

¿Química Verde?

Presentado por Diana Ita, PhD

Referencia principal: Allenby, B. 2012 Preparado por: Ramzy Kahhat y Diana Ita

Facultad de Ciencias e Ingeniería



Love Canal en Nueva York

- El "Love Canal" es un sitio que había sido utilizado para enterrar 21 000 toneladas de residuos tóxicos por Hooker Chemical (comprada por Occidental Petroleum Corporation a fines de los 60s).
- Toxinas como compuestos orgánicos de halogenados, pesticidas, dioxinas y cloro bencenos en un área de 16 acres.
- Una escuela fue construida en la parte superior del sitio de residuos químicos.



Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Love Canal: Video

Love Canal 1

Love Canal 2

https://www.youtube.com/watch?v=3iSFgZ-SlaU&ab_channel=TuftsENVS

 $\underline{\text{https://www.youtube.com/watch?v=TUTF57Chos4\&ab_channel=DarkRecords}}$

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Metil isocianato (Methyl Isocyanate)

"El metil isocianato es un líquido incoloro, altamente inflamable que se evapora rápidamente cuando se expone al aire. Tiene un olor fuerte y penetrante." ATSDR

"El metil isocianato es usado en la producción de **plaguicidas**, espuma de **poliuretano** y **plásticos**." ATSDR

Exposición baja: irritación ojos y garganta

Exposición alta: grave daño en los pulmones que puede ser fatal.



Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Bhopal en India

- Ocurrió en 1984 en la planta de **pesticidas en Bhopal**.
- Fue un incidente de fuga de un gas metil isocianato (methyl isocyanate) y otros productos químicos, considerada una de las peores catástrofes industriales del mundo.
- Hubo una cifra total de 3,787 muertes relacionadas con el escape de gas.



Introducción a la Ingeniería Sostenible



Causas del Accidente

- El almacenamiento de MIC (Metil isocianato o methyl isocyanate) en grandes tanques y llenado más allá de los niveles recomendados.
- El mal mantenimiento después de que la planta dejó de producir MIC al final de 1984.
- El fracaso de varios sistemas de seguridad (debido a la falta de mantenimiento).
- Los sistemas de seguridad que se habían apagado para <u>ahorrar dinero</u>, incluyendo el sistema de refrigeración del tanque MIC que podría haber mitigado la severidad del desastre.



Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.

Bhopal: Video

- https://www.youtube.com/watch?v=IwPSDMUtNmk
 &ab_channel=TheEconomist
- https://www.youtube.com/watch?v=xx9Hx5ZyiM&ab_channel=Anomal%C3%ADas

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Producción de Carbonato Sódico

- Soda (carbonato sódico), es necesaria para la fabricación de vidrio, colorantes, jabón, lejía, y otros fines.
- Nicolás Leblanc desarrolló un método para fabricar soda utilizando carbonato de calcio, carbón, y sulfato de sodio (1791).



Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Producción de Carbonato Sódico

 Proceso produce desechos con graves impactos ambientales (e.g. vapores de ácido clorhídrico y sulfuro de calcio).



 Ley de Álcali en Inglaterra (1863), que obligaba a los productores de soda a recuperar la mayor parte del ácido clorhídrico.

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Producción de Carbonato Sódico

-y no pasó mucho tiempo antes de que los ingenieros químicos aprendan a transformar el ácido clorhídrico a cloro por oxidación catalizada por el aire.
- Este cloro puede reaccionar entonces con cal para producir **blanqueador en polvo**...
- La disponibilidad de este blanqueador dio lugar a un proceso (1880s) que se utiliza para blanquear el papel.
- 1890, Ernest Solvay: producción electrolítica de carbonato sódico.

Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Fabricación de Químicos

Los flujos de **residuos** son simplemente los **recursos potenciales** que no hemos sido lo suficientemente inteligentes como **para utilizar** completamente.

La humanidad tiene un patrón alto de aumentar la eficiencia y reutilización de los flujos residuales en el producto, los cuales son el núcleo de la evolución del sector de la producción química moderna.

