



GUÍA DOCENTE

SJH009 - Disolventes Benignos

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: Consultar [SIA](#)

Profesor responsable: Eduardo García-Verdugo Cepeda

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 pretende aportar al alumno conocimientos básicos sobre el diseño y uso de disolventes sostenibles/verdes o alternativos a los disolventes convencionales, haciendo especial énfasis en la sustitución de disolventes problemáticos desde el punto de vista medioambiental como es el caso de los disolventes orgánicos volátiles (DOV). Es por tanto una asignatura transversal que se relaciona con todas las otras del máster y que permite al alumno tener una visión global de la contribución de los disolventes benignos para minimizar los impactos negativos de la generación de residuos y productos no deseados en la industria química.

En concreto, se describirá en detalle la problemática, desde el punto de vista medioambiental, del empleo de disolventes orgánicos convencionales a nivel industrial, especialmente en la Química Farmacéutica donde actualmente existe una problemática mucho más relevante desde el punto de vista medioambiental que en otras áreas.

Finalmente, se estudiarán las alternativas propuestas existentes para maximizar la reducción, reusó y reciclado de los disolventes, así como las nuevas tendencias en el uso y diseño de disolventes benignos como el agua, los líquidos iónicos, los disolventes fluorados, los fluidos supercríticos, etc.

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.

E1 - Aplicar los principios de la química sostenible a la implementación en la práctica de los procesos químicos industriales.

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.

G1 - Integrar los principios teóricos de la sostenibilidad en un caso experimental concreto.

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

DB_01_ Conocer las propiedades físico-químicas y biológicas de los disolventes fluorados.

DB_02_ Conocer las propiedades físico-químicas y biológicas de los líquidos Iónicos.

DB_03_ Conocer la Toxicidad y Cuestiones Ambientales de los disolventes empleados actualmente.

DB_04_ Conocer el medio acuoso como disolvente.

DB_05_ Analizar y resumir la información.

DB_06_ Saber buscar, seleccionar y valorar la información.

DB_07_ Saber comunicarse de forma oral y escrita correctamente.

DB_08_ Planificar y conducir su propio aprendizaje.

DB_09_ Definir el concepto de Química Sostenible y entroncarlo en un ámbito histórico y relacionarlo con el desarrollo de la misma y de otros descubrimientos asociados.

DB_10_ Conocer los principios de la Química Sostenible y definir su implementación en la práctica de los procesos Químicos Industriales.

DB_11_ Definir las herramientas de la química sostenible en el campo de los disolventes benignos.

G7- Ser capaz de definir las herramientas de la Química Sostenible en el campo de los disolventes benignos.

5. Contenidos

Definición de disolventes y sus características: presión cohesiva, parámetros de solubilidad de Hildebrand, constante dieléctrica, índice de refracción, etc.

Características y empleo en procesos químicos de disolventes benignos como agua, líquidos iónicos, fluidos supercríticos, disolventes fluorados, etc.

6. Temario

Tema 1.-Introducción.

- 1.1. ¿Qué es un disolvente? ¿Por qué necesitamos disolventes?.
- 1.2. Disolventes y residuos.
 - § NMVOCs (Non Methane Volatile Organic Compounds).
 - § Restricciones en el uso y aplicación de disolventes.
 - § Clasificación.
- 1.3. Aplicación de los disolventes.
- 1.4. ¿Qué podemos hacer?.
 - § Reducción/Reuso/Reciclado.
 - § Diseño y uso de disolventes alternativos.

Tema 2.- Propiedades fundamentales de los disolventes. Solubilidad.

- 2.1. Solubilidad.
 - § Interacciones dipolo-dipolo.
 - § Interacciones de Wan der Waals.
 - § Puentes de hidrogeno
- 2.2. Propiedades de los disolventes.
 - § Presión cohesiva. Parámetros de solubilidad de Hildreband.
 - § Constante dieléctrica.
 - § Índice de refracción.
 - § Momento dipolar.
 - § Numero dador.
 - § Numero Aceptor.
 - § Parámetro Solvatocrómico de Dimroth-Reichardt: E_T^N
 - § Parámetros solvatocrómicos de Kamlet-Taft.
 - § Disolventes duros y blandos.

2.3. Clasificación de los disolventes: dipolares próticos, dipolares apróticos y apolares.

Tema 3.- Toxicidad y disolvente.

3.1. Introducción.

3.2. Toxicocinética de los disolventes.

3.3. Características comunes de los disolventes tóxicos.

§ Efectos Hepáticos.

§ Toxicidad renal.

§ Neurotoxicidad.

3.4. Hidrocarburos clorados.

3.5. Metanol.

3.6. Acetona.

Tema 4.- El agua como disolvente.

