocrítica.
4. Habilidad para trabajar de forma autónoma.
5. Sensibilidad hacia temas medioambientales.

6. Habilidades de estudio, necesarias para la formación continua y el desarrollo profesional.

Competencias específicas:

1. Conocer los principios de sostenibilidad medioambiental y los parámetros que nos permiten cuantificarla en las reacciones químicas. Conocer también el esfuerzo actual de la investigación científica y la aplicación industrial para lograr procesos más sostenibles. Comprender la relación entre sostenibilidad y catálisis.
2. Conocer y comprender los fundamentos químicos de la catálisis homogénea, heterogénea y enzimática y aplicarlos en algunos procesos tipo que se describirán como ejemplos.
3. Relacionar la investigación científica en Química Inorgánica con la aplicabilidad industrial-de los complejos de coordinación y organometálicos en procesos catalíticos.
4. Conocer la participación de los metales en los procesos biológicos naturales y biomédicos, relacionándolos con su naturaleza y sus características redox y ácido base. Relacionar éstos con el desarrollo actual en I+D de la Química Bioinorgánica.
5. Valorar las ventajas que pueden proporcionar los complejos metálicos en la síntesis de moléculas de interés biológico y en la búsqueda de recursos renovables.
6. Conocer las aplicaciones más importantes que han encontrado los fármacos inorgánicos, relacionándolos con las características de la naturaleza y el comportamiento químico de cada especie. Relacionar estas aplicaciones con los retos planteados actualmente en investigación biomédica.

3. CONTENIDOS

Teóricos:

Bloque 1: Catálisis

Tema 1.- Introducción a la Catálisis: Química sostenible: Contexto histórico del desarrollo sostenible, objetivos y herramientas. La catálisis como herramienta de la química sostenible. El proceso catalítico: Definiciones básicas y tipos de catálisis, ventajas e inconvenientes. La catálisis como fenómeno cinético y conceptos fundamentales. Herramientas prácticas en el estudio cinético. Características del catalizador. Eficiencia de un catalizador: actividad (TON/TOF), selectividad y especificidad. Procesos de desactivación.

Tema 2.- Catálisis homogénea. Introducción. Complejos metálicos como catalizadores en catálisis homogénea. Efectos estéricos y electrónicos de los ligandos. Simetría de los ligandos y los complejos y catálisis asimétrica. Presente y

futuro de la catálisis homogénea: Ciclos catalíticos importantes y tendencias actuales en I+D. Activación de pequeñas moléculas y sostenibilidad (CO y proceso Monsanto, H₂ hidrogenación, hidrogenación asimétrica, transferencia de hidrógeno y préstamo de H₂. Incorporación y reducciones de CO₂. Reversibilidad de procesos, pares CO₂/HCCOH y CO₂/MeOH. Hidrocarburos: polimerización estereoespecífica. Acoplamientos cruzados. Acoplamientos dehidrogenativos y fotocatalizadores. Recuperación del catalizador y reciclado sostenible: Alternativas a los disolventes orgánicos: biodisolventes, fluidos supercríticos, líquidos iónicos. Catalizadores soportados e híbridos.

Tema 3.- Catálisis heterogénea. Introducción y conceptos fundamentales (sitio activo, pasos catalíticos). El fenómeno de adsorción, tipos y características. Características del catalizador heterogéneo (sitio activo, soportes, síntesis y técnicas de caracterización habituales). El impacto de la nanotecnología en la catálisis heterogénea. Alternativas a los catalizadores clásicos: catalizadores de transferencia de fase y catalizadores híbridos, MOFs y SOMC. Aplicaciones comerciales de la catálisis heterogénea: El catalizador de automoción. Tendencias actuales en I+D: Activación fotocatalítica de agua en la producción de hidrógeno.

Bloque II: Química Bioinorgánica

Tema 4.- Introducción a la Química Bioinorgánica. Contexto histórico, definición y características, esencialidad y toxicidad y diagramas de respuesta. Metalobiomoléculas: tipos y características, ligandos de interés biológico y funciones más importantes. Consideraciones termodinámicas y cinéticas de los procesos mediados por metalobiomoléculas. Herramientas de investigación en Química Bioinorgánica.

Tema 5. Metalobiomoléculas: Procesos de transporte, activación y almacenamiento de moléculas pequeñas e iones metálicos (estructuras y funciones de la hemoglobina y mioglobina, ionóforos, bomba de Na/K, ferritina y transferrina). Procesos de iniciación y regulación (estructuras y funciones de la calmodulina y Mg²⁺). Procesos de estabilización estructural (biomateriales y dedos de Zn).

Tema 6. Metaloenzimas: Procesos ácido-base biológicos: bioquímica del Zn(II). Estructuras y ciclos enzimáticos de la anhidrasa carbónica(II) y carboxipeptidasas. Procesos redox biológicos: bioquímica del Cu y el Fe. Estructuras y ciclos enzimáticos del citocromo P-450, peroxidasas, catalasas y superóxido dismutasa, Proteínas de Cu tipo 1. Proteínas de hierro/azufre. Nitrógenasa: fijación química y biológica. Bioquímica del manganeso y fotosíntesis. Retos en I+D: metaloenzimas artificiales.

