

Ficha de Unidade Curricular LEQB – A3ES

1. Caracterização da Unidade Curricular.

- 1.1. Designação da unidade curricular (1.000 carateres).**
Química Verde e Engenharia / Green Chemistry and Engineering
- 1.2. Sigla da área científica em que se insere (100 carateres).**
CEE
- 1.3. Duração¹ (100 carateres).**
Semestral
- 1.4. Horas de trabalho² (100 carateres).**
81
- 1.5. Horas de contacto³ (100 carateres).**
Total: 45
T: 30; TP: 15
- 1.6. ECTS (100 carateres).**
3.0
- 1.7. Observações⁴ (1.000 carateres).**
Optativa
- 1.7. Remarks (1.000 characters).**
Elective

2. Docente responsável e respetiva carga letiva na Unidade Curricular (preencher o nome completo) (1.000 carateres).
Patrícia Alexandra Miranda David Barata (24 h)

3. Outros docentes e respetivas cargas letivas na unidade curricular (1.000 carateres).
José Valério N. Palmeira (21 h)

4. Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes) (1.000 carateres).

Após a aprovação na unidade curricular, o estudante deverá possuir a capacidade de:

1. Compreender a necessidade do desenvolvimento de transformações químicas e processos químicos mais verdes e integrados, como parte das ferramentas a utilizar na implementação da sustentabilidade através da inovação.
2. Identificar e compreender os problemas de ambiente, saúde e segurança mais comuns no âmbito da sustentabilidade no domínio da química verde e engenharia verde (QV&EV).
3. Analisar e avaliar materiais (solventes, reagentes, catalisadores) e condições reacionais alternativas assentes nos princípios e nas métricas da QV&EV.
4. Calcular balanços de massa e energia e aplicá-los como ferramenta no incremento da "verdura" dos processos (operações unitárias de reação e separação).
5. Usar conceitos de integração de massa, energia e segurança inerente na conceção de processos químicos mais sustentáveis.
6. Aplicar metodologias de ciclo-de-vida elementares na avaliação de processos.

4. Intended learning outcomes (knowledge, skills, and competences to be developed by the students) (1.000 characters).

Upon approval, the student should be able to:

1. Understand the need for the development of greener chemistries and chemical processes through an

integrated approach, as part of the tools used to drive sustainability through innovation.

2. Identify and understand the most common environmental, health and safety issues when considering what is more sustainable in the realm of green chemistry and green engineering (GC&GE).
3. Analyze and evaluate alternative materials (solvents, reagents, catalysts) and reaction conditions based on GC&GE principles and metrics.
4. Calculate mass and energy balances and apply them as a tool for "greenness" improvement (unit operations of reaction and separations).
5. Use concepts of mass and energy integration and inherently safety to design more sustainable chemical processes.
6. Apply elemental life-cycle methodology to assess processes.

5. Conteúdos programáticos (1.000 carateres).

Parte I

1. Química Verde, Engenharia Verde e Sustentabilidade.
2. Princípios da Química Verde e da Engenharia Verde. Métricas.
3. Conceção de Sínteses Químicas mais Verdes e Seguras. Seleção de Solventes, Catalisadores.
4. Reagentes e Condições de Reação. Fontes de Matéria-Prima Renováveis. Ambiente, Saúde e Riscos de Segurança.
5. Biocatálise e Bioprocessos em Química Verde e Engenharia.

Parte II

6. Conceção de Processos de Produção mais Verdes, Seguros e mais Sustentáveis. Quantificação da "Verdura" de um Processo através de Balanços de Massa e Energia.
7. Reatores e Processos de Separação em Engenharia Verde. Contínuo vs. Descontínuo.
8. Integração de Processos: Síntese, Análise e Otimização. Intensificação de Processos. Conceito de Processos Inerentemente Seguros e sua Avaliação.
9. Conceitos de Avaliação de Ciclo-de-Vida. Impactos de Materiais, de Energia, de Resíduos e de Tratamento de Resíduos.

5. Syllabus (1.000 characters).

Part I

1. Green Chemistry, Green Engineering and Sustainability.
2. Green Chemistry and Green Engineering Principles. Metrics.
3. Designing Greener and Safer Chemical Syntheses. Selection of Solvents, Catalysts.
4. Reagents and Reaction Conditions. Renewable Resources. Environment, Health and Safety Hazards.
5. Biocatalysis and Bioprocesses in Green Chemistry and Engineering.

Part II

6. Designing Greener, Safer and more Sustainable Manufacturing Processes. Measuring "Greenness" of a Process through Energy and Mass Balances.
7. Reactors and Separations in Green Engineering. Batch vs. Continuous.
8. Process Integration: Synthesis, Analysis and Optimization. Process Intensification. Concepts of Inherently Safer Processes and Assessment.
9. Life-Cycle Assessment Concepts. Impacts of Materials, of Energy, and of Waste and Waste Treatment.

6. Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular (1.000 carateres).

Um dos objetivos fundamentais é propiciar conexões lógicas entre as áreas da síntese química, do design de processo, da engenharia, do ambiente, e da segurança, e o ciclo de vida de produtos. Os Tópicos (T) 1-2 irão considerar o contexto da sustentabilidade realçando o papel fundamental da QV&EV no desenvolvimento da sociedade através da adoção de práticas sustentáveis, abordando as métricas usadas na avaliação da "verdura" da química, dos processos e dos produtos. Nos T3-4 serão lecionados conceitos que contribuem para reações químicas mais sustentáveis, providenciando guias para análise e seleção de materiais que possam promover sínteses mais verdes. Os T5-7 providenciarão conceitos chave de engenharia que estão na base da conceção de processos químicos mais sustentáveis, através das relações entre balanços de massa e energia e as métricas da

QV&EV. O T8 englobará noções base de análise de ciclo de vida desde as matérias-primas até à reciclagem/reutilização/fim-de-vida de produtos.

6. Evidence of the syllabus coherence with the curricular unit's intended learning outcomes (1.000 characters).

One fundamental learning objective is to establish bridges between the deeply interconnected subjects of synthetic chemistry, process design, engineering, environment, safety and products life-cycle. Topics (T) 1-2 will consider the context of sustainability specifically highlighting the key role of GC&GE in the society development through the adoption of more sustainable practices, addressing the metrics used to measure the "greenness" of chemistry, processes, and products. T3-4 will focus on the key components that contribute to more sustainable chemical reactions, providing guidelines for analysis and selection of materials that can promote greener syntheses. T5-7 will provide key engineering concepts that underlay the design of greener and more sustainable chemical processes, through the relationship between mass and energy balances and GC&GE metrics. T8 will cover introductory life-cycle concepts from raw materials to recycling/reuse/end-of-life products.

7. Metodologias de ensino (avaliação incluída) (1000 carateres).

A metodologia de ensino compreenderá a lecionação de princípios, conceitos, metodologias e ferramentas de cálculo e avaliação associadas à QV&EV, acompanhada pela sistemática análise de casos de estudo, resolução de problemas, e pela identificação e formulação de possíveis soluções.

A avaliação de conhecimentos é efetuada por avaliação distribuída com exame final. A avaliação distribuída ao longo do período letivo, compreende a realização de um teste final escrito (TE) e um trabalho monográfico (M) obrigatório, considerado pedagogicamente fundamental, com apresentação e discussão. Os estudantes ficam dispensados do exame final (EF), caso tenham obtido avaliação positiva no TE.

A classificação mínima no TE é 9,50 valores. A classificação mínima da M é 9,50 valores. A classificação mínima do EF é 9,50 valores. Para obter aprovação, a nota final ponderada mínima (NF) é 9,50 valores e é obtida por $NF=0,50(TE \text{ ou } EF)+0,50M$.

7. Teaching methodologies (including assessment) (1.000 characters).

The teaching methodology will comprise the lecturing of principles, concepts, methodologies, and the calculation and assessment tools associated with GC&GE, accompanied by the systematic analysis of case-studies, problem-solving, and identification and design of possible solutions.

Knowledge assessment is carried out through distributed assessment with a final exam. Distributed assessment throughout the academic period comprises one written final test (WT) and a mandatory monographic work (M), which is considered pedagogically fundamental and includes a presentation and discussion. Students are exempted from the final exam (FE) if they achieve a positive evaluation in the distributed assessment.

The minimum classification in of the WT is 9.50 values. The minimum M classification is 9.50 values. The minimum FE classification is 9.50 values. To obtain approval, the minimum weighted final mark (FM) is 9.50 values and is obtained by $FM=0.50(WT \text{ or } FE)+0.50M$.

8. Demonstração da coerência das metodologias de ensino com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular (3.000 carateres).

Os objetivos de aprendizagem, e os seus resultados, estão intrinsecamente relacionados com o conhecimento compreensivo dos tópicos constituintes do programa, o qual será, em larga medida, o resultado do estudo acompanhado e comparado de transformações químicas e processos tecnológicos, apontando globalmente para soluções integradas mais sustentáveis. As metodologias de ensino adotadas são focadas, por um lado, na identificação dos problemas de sustentabilidade associados à indústria química em geral e, por outro, na disponibilização de ferramentas de cálculo e avaliação tendentes à resolução de problemas detetados. Isto será conseguido pela progressiva e regular transferência de conhecimentos a partir dos vários tópicos de QV&EV lecionados, seguindo uma abordagem sistemática de análise de casos de estudo, e pelo desenvolvimento de competências para resolução de problemas. Esta metodologia servirá igualmente os propósitos da construção de um background científico e tecnológico para a preparação dos trabalhos monográficos numa base autónoma de trabalho. A metodologia de ensino implementada e o modelo de avaliação são baseados na aprendizagem individual e na aprendizagem em grupo. A primeira resultará do acompanhamento e estudo contínuo das matérias lecionadas em sala de aula com o auxílio da bibliografia recomendada e outros meios de apoio e a segunda através da análise e discussão em grupo de tópicos específicos relevantes para a QV&EV aquando da

preparação e apresentação do trabalho monográfico. Estes dois vetores permitirão ao estudante atingir com a profundidade adequada os vários objetivos de aprendizagem definidos e desenvolver simultaneamente as competências necessárias à resolução de problemas associados à sustentabilidade das transformações químicas e dos processos.