4.1. Ventajas e inconvenientes del empleo de agua como disolvente.

4.2. El efecto hidrofóbico.

4.3. Sistemas bifásicos.

§ Reacciones con agua (“on water”).

§ Empleo de agentes transferentes de fase.

§ Catalizadores de transferencia de fase .

§ Micelas.

§ Micelas reversas.

§ Empleo de ligandos y catalizadores solubles en agua.

4.4. Sales de lantano catalizadores estables en agua.

4.5. Catalizadores organometálicos estables en agua.

4.6. Organocatálisis.

4.7. Procesos Industriales empleando agua como disolvente.

Tema 5.- Líquidos Iónicos (LIs).

5.1. ¿Qué son los LIs?

5.2. Propiedades químico-físicas de los LIs.

- § Conductividad.
- § Estabilidad a la hidrólisis.
- § Estabilidad térmica.
- § Solido vs líquido.
- § Polaridad.
- § Miscibilidad.
- § Solubilidad de gases.
- § Viscosidad.
- § Etc.

5.3. ¿son los LIs disolventes verdes/sostenibles? Toxicidad/biodegradabilidad de los LIs.

5.4. Síntesis y Aplicaciones de los LIs.

Tema 6.- Disolventes fluorados.

6.1. ¿Qué son los disolventes fluorados?.

6.2. Purificación y aislamiento empleando compuestos fluorados.

- § Fluorous Solid Phase extraction (F-SPE).

- § Fluorous Tags.

6.3. Sistemas bifásicos.

6.4. Sistemas termosensibles.

6.5. Sistemas trifásicos.

6.6. Aplicaciones en Química Combinatoria.

Tema 7.- Fluidos supercríticos.

7.1. Introducción.

7.2. ¿Qué es un fluido supercrítico?.

- § Definición.

- § Propiedades.

7.3. Dióxidos de carbono supercríticos

- § ¿Por qué el empleo del CO₂?

- § Ventajas y desventajas del empleo de scCO₂.

7.4. Aplicaciones y ejemplos y del scCO₂

- § Extracción supercrítica.
- § “cleaning”
- § Co-disolvente en pinturas.
- § Procesado y modificación de principios activos.

7.5. Procesos Químicos empleando scCO₂

- § Hidrogenación.
- § Hidroformilación
- § Biocatálisis.
- § Alquilaciones
- § Oxidación.

7.6. Síntesis modificación y procesado de polímeros en scCO₂.

7.7. Alcoholes supercríticos (scMeOH).

7.8. Procesos en scH₂O.

- § Oxidación total.
- § Oxidaciones selectivas
- § Reacciones catalizadas por el agua supercrítica.
- § Biomasa y el agua supercrítica.
- § Síntesis de nanopartículas en scH₂O.

Tema 8.- Otros disolventes alternativos.

8.1. “Smart solvents” disolventes inteligentes.

- § Definición.
- § Propiedades.

8.2. Sistemas bifásicos-monofásicos disolventes fluorado/orgánico regulados por la presencia de CO₂.

8.3. Sistemas bifásicos-monofásicos orgánico/agua ajustables (Organic-Aqueous Tuneable Solvents (OATS)).

8.4. Polímeros líquidos como disolventes.

8.5. Empleo de LIs reversibles.

8.6. Disolventes de hidrofiliabilidad regulable (Switchable Hydrophilicity Solvents (SHS)).

- 8.7. Disolventes expandidos por gases (CO₂-expanded solvents).
- 8.9. Empleo de la Sulfona de piperileno (PS) como disolvente.
- 8.10 Empleo del Lactato de Etilo como disolvente.
- 8.11. Empleo de carbonatos orgánicos como disolventes.
- 8.11. El empleo del glicerol y sus derivados como disolventes.

7. Bibliografía

7.1. Bibliografía básica

- C. Reichardt, Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry, Wiley-CVH, 1988.
- G. Wypych, Editor, Handbook of Solvents, ChemTech Publishing, 2001.
- Mike Lancaster. Green Chemistry, an introductory text. RSC Paperbacks. Cambridge 2002.
- W. A: Nelson, Green Solvents for Chemistry: Perspectives and Practice. Oxford University Press, 2003.
- Peter Wasserscheid, Tom Welton Eds. Ionic Liquids in Synthesis, Wiley-VCH, Weinheim 2003.
- B. Cornils, W.A. Hermann Eds. Aqueous Phase Organometallic Catalysis- Concepts and Applications. Wiley- VCH Weinheim
- Ulf M. Lindström, Chem. Rev. 2002, 102, 2751- 2772.
- André Lubineau, Jacques Augé, Yves Queneau, Water-Promoted Organic Reactions, Synthesis 1994, 741-760

7.2. Bibliografía complementaria

7.3. Direcciones web de interés

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:

Santiago Luis (UJI)

Eduardo García Verdugo (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