Tema 7.- Química Inorgánica Medicinal. Introducción histórica. Estructuras, mecanismos de acción y dianas terapéuticas de fármacos inorgánicos: antiartríticos (compuestos de Au); anticancerígenos (cisplatino, complejos de Ru(II) y Ru(III), Au(I) y Au(III) y tendencias actuales en el área: selectividad y direccionalidad

farmacológica), antibacterianos y antimicrobianos (complejos de Ag, Hg y tendencias actuales en la lucha contra las bacterias multiresistentes) y antivirales (óxidos metálicos). Quelatoterapias: Fundamentos y características de los fármacos quelatantes (sideróforos, desferal, BAL, etc). Tendencias actuales en la búsqueda de fármacos para enfermedades neurodegenerativas y radiofármacos.

Prácticos:

La finalidad de las sesiones de prácticas es complementar la formación adquirida en las clases teóricas mediante la realización de experiencias en el laboratorio que impliquen aspectos de síntesis, caracterización y aplicación de catalizadores y complejos modelo bioinorgánicos:

Práctica 1: Síntesis y caracterización de catalizadores de Ni(II) para la reacción de Suzuki Miyaura.

Práctica 2: Síntesis y caracterización de fragmentos metalorgánicos de Cu(II) y su utilización como agentes de purificación de aguas.

Práctica 3. Síntesis y caracterización de un modelo de haloperoxidasa y su aplicación en la oxidación de tioanisól.

Práctica 4. Complejos modelo de Co(salen) en la fijación y transporte de O₂ molecular.

Bloques de contenido (se pueden especificar los temas si se considera necesario)	Total de clases, créditos u horas
<p style="text-align: center;">Bloque I.- Catálisis</p> <p>Tema 1.- <i>Introducción a la Catálisis.</i></p> <p>Tema 2.- <i>Catálisis homogénea.</i></p> <p>Tema 3.- <i>Catálisis heterogénea.</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> • 20 horas
<p style="text-align: center;">Bloque II. Química Bioinorgánica</p> <p>Tema 4.- <i>Introducción a la Química Bioinorgánica.</i></p> <p>Tema 5.- <i>Metalobiomoléculas.</i></p> <p>Tema 6.- <i>Metaloenzimas</i></p> <p>Tema 7. <i>Química inorgánica medicinal</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> • 17 horas
<p style="text-align: center;">Parte III. Prácticas de Laboratorio</p>	<ul style="list-style-type: none"> • 23 horas

4. METODOLOGÍAS DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE.-ACTIVIDADES FORMATIVAS

4.1. Distribución de créditos (especificar en horas)

Número de horas presenciales: 63	Clases teóricas y seminarios: 37h Prácticas de laboratorio: 23h Tutorías ECTS: 3h
Número de horas del trabajo propio del estudiante: 87	Estudio autónomo: estudio independiente, elaboración trabajos, actividades dirigidas, y ejercicios
Total horas	150

4.2. Estrategias metodológicas, materiales y recursos didácticos

Actividades presenciales	<ul style="list-style-type: none"> • Grupo grande (T): Exposición y discusión con el alumno de los aspectos concretos de cada tema del programa en clases lectivas. El desarrollo de las lecciones se llevará a cabo en pizarra y se completará con presentaciones mediante ordenador y proyector, elaboradas por el profesor. Para la preparación y ampliación de los contenidos se utilizarán los libros recogidos en la bibliografía. A través del Aula Virtual se facilitará material docente adicional (Presentaciones PPoint, lecturas recomendadas). • Grupo reducido (S): Al finalizar cada tema o conjunto de temas se realizarán seminarios. Las sesiones de seminario se destinarán a debatir la aplicación e interpretación de los conocimientos adquiridos para consolidar su aprendizaje y adquirir entrenamiento en el uso de recursos bibliográficos. • Grupo de laboratorio (P): Se realizarán prácticas de laboratorio relacionadas con los contenidos teóricos tratados que contribuyan a desarrollar su destreza experimental, capacidad de observación, de análisis de resultados y razonamiento crítico. Para la realización de las prácticas se proporcionará a los alumnos un manual de laboratorio.
--------------------------	---

	<ul style="list-style-type: none"> • Tutorías ECTS: Asesoramiento individual en pequeños grupos sobre cuestiones planteadas, por los alumnos o por el profesor, relacionadas con el temario de la materia.
Actividades no presenciales	<ul style="list-style-type: none"> • Análisis y asimilación de los contenidos de la materia. Resolución de problemas. Consulta bibliográfica. Preparación de trabajos individuales y/o grupales. • Realización de tutorías on line.

