



Guía Docente				
Datos Identificativos				2023/24
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	Barriada Pereira, José Luis	Correo electrónico	jose.barriada@udc.es	
Profesorado	Barriada Pereira, José Luis Sastre De Vicente, Manuel Esteban	Correo electrónico	jose.barriada@udc.es manuel.sastre@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 suizos.
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 enfrontarse.



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 algúns 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