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Fabricación de Químicos

- Características de fabricación de productos químicos para un proceso social y ambientalmente preferibles:
 - 1. Los sistemas químicos están bajo el control de **una sola empresa o grupo de empresas**: rediseño de operaciones y la reutilización de flujos residuales, proporcionan un **incentivo directo** para continuar dicha innovación.
 - Si el manejo de residuos es realizado por una tercera entidad → incentivos serían sustancialmente menor o inexistentes.
 - Si se maneja en la misma empresa, el control de calidad es más sencillo.

Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Fabricación de Químicos

- 2. Los **costos de un error** o accidente son enormes, y las demandas pueden ser internacionales... no sólo en el país donde ocurrió el incidente.
 - Proporciona un fuerte incentivo tanto a nivel de empresa, y nivel sector (el público no distingue entre empresas de un sector en particular).

Introducción a la Ingeniería Sostenible



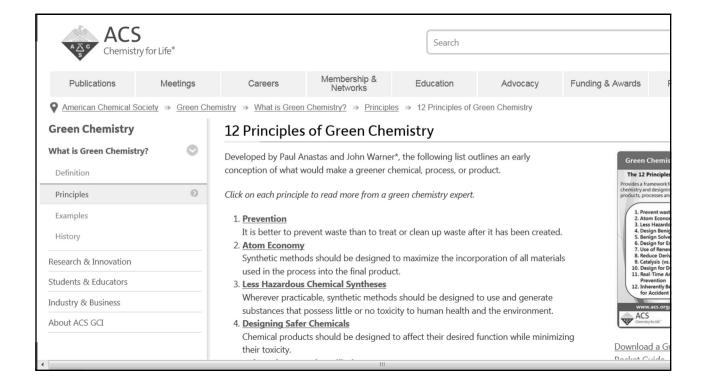
¿Química Verde?

"Green chemistry, also known as sustainable chemistry, is the design of chemical products and processes that reduce or eliminate the use or generation of hazardous substances. Green chemistry applies across the life cycle of a chemical product, including its design, manufacture, and use." (US EPA)

"La química verde, también conocida como la **química sostenible**, es el diseño de productos y procesos químicos que **reducen o eliminan** el uso o generación de **sustancias peligrosas**. La química verde se aplica en todo el ciclo de vida de un producto químico, incluyendo su **diseño**, la **fabricación** y **uso**. "

Introducción a la Ingeniería Sostenible





12 Principios de la Química Verde

- 1. Prevención: Evite los residuos mediante un diseño adecuado de productos químicos sintetizados
- 2. Economía del átomo: Diseñar productos químicos para ser plenamente eficaces.
- **3. Menos materiales tóxicos**: Diseñar productos químicos sintetizados y con procesos de fabricación más <u>seguros</u>, usando menos materiales <u>tóxicos</u>.
- 4. Utilizar materiales renovables donde sea posible y tenga sentido (p.ej. evitar ethanol de maíz)
- 5. Utilizar **catalizadores** (superiores a reactivos estequiométricos), son reusables
- 6. Evite el uso de **derivados** químicos
- Utilizar las vías químicas que pone la cantidad máxima de productos químicos en el producto final.
 Maximizar producción
- 8. Utilice solventes más seguros
- 9. Eficiencia Energética
- **10. Degradación**: Diseñar productos químicos que se rompan después de su uso (p.ej., bioplásticos)
- 11. Hacer la síntesis química y de producción más intensivo y más eficiente de forma sistémica.
- 12. Diseñar rutas de síntesis y operaciones de las instalaciones para reducir al mínimo las posibilidades de **accidentes**.

Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Química Verde...¿Sostenible?

- Se centra en el dominio del ambiente en lugar del campo más amplio de la sostenibilidad.
- Se enfoca en los efectos ambientales de la industria química.

Es poco probable que un cambio en **una dimensión** de un sistema complejo adaptativo no cambie o **afecte otras partes**.

P ej., bajar la T de un reactor para reducir consumo de energía, bajaría la eficiencia y generaría más residuos.



Introducción a la Ingeniería Sostenible



Química Verde

- Química verde tiene largo camino por andar
 - Mucho de lo que se hace es a una escala de laboratorio

La evolución desde una **preocupación ambiental** hasta la **sostenibilidad** toma tiempo.

