



Guía docente				
Datos Identificativos				2022/23
Asignatura (*)	Especiación Química y Computación		Código	610500015
Titulación	Mestrado Universitario en Ciencias, Tecnoloxías e Xestión Ambiental (plan 2012)			
Descriptorios				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	2º cuatrimestre	Primero	Optativa	3
Idioma	CastellanoGallego			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
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 interdisciplinarias 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	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. 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. Horario oficial atención personalizada: martes y jueves de 10 a 13 h. En cualquier caso, a lo largo de la semana, el alumno puede consultar cuantas dudas le surjan en relación con la asignatura.

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 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.
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