



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|---|----------|--------------------|--|
| Datos Identificativos | | | | 2019/20 |
| Asignatura (*) | Especiación 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 | | | |
| Modalidade docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química | | | |
| Coordinación | Sastre De Vicente, Manuel Esteban | | Correo electrónico | manuel.sastre@udc.es |
| Profesorado | Barriada Pereira, José Luis Sastre De Vicente, Manuel Esteban Vilariño Barreiro, Maria Teresa | | Correo electrónico | jose.barriada@udc.es manuel.sastre@udc.es teresa.vilarino@udc.es |
| Web | | | | |
| Descrición xeral | Dispor dunha visión xeral dos métodos de cálculo da concentración e distribución das especies en disolución, das interaccións presentes e da relación existente entre especiación, toxicidade e biodisponibilidade. | | | |

| Competencias / Resultados do título | |
|-------------------------------------|--|
| Código | Competencias / Resultados do título |
| 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. |
| A10 | Relacionar a presenza de especies químicas no medio natural cos conceptos de toxicidade e biodisponibilidade. |
| 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. |
| C2 | Ser capaz de manter un pensamento crítico dentro dun compromiso ético e no marco da cultura da calidade. |
| C3 | Ser capaz de adaptarse a situacións novas, mostrando creatividade, iniciativa, espírito emprendedor e capacidade de liderado. |
| C4 | Expresarse correctamente, tanto de forma oral coma escrita, nas linguas oficiais da comunidade autónoma. |
| C5 | Dominar a expresión e a comprensión de forma oral e escrita dun idioma estranxeiro. |
| C6 | Utilizar as ferramentas básicas das tecnoloxías da información e as comunicacións (TIC) necesarias para o exercicio da súa profesión e para a aprendizaxe ao longo da súa vida. |



| | |
|-----|---|
| C9 | Valorar criticamente o coñecemento, a tecnoloxía e a información dispoñible para resolver os problemas cos que deben afrontarse. |
| C11 | Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade. |

| Resultados da aprendizaxe | | | |
|--|-------------------------------------|-------------------|---|
| Resultados de aprendizaxe | Competencias / Resultados do título | | |
| Capacidade para identificar elementos contaminantes nunha auga natural | AM3 | | |
| Calcular as concentracións e/ou actividades das especies iónicas e moleculares nunha auga natural | AM6 | BM2 | |
| Suministrar datos termodinámicos de utilidade en estudos de impacto ambiental de vertidos contaminantes sobre cursos de augas | AM1 AM6 | BM2 BM6 | |
| Saber redactar un informe completo (introducción, antecedentes, parte experimental, descripción de resultados e a súa discusión, conclusións e recomendacións, bibliografía) sobre a contaminación por metais e outros contaminantes presentes nun medio acuático | | BM1 BM4 BM6 | CM4 |
| Extraer información relevante derivada da lectura de artigos de investigación/divulgación sobre problemas reais asociados á contaminación de augas e/ou a procesos de modelización en augas naturais; sintetizar o seu contido e xulgallo de maneira crítica | AM1 AM6 AM14 | BM3 BM4 | CM2 CM3 CM5 CM6 CM9 CM11 |
| Coñecer a estrutura dos programas de cálculo máis utilizados na resolución de problemas de especiación química e saber manexar polo menos un deles. Capacidade para aplicar as ecuacións e procedementos matemáticos necesarios para resolver o modelo que conduce á composición dun auga en termos de especiación química | AM9 | BM6 | |
| Saber xulgar de maneira crítica a relación existente entre especiación, biodisponibilidade e toxicidade mediante o uso de diferentes modelos. | AM9 AM10 | BM8 | |