Comprensión más amplia de las implicaciones de la ingeniería química en complejos sistemas humano/ambiente/infraestructura regionales y globales integrados.

Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Hacia una Química Verde

- 1. Incluir las **dimensiones sociales** de la ingeniería química, que son consideradas como altamente **positivas**, en lugar de simplemente enfatizar los impactos ambientales negativos de los productos químicos. ¿Podrían vivir sin química?
- 2. No olvidarse de la **ESCALA y FRONTERA**.

Introducción a la Ingeniería Sostenible





Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



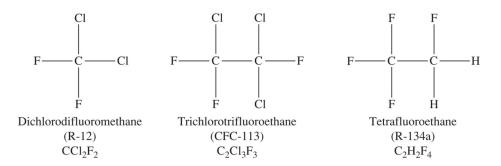
El Estudio de Caso de CFC

- Clorofluorocarbonos (CFCs), son la base de la química verde perfecta.
- Son químicamente más estable, son más seguros, por lo general consumen menos energía, y causan menos daño a los entornos locales que otras alternativas.
- <u>Pero a nivel de sistemas</u> agotan el ozono estratosférico, lo que aumenta la penetración de la radiación de alta energía ultravioleta del sol a la superficie de la tierra, y el daño del ADN y de los organismos.

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Moléculas de Clorofluorocarbonos



Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



El Estudio de Caso de CFC

- Los CFC son una clase de halógenos, que fueron diseñados para ser <u>sustitutos de materiales mucho más tóxicos y</u> peligrosos (amoniaco, cloruro de metilo, dióxido de azufre)
- Por desgracia, esta estabilidad perduró hasta la migración de los materiales a la atmósfera superior, donde se sometieron a la descomposición fotolítica por la radiación UV, la liberación de radicales de cloro que <u>catalizó</u> la destrucción del ozono estratosférico.

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Chemical Name	Lifetime, in years	ODP2 (WMO 2011)	ODP1 (Montreal Protocol)	GWP5 (AR4)	CAS Number
	Group I (from	section 602 of the	e CAA)		
CFC-11 (CCl3F) Trichlorofluoromethane	45	1	1	4750	75-69-4
CFC-12 (CCl2F2) Dichlorodifluoromethane	100	0.82	1	10900	75-71-8
CFC-113 (C2F3Cl3) 1,1,2- Trichlorotrifluoroethane	85	0.85	0.8	6130	76-13-1
CFC-114 (C2F4Cl2) Dichlorotetrafluoroethane	190	0.58	1	10000	76-14-2
CFC-115 (C2F5CI) Monochloropentafluoroethane	1020	0.5	0.6	7370	76-15-3
	Group II (from	section 602 of th	e CAA)		
Halon 1211 (CF2ClBr) Bromochlorodifluoromethane	16	7.9	3	1890	353-59-3
Halon 1301 (CF3Br) Bromotrifluoromethane	65	15.9	10	7140	75-63-8
Halon 2402 (C2F4Br2) Dibromotetrafluoroethane	20	13.0	6	1640	124-73-2
	Group III (from	section 602 of th	ne CAA)		
CFC-13 (CF3Cl) Chlorotrifluoromethane	640	1	1	14420	75-72-9
CFC-111 (C2FCI5) Pentachlorofluoroethane		1	1		354-56-3
CFC-112 (C2F2Cl4) Tetrachlorodifluoroethane		1	1		76-12-0
CFC-211 (C3FCI7) Heptachlorofluoropropane		1	1		422-78-6

Conclusiones del caso

Las propiedades "verdes" de un sistema químico no pueden ser conocidas, a menos que los impactos en todas las **escalas** se monitoreen y perciban.

¿Se pudo prever en el caso de los CFCs?

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Conclusiones del caso

La Ingeniería Sostenible debe constantemente regresar a los sistemas fundamentales, ya sea natural, humano, o construido, y explorar las perturbaciones y los cambios inesperados, para determinar si los impactos no previstos de los sistemas de ingeniería se expresan y si es así qué acciones pueden ser necesarias en respuesta.

Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Conclusiones del caso

Cuando las opciones se encuentran disponibles, (caso de alternativas al CFCs que ya estaban desarrolladas) se reduce el costo de cambios en las tecnologías, y cuando no lo son, y la elección es, por ejemplo, entre el uso de los CFC y frenar la producción de los sistemas militares, los costos y beneficios son muy diferentes.

Se necesitan espacios para generar opciones tecnológicas robustas, algo que suele ser poco considerado.

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Química verde no es suficiente...Necesidad de Avanzar hacia un enfoque integral de Ingeniería

- Lo que puede ser una preocupación pequeña y fácil de gestionar a escala de laboratorio puede convertirse rápidamente en una preocupación ambiental o social grave una vez que se logra la comercialización del diseño.
- Es importante desarrollar competencias para:
 - Determinar, sobre una base a tiempo real, qué sistemas son importantes para familias químicas particulares
 - Dialogar con aquellos sistemas relevantes... a todas las escalas

Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Química verde no es suficiente...Necesidad de Avanzar hacia un enfoque integral de Ingeniería

- Es importante desarrollar competencias para:
 - Priorizar valores, la ética, y las metas para que los conflictos inevitables se pueden resolver y las decisiones resultantes sean aceptadas.
 - Desarrollar espacios para opciones tecnológicas robustas → cambios (en caso de problemas) efectivos y con el menor costo social y político.
 - Apoyar el desarrollo de la capacidad institucional para llevar a cabo estas actividades.

Introducción a la Ingeniería Sostenible





Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Antimicrobianos y fármacos como Sistemas de la Tierra

- Es otro ejemplo de la disfuncionalidad disciplinaria y límite intelectual dado en el mundo físico real
- Fenómeno sin resolver
- ¿Falla de la ciencia o regulaciones ambientales?
 - Refleja un desafío para las instituciones y sociedad en cambiar de la escala de laboratorio a un paradigma diferente que entienda que los diseños de químicos en una economía global es un diseño de sistemas terrestres a muchas escalas.

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Antimicrobianos y fármacos como Sistemas de la Tierra

- Como ejemplo: dos populares antimicrobianos, triclosán (TCS) y triclocarbán (TCC), que se utiliza en cosméticos, pasta de dientes, detergentes, jabones, envases de alimentos, alfombras, juguetes.
- Estos dos **no son eliminados por los sistemas de tratamiento de aguas residuales**, estos se mantienen activos (similar a drogas, hormonas, y otros químicos).
- Persisten en el sedimento, con efectos tóxicos significativos en las comunidades microbianas acuáticas.
- Se debe entender las complejidades de los sistemas de la tierra emergentes, incluyendo sistemas terrestres y acuáticos que han sido "rediseñados" por la adición de antimicrobianos y otros químicos antropogénicos.

Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Antimicrobianos y fármacos como Sistemas de la Tierra

- 60% de las muestras de ríos en USA han detectado niveles de TCS
- 13 ríos más importantes de USA han detectado TCC aguas abajo de las descargas de plantas de tratamiento de aguas residuales
- Los guímicos permanecen activos una vez emitidos
- Persisten en sedimentos: afectan microrganismos acuáticos
- Absorbidos a los biosólidos... uso en agricultura
- ¿Mejorar la resistencia de la comunidad bacteria? ¿Cambia significativamente la microflora y microfauna de ecosistemas?

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Microchemical Journal olume 136, January 2018, Pages 25-39

ecosystems: A review

Paola Grenni a 🙎 🖾 , Valeria Ancona b, Anna Barra Caracciolo

Among the different pharmaceuticals present in soil and water ecosystems as microcontaminants, considerable attention has been paid to antibiotics, since their increasing use and the consequent development of multi-resistant bacteria pose serious risks to human and veterinary health. Moreover, once they have entered the environment, antibiotics can affect natural microbial communities. The latter play a key role in Ecological effects of antibiotics on natural fundamental ecological processes, most importantly the maintenance of soil and water quality. In fact, they are involved in biogeochemical cycling and organic contaminant degradation thanks to their large reservoir of genetic diversity and metabolic capability. When antibiotics occur in the environment, they can hamper microbial community structure and functioning in different ways and have both direct (short-term) and indirect (long-term) effects on microbial communities. The short-term ones are bactericide and bacteriostatic actions with a consequent disappearance of some microbial populations and their ecological functioning. The indirect impact includes the development of antibiotic resistant bacteria and in some cases bacterial strains able to degrade them by metabolic or co-metabolic processes. Biodegradation makes it possible to completely remove a toxic compound from the environment if it is mineralized.

