



Guía Docente				
Datos Identificativos				2023/24
Asignatura (*)	Especiación Química e Computación		Código	610500015
Titulación				
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

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 xulgalo 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