| Contidos | |
|--|--|
| Temas | Subtemas |
| Tema 1. Modelización do equilibrio químico en augas naturais | Composición maioritaria dunha auga natural. Plantexamento e resolución de problemas de equilibrio químico: metodoloxía xeral. Balances de materia. Condición de neutralidade eléctrica. |
| Tema 2. Interaccións iónicas en augas naturais | Modelos de interacción: asociación iónica versus interacción física. Modelos de coeficiente de actividade de amplo uso en Oceanografía, xeoquímica etc. Modelos de complexación superficial. |
| Tema 3. Exemplos: Equilibrios ácido-base, complexación, solubilidade e redox | Aplicación da metodoloxía xeral de cálculo de especiación ao sistema CO ₂ /H ₂ O/calcita. Reaccións redox e especiación. Outros exemplos. |
| Tema 4. Especiación e toxicidade | O modelo de actividade do ión libre. O modelo do ligando biótico. O coeficiente de reparto octanol/auga. Outros modelos. |

| Planificación | | | | |
|---------------------------------------|---------------------------|---|-------------------------|--------------|
| Metodoloxías / probas | Competencias / Resultados | Horas lectivas (presenciais e virtuais) | Horas traballo autónomo | Horas totais |
| Sesión maxistral | A1 A6 A10 A14 | 7 | 21 | 28 |
| Traballos 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 e/ou divulgativos | B8 C2 | 0 | 2 | 2 |
| Proba mixta | A6 A14 | 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 | Presentación na aula dos contidos da materia. |
| Traballos tutelados | Lectura, análise e discusión de artigos de investigación sobre modelización con énfasis no ámbito do medio ambiente |
| Seminario | Resolución de alguns dos problemas propostos onde se aclararán as posibles dúbidas que poidan xurdir nos mesmos. |
| Prácticas de laboratorio | Realización de cálculos de especiación de metais en auga mediante a utilización de programas de cálculo específicos, cuxo manexo será explicado ao alumno. |
| Eventos científicos e/ou divulgativos | Actividades formativas complementarias tales como visita a un laboratorio de investigación, proxección de vídeos divulgativos, conferencias na facultade ou búsquedas temáticas na rede. |
| Proba mixta | Examen dos contidos da materia |

| Atención personalizada | |
|--|--|
| Metodoloxías | Descrición |
| Traballos tutelados Seminario Prácticas de laboratorio | <p>Recoméndase aos alumnos o uso de titorías individualizadas para resolver todas as dúbidas, cuestións e conceptos que no quedasen claros referentes á presentación dos contidos da materia.</p> <p>As prácticas (de laboratorio e da aula de informática) realizaranse coa presenza constante dos profesores da materia que resolverán persoalmente todas as dúbidas e problemas que poidan xurdir a cada alumno.</p> <p>Horario oficial atención personalizada: martes e xoves de 10 a 13 h.</p> <p>En calquera caso, ao longo da semana, o alumno pode consultar cantas dúbidas lle xurdan en relación coa asignatura.</p> |

| Avaliación | | | |
|--------------------------|---------------------------|---|---------------|
| Metodoloxías | Competencias / Resultados | Descrición | Cualificación |
| Traballos tutelados | A3 B1 B3 B4 B6 C4 C5 | Exposición e entrega dun resumo corto de artigo/s asignado/s sobre modelización e cálculos de especiación. | 5 |
| Seminario | A9 C6 | Entrega dun dos problemas propostos en clase. | 5 |
| Prácticas de laboratorio | B2 C3 C9 C11 | Asistencia obrigatoria a todas as prácticas na aula de informática e entrega dun resumo da labor realizada. | 20 |
| Proba mixta | A6 A14 | Examen de contidos. | 70 |

| Observacións avaliación |
|-------------------------|
| |

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

| Recomendacións |
|----------------|
| |



| |
|---|
| Materias que se recomenda ter cursado previamente |
| |
| Materias que se recomenda cursar simultaneamente |
| |
| Materias que continúan o temario |
| |
| Observacións |
| Coñecementos previos: Licenciados/graduados en Ciencias e/ou Enxenaría. |

(*)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