A elaboração do trabalho monográfico tem por objetivo aprofundar e aplicar o conhecimento adquirido durante a lecionação em tópicos específicos e especializados da QV&EV. A monografia consistirá em revisões críticas atualizadas da literatura acerca dum tema selecionado versando a problemática da sustentabilidade e a visão da QV&EV. Esta abordagem promoverá o desenvolvimento de competências analíticas e de síntese de revisão da literatura por parte de cada estudante, dado que o trabalho monográfico implicará a consulta cuidada e exaustiva de bases de dados científicas através de recursos online, ajudando ao estabelecimento de boas práticas na preparação de qualquer projecto científico/tecnológico. A monografia realizada por um grupo de estudantes será também escrutinada em apresentação oral tomando a forma de avaliação adicional dos objetivos de aprendizagem, para além de permitirem aos estudantes reforçar as suas competências comunicacionais.

8. Evidence of the teaching methodologies coherence with the curricular unit's intended learning outcomes (3.000 characters).

The learning objectives and their outcomes are intrinsically related with the comprehensive coverage of the syllabus topics, which will be, to a great extent, a result attained by accompanied and compared study of the chemistry and chemical technological processes, globally pointing to more sustainable integrated solutions. The adopted teaching methodologies are focused, in one hand, on the identification of the sustainability problems associated with the chemical enterprise in general and, on the other, in providing calculation and assessment tools for their tentative solution. This is accomplished by a progressive and steady transfer of knowledge from the several GC&GE lectured subjects, following a systematic approach to case-studies analysis, and the development of applied skills through problem-solving. This methodology is also intended to construct the basic scientific and technological background for the preparation of monographic works on an autonomous basis. The implemented teaching methodology and the evaluation model are based on individual learning and in group learning. The first of them is a result of the continuous follow-up study of lectured class topics with the help of recommended bibliography and other available learning supports and the second through the in-group analysis and discussion of specific topics relevant to GC&GE while preparing and presenting the monographies. These two paths will allow the student to accomplish in a very appropriate manner the previously defined learning goals and, simultaneously, develop the necessary skills for problem-solving of issues related to the sustainability of chemistries and chemical processes.

The monographic work is intended to deepen and apply the knowledge acquired on lecturing, going further on specific and specialized themes of GC&GE. The monography will consist in up-dated critical bibliographic reviews about a selected subject encompassing the use of GC&GE in the realm of sustainability. This approach will promote the development of both analytical and synthetic skills of literature reviewing by each student, since the monographic work would imply the obligatory thorough search on scientific databases through available online resources, prompting for good practices in the preparation of any scientific/technological project. The monographic work made by a group of the students will also be scrutinized in oral presentation as a further assessment of the learning outcomes, providing meanwhile the reinforcement of their communicational skills.

9. Bibliografia de consulta/existência obrigatória (1.000 carateres).

1. Jiménez-González, C., & Constable, D. J. C. (2011). *Green Chemistry & Engineering: A Practical Design Approach*. Wiley.
2. Marteel-Parish, A. E., & Abraham, M. A. (2013). *Green Chemistry and Engineering: A Pathway to Sustainability*. Wiley.
3. Doble, M., & Kruthiventi, A. K. (2007). *Green Chemistry and Engineering*. Academic Press.
4. Ameta, S., & Ameta, R. (Ed.) (2013). *Green Chemistry Fundamentals and Applications*. Apple Academic Press.
5. Anastas, P. T., & Warner, J. C. (1998). *Green Chemistry: Theory and Practice*. Oxford University Press.
6. Clark, J. H., & Macquarrie, D. (Ed.) (2002). *Handbook of Green Chemistry and Technology*. Wiley-Blackwell.
7. Lancaster, M. (2016). *Green Chemistry - An Introductory Text* (3rd ed.), Royal Society of Chemistry.
8. Anasta, P. T. (Ed.) (2018). *Handbook of Green Chemistry: Green Metrics*. Wiley.

¹ Anual, semestral, trimestral, ...

² Número total de horas de trabalho.

³ Discriminadas por tipo de metodologia adotado (T - Ensino teórico; TP - Ensino teórico-prático; PL - Ensino prático e laboratorial; TC - Trabalho de campo; S - Seminário; E - Estágio; OT - Orientação tutorial; O - Outro).

⁴ Assinalar sempre que a unidade curricular seja optativa.