5. EVALUACIÓN: Procedimientos, criterios de evaluación y de calificación

Procedimientos de evaluación:

El alumno podrá ser evaluado de forma continua o mediante la realización de un examen final. El alumno dispone de dos convocatorias, ordinaria y extraordinaria, para superar el correspondiente curso académico. El alumno que desee acogerse a "Evaluación por Examen Final" en la convocatoria ordinaria deberá solicitar por escrito este modo de evaluación al Decano de la Facultad.

La asistencia y superación de las sesiones experimentales de laboratorio es obligatoria, tanto en la Evaluación Continua como en la Evaluación por Examen Final. Dichas sesiones serán evaluadas mediante el seguimiento del trabajo en el laboratorio y el cuaderno de laboratorio (25% de la calificación global).

Evaluación Continua:

La asistencia a las clases de seminario y tutorías ECTS es obligatoria para los alumnos que siguen el sistema de evaluación continua. Más de un 15% de faltas injustificadas supone que el alumno será considerado no presentado en la convocatoria ordinaria.

La evaluación de la parte teórica se basará en la realización como mínimo de dos pruebas parciales eliminatorias siempre que la calificación en cada una de ellas sea igual o superior a 5,0 (50% de la calificación global) y ejercicios periódicos de seminario (25%). Los ejercicios consistirán en la resolución de casos prácticos y preguntas cortas que se realizarán de forma individual o en pequeños grupos.

Los alumnos que no superen la evaluación continua tendrán que realizar un examen final en la convocatoria extraordinaria.

Evaluación por Examen Final:

El examen final constará de preguntas cortas y de desarrollo, cuya calificación contribuirá un 75% a la nota final, siendo el 25% restante la nota de las sesiones experimentales.

Criterios de evaluación:

1. Asistencia y participación en seminarios.
2. Asimilación y comprensión de los contenidos.
3. Capacidad de aplicación de los conocimientos adquiridos.
4. Integración y comunicación de los conocimientos.
5. Interpretación de los resultados y resolución de preguntas y problemas.
6. Gestión del tiempo en las actividades planificadas y en los experimentos de laboratorio. Relación e integración de conceptos teóricos y experimentales.

Criterios de calificación:

Evaluación Continua.- Convocatoria ordinaria: dos pruebas parciales (50%) (el porcentaje de cada prueba parcial corresponderá al peso que tenga la materia examinada en el programa de la asignatura), resolución periódica de ejercicios (25%) y prácticas (25%). Convocatoria extraordinaria: teoría y ejercicios (75%), prácticas (25%).

Evaluación por Examen Final.- Convocatorias ordinaria y extraordinaria: teoría (75%) y prácticas (25%).

No están permitidas prácticas de copia o plagio, ya sea en las tareas o en las pruebas finales, en el caso de realizarlas los alumnos serán suspendidos pudiéndose estudiar posibles acciones disciplinarias.

6. BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía Básica

- [1] P.W.N.M. van Leeuwen, *Homogeneous Catalysis: Understanding the art*, Kluwer Acad. Pub. **2004**.
- [2] G. Rothenberg. *Catalysis, concepts and green applications*. Wiley VCH Verlag GmbH. **2008**
- [3] Eds. U. Hanefeld and L. Lefferts. *Catalysis, an integrated textbook for students*. Wiley-VCH. **2018**.

- [4] Eds. G. P. Chiusoli and P. Maitlis. Metal catalysis in industrial organic processes, RSC publishing, **2006**.
- [5] Elschenbroich, Organometallics, Wiley VCH, **2005**.
- [5] M. Vallet, J. Faus, E. García-España, J. Moratal, *Introducción a la Química Bioinorgánica*, Síntesis S.A., **2003**.
- [6] J. R. Frausto da Silva, J. P. Williams. The biological chemistry of the elements. Oxford University Press, **2001**.
- Kaim, Schwederski and Kellin. Bioinorganic Chemistry: Inorganic elements in the Chemistry of Life. Wiley.
- [7] K. Strohhfeld, Essentials of Inorganic Chemistry, Wiley VCH, **2015**.
- [8] E. Alessio, Bioinorganic Medicinal Chemistry, Wiley-VCH, **2011**.

Tutoriales de la Biblioteca

- [AlfaBuah](#). Orienta en la búsqueda, selección y evaluación de información para la realización de un trabajo académico.
- [Estrategias de búsqueda y recuperación de la información](#). Muestra los pasos para obtener con mayor exhaustividad y pertinencia la información deseada cuando se realiza una búsqueda bibliográfica.
- [Fuentes de información](#). Conocer los tipos de documentos ayuda a distinguir y seleccionar las fuentes de información adecuadas para el trabajo que se esté realizando.
- [Cómo citar](#). Guía de estilos. Recursos y ejemplos.
- [Practica tus habilidades informacionales en Ciencias y Ciencias de la Salud](#).

La Universidad de Alcalá garantiza a sus estudiantes que, si por exigencias sanitarias las autoridades competentes impidieran la presencialidad total o parcial de la actividad docente, los planes docentes alcanzarían sus objetivos a través de una metodología de enseñanza-aprendizaje y evaluación en formato online, que retornaría a la modalidad presencial en cuanto cesaran dichos impedimentos.