



| Guía docente | | | | |
|-----------------------|--|---------|--------------------|------------------------|
| Datos Identificativos | | | | 2016/17 |
| Asignatura (*) | Especiación Química y Computación | | Código | 610500015 |
| Titulación | Mestrado Universitario en Ciencias. Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012) | | | |
| Descritores | | | | |
| Ciclo | Periodo | Curso | Tipo | Créditos |
| Máster Oficial | 2º cuatrimestre | Primero | Optativa | 3 |
| Idioma | CastellanoGallego | | | |
| Modalidad docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química Física e Enxeñaría Química 1 | | | |
| Coordinador/a | Sastre De Vicente, Manuel Esteban | | Correo electrónico | manuel.sastre@udc.es |
| Profesorado | Barriada Pereira, José Luis | | Correo electrónico | jose.barriada@udc.es |
| | Sastre De Vicente, Manuel Esteban | | | manuel.sastre@udc.es |
| | Vilariño Barreiro, Maria Teresa | | | teresa.vilarino@udc.es |
| Web | | | | |
| Descripción general | 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 especiación, toxicidad y biodisponibilidad. | | | |

| Competencias del título | |
|-------------------------|---|
| Código | Competencias del título |
| A1 | Conocimiento de las realidades interdisciplinares de la Química y del Medio Ambiente, de los temas punteros en estas disciplinas y de las perspectivas de futuro. |
| A3 | Capacitar al alumno para el desarrollo de un trabajo de investigación en un campo de la Química o del Medio Ambiente, incluyendo los procesos de caracterización de materiales, el estudio de sus propiedades fisicoquímicas y biológicas y de los procesos que pueden sufrir en el medio natural. |
| A6 | Conocimiento del comportamiento de diferentes especies químicas y de los procesos a los que pueden estar sometidas una vez liberadas en el medio ambiente, incluyendo sus relaciones entre distintos compartimentos medioambientales. |
| A9 | Conocer algunas aplicaciones básicas de la química computacional y de los programas de cálculo más utilizados en los ámbitos de la química y el medio ambiente. |
| A10 | Relacionar la presencia de especies químicas en el medio natural con los conceptos de toxicidad y biodisponibilidad. |
| A14 | Conocer las principales propiedades fisicoquímicas de las aguas naturales, relacionarlas con su calidad y entender las principales tecnologías de tratamiento de aguas naturales. |
| B1 | 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 | 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 | 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 | 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. |
| B6 | Ser capaz de analizar datos y situaciones, gestionar la información disponible y sintetizarla, todo ello a un nivel especializado. |
| B8 | Comprender, a un nivel especializado, las consecuencias del comportamiento humano en el entorno medioambiental. |
| C2 | Ser capaz de mantener un pensamiento crítico dentro de un compromiso ético y en el marco de la cultura de la calidad. |
| C3 | Ser capaz de adaptarse a situaciones nuevas, mostrando creatividad, iniciativa, espíritu emprendedor y capacidad de liderazgo. |
| C4 | Expresarse correctamente, tanto de forma oral como escrita, en las lenguas oficiales de la comunidad autónoma. |
| C5 | Dominar la expresión y la comprensión de forma oral y escrita de un idioma extranjero. |
| C6 | Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida. |



| | |
|-----|---|
| C9 | Valorar críticamente el conocimiento, la tecnología y la información disponible para resolver los problemas con los que deben enfrentarse. |
| C11 | Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad. |

| Resultados de aprendizaje | | | |
|---|-------------------------|-------------------|---|
| Resultados de aprendizaje | Competencias del título | | |
| 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 AM6 | BM2 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 | CM4 |
| 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 | CM2 CM3 CM5 CM6 CM9 CM11 |
| 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 AM10 | BM8 | |

| Contenidos | |
|---|--|
| Tema | Subtema |
| 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 ₂ /H ₂ 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 | | | | |
|--------------------------------------|-------------------------|--------------------|--|---------------|
| Metodologías / pruebas | Competencias | Horas presenciales | Horas no presenciales / trabajo autónomo | Horas totales |
| Sesión magistral | A1 A6 A10 A14 | 7 | 21 | 28 |
| Trabajos tutelados | A3 B1 B3 B4 B6 C4 C5 | 1 | 14 | 15 |
| Seminario | A9 C6 | 2 | 7 | 9 |
| Prácticas de laboratorio | B2 C3 C9 C11 | 11 | 0 | 11 |
| Eventos científicos y/o divulgativos | B8 C2 | 0 | 2 | 2 |



| | | | | |
|------------------------|--------|-----|-----|----|
| Prueba mixta | A6 A14 | 2.5 | 7.5 | 10 |
| Atención personalizada | | 0 | | 0 |

(*) Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos

| Metodologías | |
|--------------------------------------|---|
| Metodologías | Descripción |
| Sesión magistral | Desarrollo en el aula de los contenidos de la materia. |
| Trabajos 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 y/o 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. |
| Prueba mixta | Examen de los contenidos desarrollados |

| Atención personalizada | |
|---|--|
| Metodologías | Descripción |
| Trabajos tutelados Seminario Prácticas de laboratorio | <p>Se recomienda 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> |

| Evaluación | | | |
|--------------------------|-------------------------|---|--------------|
| Metodologías | Competencias | Descripción | Calificación |
| Trabajos tutelados | A3 B1 B3 B4 B6 C4 C5 | Exposición y entrega de un resumen corto de artículo/s asignado/s sobre modelización y cálculos de especiación. | 5 |
| Seminario | A9 C6 | Entrega de uno de los problemas propuestos en clase. | 5 |
| Prácticas de laboratorio | B2 C3 C9 C11 | Asistencia obligatoria a todas las prácticas en el aula de informática y entrega de un resumen de la labor realizada. | 20 |
| Prueba mixta | A6 A14 | Examen de contenidos. | 70 |

| Observaciones evaluación |
|--------------------------|
| |

| Fuentes de información | |
|------------------------|--|
| Básica | A.M.URE,C.M.DAVIDSON eds. Chemical Speciation in the Environment. 2ª ed. Blackwell 2002 A TESSIER,D.R.TURNER eds. Metal Speciation and bioavailability in Aquatic Systems. IUPAC Series on Analytical, Physical Chemistry and Environmental Systems. Vol. 23. Wiley 1995.FRANCOIS M.M. MOREL; JANET G. HERING (1993). Principles and Applications of Aquatic Chemistry. John Wiley & Sons, New York STUMM, W. & MORGAN, J.J (1996). Aquatic Chemistry. John Wiley & Sons. |
| Complementaria | |



| Recomendaciones |
|---|
| Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente |
| Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente |
| Asignaturas que continúan el temario |
| Otros comentarios |

Conocimientos

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

(*) 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