



Guía Docente				
Datos Identificativos				2012/13
Asignatura (*)	Espección Química e Computación	Código	610500015	
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	2º cuatrimestre	Primeiro	Optativa	3
Idioma	CastelánGalego			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Física e Enxeñaría Química 1			
Coordinación	Sastre De Vicente, Manuel Esteban	Correo electrónico	manuel.sastre@udc.es	
Profesorado	Barriada Pereira, José Luis Rodríguez Barro, Pilar Sastre De Vicente, Manuel Esteban	Correo electrónico	jose.barriada@udc.es pilar.rbarro@udc.es manuel.sastre@udc.es	
Web				
Descrición xeral	Disponer de una visión general de los métodos de cálculo de la concentración y distribución de las especies en disolución, de las interacciones presentes y de la relación existente entre espección, toxicidad y biodisponibilidad.			

Competencias da titulación	
Código	Competencias da titulación
A1	Coñecemento das realidades interdisciplinares da Química e do Medio Ambiente, dos temas punteiros nestas disciplinas e das perspectivas de futuro.
A3	Capacitar ao alumno para o desenvolvemento dun traballo de investigación nun campo da Química ou do Medio Ambiente, incluíndo os procesos de caracterización de materiais, o estudo das súas propiedades fisicoquímicas e biolóxicas e dos procesos que poden sufrir no medio natural.
A6	Coñecemento do comportamento de diferentes especies químicas e dos procesos aos que poden estar sometidas unha vez liberadas no medio ambiente, incluíndo as súas relacións entre distintos compartimentos ambientais.
A9	Coñecer algunhas aplicacións básicas da química computacional e dos programas de cálculo máis utilizados nos ámbitos da química e o medio ambiente.
A14	Coñecer as principais propiedades fisicoquímicas das augas naturais, relacionalas coa súa calidade e entender as principais tecnoloxías de tratamento de augas naturais.
B1	Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación.
B2	Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornas novas ou pouco coñecidas dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo.
B3	Que os estudantes sexan capaces de integrar coñecementos e enfrontarse á complexidade de formular xuízos a partir dunha información que, sendo incompleta ou limitada, inclúa reflexións sobre as responsabilidades sociais e éticas vinculadas á aplicación dos seus coñecementos e xuízos.
B4	Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades.
B6	Ser capaz de analizar datos e situacións, xestionar a información dispoñible e sintetizala, todo iso a un nivel especializado.
B8	Comprender, a un nivel especializado, as consecuencias do comportamento humano na contorna ambiental.

Resultados da aprendizaxe			
Competencias de materia (Resultados de aprendizaxe)			Competencias da titulación
Capacidad para identificar elementos contaminantes en un agua natural	AM3		
Calcular las concentraciones y/o actividades de las especies iónicas y moleculares en un agua natural	AM6	BM2	
Suministrar datos termodinámicos de utilidad en estudios de impacto ambiental de vertidos contaminantes sobre cursos de aguas	AM1	BM2	
	AM6	BM6	



Saber redactar un informe completo (introducción, antecedentes, parte experimental, descripción de resultados y su discusión, conclusiones y recomendaciones, bibliografía) sobre la contaminación por metales y otros contaminantes presentes en un medio acuático		BM1 BM4 BM6	
Extraer información relevante derivada de la lectura de artículos de investigación/divulgación sobre problemas reales asociados a la contaminación de aguas y/o a procesos de modelización en aguas naturales; sintetizar su contenido y enjuiciarlo de manera crítica	AM1 AM6 AM14	BM3 BM4	
Conocer la estructura de los programas de cálculo más utilizados en la resolución de problemas de especiación química y saber manejar al menos uno de ellos. Capacidad para aplicar las ecuaciones y procedimientos matemáticos necesarios para resolver el modelo que conduce a la composición de un agua en términos de especiación química	AM9	BM6	
Saber enjuiciar de manera crítica la relación existente entre especiación, biodisponibilidad y toxicidad mediante el uso de diferentes modelos.	AM9	BM8	

Contidos	
Temas	Subtemas
Tema 1. Modelización del equilibrio químico en aguas naturales	Composición mayoritaria de un agua natural. Planteamiento y resolución de problemas de equilibrio químico: metodología general. Balances de materia. Condición de neutralidad eléctrica.
Tema 2. Interacciones iónicas en aguas naturales	Modelos de interacción: asociación iónica versus interacción física. Modelos de coeficiente de actividad de amplio uso en Oceanografía , geoquímica etc. Modelos de complejación superficial.
Tema 3. Ejemplos: Equilibrios ácido-base, complejación, solubilidad y redox	Aplicación de la metodología general de cálculo de especiación al sistema CO <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> O/calcita. Reacciones redox y especiación. Otros ejemplos.
Tema 4. Especiación y toxicidad	El modelo de actividad del ión libre. El modelo del ligando biótico. El coeficiente de reparto octanol/agua. Otros modelos.

Planificación			
Metodoloxías / probas	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	9	22.5	31.5
Traballos tutelados	1	10	11
Seminario	2	5	7
Prácticas de laboratorio	14	0	14
Eventos científicos e/ou divulgativos	0	1.5	1.5
Proba mixta	2.5	7.5	10
Atención personalizada	0		0

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

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	Desarrollo en el aula de los contenidos de la materia.
Traballos tutelados	Lectura, análisis y discusión de artículos de investigación sobre modelización con énfasis en el ámbito del medio ambiente
Seminario	Resolución de algunos de los problemas propuestos donde se aclararán las posibles dudas que puedan surgir en los mismos.
Prácticas de laboratorio	Realización de cálculos de especiación de metales en agua mediante la utilización de programas de cálculo específicos, cuyo manejo será explicado al alumno.
Eventos científicos e/ou divulgativos	Actividades formativas complementarias tales como visita a un laboratorio de investigación, proyección de vídeos divulgativos, conferencias en la facultad o búsquedas temáticas en la red.
Proba mixta	Examen de los contenidos desarrollados



## Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Traballos tutelados Seminario	<p>Se recomenda a los alumnos el uso de tutorías individualizadas para resolver todas las dudas, cuestiones y conceptos que no hayan quedado claros referentes al desarrollo de los contenidos de la materia.</p> <p>Las prácticas (de laboratorio y del aula de informática) se realizarán con la presencia constante de los profesores de la materia que resolverán personalmente todas las dudas y problemas que puedan surgir a cada alumno.</p> <p>Horario oficial atención personalizada: martes y jueves de 10 a 13 h.</p> <p>En cualquier caso, a lo largo de la semana, el alumno puede consultar cuantas dudas le surjan en relación con la asignatura.</p>

## Avaliación

Metodoloxías	Descrición	Cualificación
Traballos tutelados	Exposición y entrega de un resumen corto de artículo/s asignado/s sobre modelización y cálculos de especiación.	5
Seminario	Entrega de uno de los problemas propuestos en clase.	5
Prácticas de laboratorio	Asistencia obligatoria a todas las prácticas en el aula de informática y entrega de un resumen de la labor realizada	20
Proba mixta	Examen de contenidos	70

## Observacións avaliación

--

## Fontes de información

Bibliografía básica	
Bibliografía complementaria	

## Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Materias que continúan o temario

## Observacións

Conocimientos  
previos: Licenciados/graduados en Ciencias y/o Ingeniería.

(\*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías