



GUÍA DOCENTE

SJH001 - Conceptos Básicos en Química Sostenible

Curso académico 2020/2021

Titulación: Máster Universitario en Química Sostenible (Plan de 2020)

1. Información general de la asignatura

Departamento: Dep. de Química Inorgánica y Orgánica

Área de conocimiento: Química Orgánica

Carácter: Optativa

Semestre: Anual

Créditos: 3

Idiomas en los que se imparte la asignatura: Castellano

Profesor responsable: María Isabel Burguete Azcárate

Para consultar el listado de profesores que imparte la asignatura hay que consultar el [SIA](#).

Horarios: Consultar apartado de horarios en la [web del estudio](#)

2. Justificación

La asignatura se considera fundamental dentro del programa del Máster de Química Sostenible, puesto que dicha asignatura recoge de forma clara y concisa los Principios de la Química e Ingeniería Sostenible, así como su evolución histórica. Igualmente podemos señalar que interacciona con el resto de las asignaturas del master

3. Conocimientos previos recomendables

Los indicados para ser admitido en el Master de Química Sostenible: equivalente a estudios de Grado en Química, Ingeniería Química u otras titulaciones afines.

4. Competencias y resultados de aprendizaje

Competencias genéricas y específicas

CB10 - Que los estudiantes posean habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CB6 - 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.

CB7 - 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.

CB8 - 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.

CB9 - 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.

CG01 - Conocer los principios de la química e ingeniería sostenibles y tener una visión de los avances históricos que han dado lugar al desarrollo de la química verde y otros principios asociados así como los protocolos que permiten su evaluación y aplicación en casos reales.

E2 - Demostrar las ventajas y desventajas de cada una de las denominadas tecnologías sostenibles en el

campo de la Química.

E3 - Relacionar la toxicidad/peligro como una propiedad física/estructural que puede ser diseñada y manipulada.

E4 - Valorar adecuadamente ejemplos de procesos industriales donde se cumplen los principios de la química sostenible.

E5 - Utilizar las tendencias actuales de la Química Verde para poder realizar un análisis crítico sobre el grado de cumplimiento de los postulados de la Química Sostenible en un determinado proceso industrial.

G2 - Capacidad de organización, comprensión, análisis y síntesis oral y escrita en el ámbito de la química sostenible en la investigación y los procesos industriales.

G3 - Aplicar las herramientas de la química sostenible en la obtención de compuestos de interés en la industria química.

G4 - Participar en proyectos encaminados a la mejora de procesos productivos o de manipulación de productos químicos.

Resultados de aprendizaje

CB_01_Manejar con soltura la metodología empleada para la estimación de los riesgos y reducción de la generación de residuos.

CB_02_Conocer las técnicas de activación selectiva, propiedades de los disolventes, toxicidad de los productos químicos, métodos catalíticos y biocatalíticos.

CB_03_Evaluar las diversas técnicas para la reducción de la generación de residuos y de riesgos

CB_04_Conocer los principios de la química e ingeniería sostenible y tener una visión general de los avances históricos que han dado lugar a su descubrimiento así como a descubrimientos asociados

CB_05_Aprender a integrar los principios teóricos de la sostenibilidad en un caso experimental concreto

CB_06_Saber buscar, seleccionar y valorar la información

5. Contenidos

- 1.- Química, medio ambiente y sostenibilidad
- 2.- Principios de la química verde e ingeniería verde
- 3.- Economía Atómica
- 4.- Métricas
- 5.- Desarrollo de Reacciones/Procesos Verdes
- 6.- Desarrollo de Productos Químicos más seguros
- 7.- Análisis de ciclo de vida; LCA una herramienta para el desarrollo sostenible

6. Temario

Tema 1. Química, medio ambiente y sostenibilidad.

1. Percepción de la química:
 - Química: dos caras de una moneda.
 - La imagen negativa de la química.
2. La química y el entorno, el efecto de los productos químicos sobre los humanos y el medio ambiente:
 - Persistencia, bioacumulación, toxicidad, dosis, exposición de las sustancias químicas

- Efectos en el medio ambiente: eutrofización, contaminación del agua aire, lluvia ácida, etc.
 - La huella de carbono.
 - El problema de los residuos.
 - Legislación medioambiental.
3. “End of the pipe solutions” remediación como una solución a los problemas medioambientales.
- La regla de las 3R (reducir, reutilizar, reciclar)
4. ¿Es el modelo actual sostenible? Necesidad de un cambio de paradigma.
- Incremento de la población y el consumo.
 - Modelo basado en la explotación de recursos limitados.
 - Definición de sostenibilidad.
5. La química verde. Cambio de paradigma en la química para alcanzar la sostenibilidad.
- Definición de química verde.
 - Evitar/sustituir en lugar de remediar.
 - Hitos más relevantes en el desarrollo de la química verde.
 - Necesidad de métricas para evaluar cuán sostenible es un proceso.
 - El concepto “Cradle to cradle” vs. “Cradle to grave”.
 - Ejemplos de Iniciativas de química verde o de sostenibilidad.
 - Iniciativas institucionales para el desarrollo de la química verde.
 - Educación y química verde
 - Diseminación de la química verde: premios, revistas, conferencias, etc.
 - Química Verde

Tema 2. Los principios de la química verde.

- 2.1. Introducción: definición de química e ingeniería verdes, aproximación histórica a los problemas medioambientales, caracterización de los problemas medioambientales, relación medio ambiente y sostenibilidad económica.
- 2.2. Desarrollos y ejemplos de los principios generales de la química verde.
- 2.3. Desarrollos y ejemplos de los principios generales de la ingeniería verde. Sostenibilidad.

Tema 3. Economía atómica.

- 3.1. ¿Son las reacciones Químicas Sostenibles?
- Concepto de economía atómica.
 - Concepto del factor E y su relación con la producción de los distintos productos químicos.
 - Concepto del factor QE.
 - Definición y cálculo. Estudio de los tipos de reacciones orgánicas desde el punto de vista del concepto de la economía atómica.

Tema 4. Métricas en la química sostenible.

- 4.1. Introducción: Métodos para evaluar la sostenibilidad o cuán verde es una reacción/proceso o producto.
- 4.2. Métricas comunes para una reacción/proceso química
- Factor E.
 - Economía atómica.
 - Eficiencia atómica.
 - Eficiencia de carbono.

- Rendimiento másico efectivo.
- Intensidad másica.
- Eficiencia másica de reacción.
- La regla de oro de la química verde.

4.3. Otras consideraciones para realizar métricas de un proceso o producto.

- Consideraciones energéticas: intensidad energética, huella de carbono
- Consideraciones socioeconómicas: análisis de ciclo de vida.

4.4. Herramientas para realizar métricas de un proceso/producto.

- Ecoescole.
- The waste reduction (WAR) algorithm
- Green Metrics: Green Chemistry Expert System (GCES)
- The ecoinnovation compass
- Atómica.

Tema 5. Desarrollo de reacciones/procesos verdes.

5.1 Optimización de los procesos:

- Incrementar la economía atómica.
- Reducción de disolventes.
- Reducción del consumo de energía.
- Análisis in situ.
- Seguridad.

5.2. Ejemplos de desarrollo de reacciones procesos verdes.

5.3. Intensificación de procesos. Miniaturización y procesos en flujo.

Tema 6. Desarrollo de productos químicos más seguros.

6.1. Toxicidad: diseño de compuestos químicos más seguros (verdes/sostenibles).

6.2. Relaciones estructura propiedad (toxicidad).

- QSARs
- Aproximaciones in-silico.
- Topología molecular

6.3. Ejemplos del desarrollo de compuestos más seguros.

- ¿Es la nanotecnología verde?
- ¿Son los líquidos iónicos verdes?
- Desarrollo de compuesto con toxicidad acuática reducida.
- Desarrollo de compuestos con baja bioacumulacion.
- Etc.

Tema 7. Análisis de ciclo de vida. (Live cycle assesment, LCA) una herramienta para el desarrollo sostenible.

7.1. ¿Qué es el análisis de ciclo de vida?

- Orígenes

- Puntos fuertes: una herramienta para medir el impacto sobre el medio ambiente
- Puntos débiles: complejidad y subjetividad
- Evaluación de riesgos ambientales
- Gestión de riesgos para el ambiente
- Análisis de riesgo comparativo
- Análisis del impacto socioeconómico

7.2. Ejemplos de LCA

- Nuevos combustibles: biocombustibles.
- Nuevos disolventes: líquidos iónicos.
- Etc.

7. Bibliografía

7.1. Bibliografía básica

- 1 P.T.Anastas, J.C.Warner, *Green Chemistry: Theory and Practice*, Oxford University Press, Oxford, **1998**
- 2 P.T.Anastas, T.C.Williams, Editores, *Green Chemistry: Frontiers in Benign Chemical Syntheses and Processes*, Oxford University Press, **1998**
- 3 J.Clark, D.Macquarrie, *Handbook of Green Chemistry and Technology*, Blackwell Publishing, Oxford, **2002**
- 4 M. Lancaster, *Green Chemistry. An Introductory Text*, Royal Society of Chemistry, Cambridge, **2002**
- 5 P.T.Anastas, M.M.Kirchoff, *Acc.Chem.Res.*, **2002**, 35, 686
- 6 R.Mestres, *Anales de Química*, **2003**, 99, 58-65
- 7 R.Mestres, *Green Chemistry*, **2004**, 6, G10-G12
- 8 R.Mestres, *Environ.Sci.&Pollut.Res.*, **2005**, 12, 128-132
- 9 X.Domènech, *Química Verda*, Rubes, Barcelona, **2005**
- 10 P.T.Anastas, J.B.Zimmerman, *Environmental Science&Tecnology*, **2003**, March 1, 94A
- 11 C.Ramshaw, *Green Chemistry*, **1999**, 1, G15

7.2. Bibliografía complementaria

- 1.- J.Clark, D.Macquarrie, *Handbook of Green Chemistry and Technology*, Blackwell Publishing, Oxford, **2002**
- 2.- M. Lancaster, *Green Chemistry. An Introductory Text*, Royal Society of Chemistry, Cambridge, **2002**
- 3.- P.T.Anastas, M.M.Kirchoff, *Acc.Chem.Res.*, **2002**, 35, 686
- 4.- R.Mestres, *Anales de Química*, **2003**, 99, 58-65
- 5.- R.Mestres, *Green Chemistry*, **2004**, 6, G10-G12
- 6.- R.Mestres, *Environ.Sci.&Pollut.Res.*, **2005**, 12, 128-132

- 7.- X.Domènech, *Química Verda*, Rubes, Barcelona, **2005**
- 9.- P.T.Anastas, J.B.Zimmerman, *Environmental Science&Tecnology*, **2003**, March 1, 94A
- 10.- C.Ramshaw, *Green Chemistry*, **1999**, *1*, G15

7.3. Direcciones web de interés

www.suschem.org

www.redqs.org

www.masterquimicasostenible.uji.es

www.quimicasostenible.uji.es

7.4. Otros recursos

8. Metodología didáctica

Aprendizaje presencial (30 horas):

Sesiones teóricas: 18 horas presenciales donde se explicarán los aspectos más generales de la asignatura a través de clases expositivas promoviendo la participación del estudiante (se incluirán debates y puestas en común), que formarán parte de la evaluación

Sesiones de prácticas (problemas): 2 horas presenciales donde se harán y evaluarán ejercicios prácticos sobre la forma de llevar a cabo un determinado proceso. Hojas a disposición del alumno en el aula virtual

Tutorías grupales: 7 horas presenciales que se reforzarán con el uso del aula virtual y sistemas de comunicación electrónica. La asistencia y participación formarán parte de la evaluación

Evaluación: 3 hora presencial de pruebas escritas

Aprendizaje no presencial (45 horas):

- Búsqueda bibliográfica: 10 horas no presenciales relacionadas con la materia impartida que ayudarán al estudiante a conseguir una mejor comprensión de la asignatura

- Lecturas de material: 10 horas no presenciales con las que el estudiante trabajará la bibliografía aconsejada por el profesor sobre las publicaciones más recientes relacionadas con la asignatura

- Elaboración de un trabajo: 15 horas no presenciales . Este trabajo formará parte de la evaluación. La elaboración del mismo seguirá las pautas indicadas por el profesor de la asignatura

- Estudio individual: 10 horas no presenciales para entender el material proporcionado en clase y poder preparar las distintas pruebas que forman parte de la evaluación

9. Planificación de actividades

Actividades	Horas presenciales	Horas no presenciales
Enseñanzas teóricas	18	0
Enseñanzas prácticas (problemas)	2	0
Tutorías	7	0
Evaluación	3	0
Trabajo personal	0	35
Trabajo de preparación de los exámenes	0	10
	30	45
Horas totales (núm. créditos * 25)	75	

10. Sistema de evaluación

10.1. Tipo de prueba

Tipo de prueba	Ponderación
Participación en clase	10
Pruebas escritas	40
Trabajos	50
	100

10.2. Criterios de superación de la asignatura

A) Se deberá obtener una nota mínima de 5 sobre 10 en cada una de las pruebas para superarlas.

Si no se supera alguna de las pruebas en la segunda convocatoria se examinará solo de la prueba no superada.

B) Presentarse a todas las pruebas (presentar los trabajos y realizar las pruebas escritas)

11. Otra información

Profesorado que imparte la asignatura:

Eduardo García Verdugo (UJI)

María González (UVEG)

Isabel Burguete (UJI)

12. Software específico

13. Privacidad y tratamiento de datos personales

Las actividades académicas que comporten un tratamiento de datos de personas identificadas o identificables están sometidas a lo previsto en el Reglamento General de Protección de Datos UE 2016/679, de 27 de abril (RGPD) y en la Ley Orgánica 3/2018, de 5 de diciembre, de Protección de Datos Personales y garantía de los derechos digitales (LOPDGDD) además de la legislación vigente específica.

En los espacios docentes físicos y virtuales de la universidad, con carácter general, en ningún caso se podrán realizar actividades que traten datos personales, incluyendo grabaciones, sin el consentimiento expreso previo y libre de las personas afectadas.

No se podrán realizar actividades que conlleven acceso a recursos externos a los medios de la UJI, en Internet u online, que obliguen a los estudiantes a dar sus datos personales o el consentimiento expreso. Se utilizarán exclusivamente datos anónimos.

Este anonimato debe garantizarse en todas las fases del tratamiento. Sólo en el caso de que la información se haya sometido a un procedimiento de disociación, de modo que la información que se obtenga no pueda asociarse a persona identificada o identificable, se estará cumpliendo con la normativa vigente.

Si, excepcionalmente y de manera justificada, a criterio del responsable de la actividad se tratan datos de personas identificadas o identificables, el responsable de la actividad deberá inscribirla en el registro oficial de actividades de tratamiento de la UJI (RAT) y obtener la autorización de la Secretaría General; así mismo elaborará la información que hay que ofrecer a los usuarios, aplicará las medidas de seguridad necesarias y proporcionará la información requerida durante los procesos de auditoría, tomando, en su caso, las medidas correctoras que estas auditorías aconsejen.

Vicerrectorado de Estudios y Docencia