

Curso de Posgrado
Doctorado en Ciencias Aplicadas
Mención Ambiente y Salud

Año 2022

Nombre del curso	Modelación hidrogeoquímica con PHREEQC. Procesos en equilibrio	
Docente responsable	Dr. Sebastian Dietrich	
Filiación	Instituto de Hidrología de Llanuras “Dr. Eduardo Jorge Usunoff” (CONICET – UNCPBA – CIC) - IHLLA	
Email	sebadietrich@ihlla.org.ar	
Equipo docente/colaborador		
	Dra. Elina Ceballos, IHLLA Dr. Jordi Cama, Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua – IDAEA (CSIC, España)	eceballos@ihlla.org.ar jordi.cama@idaea.csic.es
Cuatrimestre	Segundo cuatrimestre	
Fecha precisa de dictado	Tercera semana de septiembre de 2022	
Estructura del curso	5 clases diarias de 6 horas aproximadamente. 1 hora de ejercitación diaria asincrónica que se discutirá en la clase siguiente. 9 hs a 17 hs incluyendo break. 10 hs de un ejercicio de integración a entregar 10 días después de finalizado el curso.	
Modalidad de los encuentros sincrónicos	Híbrida (presencial y virtual simultánea)	
Dedicación sincrónica total (hs)	35	
Dedicación asincrónica total estimada (hs)	10 (ejercicio de integración)	
Dedicación total (hs)	45	
Modalidad	Dictado en aulas híbridas para dar la posibilidad que alumnos externos puedan tomarlo.	
Lugar de dictado	Instituto de Hidrología de Llanuras (Azul, Provincia de Buenos Aires), aula híbrida	
Incluye trabajo de campo/laboratorio	No	
Número mínimo/máximo de asistentes	5/45 asistentes (30 asistentes presenciales)	

	como máximo, 15 asistentes virtuales como máximo)
Mesa Examinadora	
Dr. Sebastian Dietrich	
Dra. Elina Ceballos Dr. Jordi Cama	

Conocimientos/formación previa requerida

Nociones básicas de química general e inorgánica.

Objetivos

Introducir a los estudiantes de doctorado en los principios básicos de la modelación geoquímica, con énfasis en el uso de PHREEQC, como herramienta de cálculo y simulación

Motivar a los participantes a llevar adelante ejercicios simples incluyendo cálculos básicos, creación de gráficos e interpretaciones preliminares basadas en datos extraídos de artículos publicados, o generados en los proyectos en marcha, o bien, traídos por los participantes. Presentación de casos de estudio si fuese apropiado.

Programa/contenidos

- 1- Hidrogeología general. Conceptos básicos.
- 2- Introducción a los modelos geoquímicos.
- 3- Nociones de termodinámica. Termodinámica de soluciones. Ejercicios
- 4- Introducción a PHREEQC. Bases de datos termodinámicas
- 5- Equilibrio ácido-base. Cálculos con PHREEQC
- 6- Cálculo de procesos geoquímicos. Ejercicios
- 7- Mezclas conservativas. Ejercicios
- 8- Adsorción e intercambio catiónico. Ejercicios
- 9- Nociones de cinética química. Planteo con PHREEQC.

Modalidad de las clases

El curso consta de clases teóricas y clases prácticas. Durante las clases teóricas se introducirán conceptos y se presentarán ejemplos. En las clases prácticas los estudiantes resolverán ejercicios utilizando el software PHREEQC, para familiarizarse con el código. Unos días antes de iniciar el curso, se brindarán instrucciones para la instalación del software.

Criterios y modalidades de evaluación

La evaluación del curso consistirá en la resolución de un ejercicio de integración en el que los participantes podrán sus propios datos. El mismo se hará entrega 10 días corridos después de finalizado el curso. La entrega de este trabajo y el cumplimiento de los objetivos mínimos, será condición *sine qua non* para la aprobación del curso.

Bibliografía

Lecturas obligatorias



- Appelo, C. A. J., & Postma, D. (2007) *Geochemistry, groundwater and pollution*. CRC Press, pp seleccionadas.
- Anderson, G., & Crerar, D., (1993) *Thermodynamics in Geochemistry. The Equilibrium Model*. Oxford University Press, pp seleccionadas.
- Langmuir, D. (1997) *Aqueous Environmental Geochemistry*. Prentice Hall, pp seleccionadas.

Infraestructura/medios requeridos

- Aula con proyector y pizarrón – IHLLA (Azul)
- Equipamiento informático con acceso a internet – IHLLA (Azul)
- Estudiantes con equipos portátiles. Traer alargues zapatillas.