> Several factors can influence the significance of such direct and indirect effects, including the antibiotic's concentration, the exposure time, the receiving ecosystem (e.g. soil or water) and the co-occurrence of other antibiotics and/or other contaminants.

Introducción a la Ingeniería Sostenible

This review describes the current state of knowledge regarding the effects of antibiotics on natural microbial communities in soil and water ecosystems.



Microchemical Journal



Antibiotic residues and endocrine disrupting compounds in municipal wastewater treatment plants in Rome, Italy

F. Spataro a, N. Ademollo Barro, J. Rauseo b, L. Patrolecco

Highlights

- Inlet and outlet samples from four WWTPs serving the city of Rome were analysed for antibiotic residues and phenolic EDCs.
- Endocrine disrupting compounds (EDCs)
- WWTPs were not able to remove completely neither the antibiotic nor the EDCs considered.
- CTC and AMX were the most abundant antibiotics in the effluents, while SMX and CIP the most resistant to removal treatments.
- Among the EDCs, bisphenol A and nonylphenol di-ethoxylate occurred at the highest concentrations in treated wastewaters.
- Preliminary risk assessment indicates a potential ecotoxicological risk for receiving river waters.

Introducción a la Ingeniería Sostenil...



Water Research

Volume 124, 1 November 2017, Pages 713-727

Review

Occurrence of illicit drugs in water and wastewater and their removal during wastewater treatment

 $\underbrace{\mathsf{Meena}\,\mathsf{K}.\mathsf{Yadav}^{\,\alpha}\boxtimes_{\,\backprime}\,\mathsf{Michael}\,\mathsf{D}.\mathsf{Short}^{\,\alpha\,\,\mathsf{b}}\boxtimes_{\,\backprime}\,\mathsf{Rupak}\,\mathsf{Aryal}^{\,\alpha}\boxtimes_{\,\backprime}\,\mathsf{Cobus}\,\mathsf{Gerber}^{\,\varsigma}\boxtimes_{\,\backprime}\,\mathsf{Ben\,van\,den}\,\mathsf{Akker}^{\,\alpha\,\,\mathsf{d}}\boxtimes_{\,\backprime}\,\mathsf{Christopher}\,\mathsf{P}.\mathsf{Saint}^{\,\alpha\,\,\mathsf{b}}\, \overset{\mathsf{b}}{\wedge}\, \boxtimes_{\,\backprime}\boxtimes_{\,\backprime}\,\mathsf{Saint}^{\,\alpha\,\,\mathsf{b}}$

Highlights

- Levels of illicit drugs are increasing in wastewater, surface and drinking water.
- Regional variations in drug consumption are reflected in their detection patterns.
- Conventional wastewater treatment shows variable efficacy for drug removal.
- Little is known on the removal efficacy of alternative or natural treatment systems.
- Almost nothing is known about the environmental fate and toxicity of illicit drugs.

Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Perspectiva de Ingeniería Sostenible en el diseño de farmacéuticos Generally not Social needs and wants/impacts of regulated or Possibly regulated better health/soil, water, and other perceived as by environmental earth systems as elements of part of the drug agencies product/chemical design delivery system Immediate environmental fate Generally regulated by awareness of drug agencies responsibility Use in human phase Generally Manufacture regulated by of drug (e.g., drug and Tamiflu, environmental antimicrobials) agencies

La interacción de los regímenes reguladores fragmentados con sistemas complejos que operan a diferentes escalas en diferentes dominios legales, disciplinas y éticas, es una de las razones de que las prácticas de ingeniería y la política no han podido seguir el ritmo de los cambios

Implicaciones Políticas Nivel de Escala de Laboratorio (Bench Scale Level) Nivel de Flujo de Material (Material Flux Scale) Nivel de Sistemas de la Tierra (Earth Systems Scale) Introducción a la Ingeniería Sostenible Diana Ita, Ph.D.

Nivel de Escala de Laboratorio (Bench Scale Level)

- Determinados productos químicos en aplicaciones individuales están siendo evaluados y posibles metodologías de procesamiento de químicos están siendo identificadas.
- Idea de una buena práctica informada por la heurística con la presunción de una preferencia ambiental. Se necesita una visión de implicaciones en sistemas posiblemente afectados.

heurístico, ca.

- (Del gr. εὑρίσκειν, hallar, inventar, y -tico).
- 1. adj. Perteneciente o relativo a la heurística.
- 2. f. Técnica de la indagación y del descubrimiento.
- 3. f. Busca o investigación de documentos o fuentes históricas.
- 4. f. En algunas ciencias, manera de buscar la solución de un problema mediante métodos no rigurosos, como por tanteo, reglas empíricas, etc.

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Nivel de Flujo de Material (Material Flux Scale)

- Es el nivel **industrial**, donde se utilizan herramientas como el modelo de análisis de flujo de materiales (MFA) para entender el **flujo** de materiales en el comercio.
- Aparecen preocupaciones potenciales relacionadas a efectos inesperados de los materiales en todo su ciclo de vida. Las suposiciones deben hacerse con cautela.

Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Nivel de Sistemas de la Tierra (Earth Systems Scale)

- Incluye no sólo a los sistemas naturales que la mayoría de gente intuitivamente identifica, sino también a los sistemas humanos como los económicos, tecnológicos, culturales, y sociales, y otros sistemas construidos y diseñados (p.ej., los sistemas de tratamiento de residuos).
- El concepto de química verde es menos aplicable.
- Debido a su enfoque a escala de laboratorio, la química verde no proporciona la base teórica ni metodológica para la comprensión, los métodos y herramientas de diseño y las métricas apropiadas para el sistema en general.

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Conclusión

- La Química Verde es un área importante pero aun es limitada
- Tiene que lidiar con preguntas complejas de costos o beneficios sociales o ambientales
- Tiene que lidiar con la escala y complejidad de los sistemas de la tierra (incluyendo marcos económicos y tecnológicos globalizados modernos)
- Innovaciones químicas no pueden ser simplemente evaluadas en tomas instantáneas y limitadas

Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Desarrollar mecanismos para monitorear, dialogar, identificar y responder a los cambios en la dinámica de los sistemas, y las implicaciones éticas de la actividad humana en la configuración de dicha dinámica, se convierte en un desafío importante para la ingeniería sostenible en este dominio.

GRACIAS

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Química Verde

- La química verde no es una investigación de largo alcance y ámbito operativo, sino más bien una transición, que duró hasta la química tradicional y los programas de ciencia de los materiales y las prácticas de interiorizar el potencial de las tecnologías nuevas y más eficientes para el medio ambiente, tales como la enzima activada por procesos de producción biotecnológica.
- En este punto, tal vez como la ingeniería sostenible en sí, la química verde se convierte simplemente en "buena química"

Introducción a la Ingeniería Sostenible

Diana Ita, Ph.D.



Química Verde

• De hecho, gran parte de la historia de la industria química consiste en aprender a convertir los residuos de los procesos existentes en materia prima para nuevos productos, y la gestión de los impactos ambientales de los flujos de residuos hasta que eso ocurra (a menudo bajo la presión directa o indirecta de las regulaciones gubernamentales).

Introducción a la Ingeniería Sostenible



Química Verde

- Química Verde puede ser visto como un pequeño paso hacia el incremento de enfoques tradicionales con una ingeniería y manejo de sistemas de la tierra mucho más amplia, y con una perspectiva en ingeniería sostenible.
- La ingeniería química pasa de un enfoque bastante fuerte en la producción inmediata y uso de sistemas químicos a una mayor comprensión de las implicaciones de la ingeniería química en el complejo regional y mundial integrado humano / natural. Los sistemas construidos, más que elementos específicos de dichos sistemas.

Introducción a la Ingeniería Sostenible

