

Sinergia entre la Química Verde y la Química Computacional: hacia un Futuro Sustentable

María Esther Sánchez Castro

Sustentabilidad de los Recursos Naturales y Energía. Cinvestav, Unidad Saltillo, Av. Industria Metalúrgica 1062, Parque Industrial Saltillo-Ramos Arizpe, Ramos Arizpe C.P. 25900, Coahuila, México

Cite this: *Chem. Sci. Technol.* **2024**, 000001

Received: October 5, 2024

Accepted: October 20, 2024

Published: October 22, 2024



La química ha sido definida desde diversas perspectivas, destacándose tanto su carácter de ciencia central como su rol de “ciencia que conecta”, uniendo disciplinas como la física, la biología, las matemáticas y la biomedicina, entre otras [1,2]. Más allá de su relevancia científica, la química es fundamental para enfrentar problemas sociales y ambientales como el cambio climático y la crisis energética, posicionándose como una herramienta clave para la construcción de un futuro sustentable [3].

Química verde: una aproximación hacia procesos más seguros y limpios

El concepto de química verde surge para minimizar el impacto ambiental de la química mediante el diseño de procesos y productos que reduzcan o eliminen sustancias peligrosas [4]. Esta área promueve una economía circular, optimiza el consumo de recursos renovables y se alinea con los Objetivos del Desarrollo Sustentable (ODS). La química verde busca evitar la generación de residuos desde el origen, empleando rutas sintéticas más seguras, disolventes ecológicos y catalizadores eficientes [5].

La química computacional: modelado y predicción al servicio de la sostenibilidad

El desarrollo de herramientas computacionales ha revolucionado la forma en que se investigan las propiedades moleculares. La mecánica cuántica y otros enfoques matemáticos han permitido modelar el comportamiento de sistemas complejos de forma precisa. La química computacional facilita la predicción de propiedades como afinidades electrónicas, energías de reacción y características termodinámicas, permitiendo diseñar nuevas moléculas sin necesidad de realizar experimentos preliminares [6].

Este enfoque racional ahorra tiempo, recursos y reduce la producción de desechos, alineándose con los principios de la química verde. Además, mediante simulaciones computacionales, se pueden identificar catalizadores más eficientes y diseñar rutas sintéticas con menor impacto ambiental, lo que resulta esencial tanto en la academia como en la industria [7].



Perspectivas de la sinergia entre química verde y química computacional

La integración de la química computacional con la química verde representa una oportunidad para resolver desafíos emergentes en ciencia y tecnología [8]. A continuación, se presentan algunas contribuciones clave tomando en consideración los principios de la química verde:

- Optimización de procesos industriales: La química computacional puede ayudar a diseñar procesos industriales más eficientes mediante el modelado de reacciones químicas y mecanismos de reacción, lo que permitirá reducir el consumo energético y minimizar la generación de residuos.
- Diseño de materiales sostenibles: La predicción de propiedades antes de la síntesis facilitará el desarrollo de materiales biodegradables o reciclables. Además, el uso de disolventes alternativos y ecológicos puede transformar los procesos de purificación en la industria química.
- Desarrollo de catalizadores verdes: Los estudios computacionales pueden identificar catalizadores más selectivos y estables, reduciendo el uso de metales tóxicos y favoreciendo reacciones más seguras. Estos catalizadores serán esenciales para la producción de productos químicos con menor impacto ambiental.

- Innovaciones en biotecnología y farmacéutica: La química computacional permite diseñar fármacos y biopolímeros con mayor precisión, reduciendo la necesidad de experimentación y disminuyendo el impacto ambiental en la producción farmacéutica.
- Impacto en educación y formación interdisciplinaria: La creciente importancia de esta sinergia sugiere la necesidad de formar profesionales con competencias en ambas disciplinas. El enfoque interdisciplinario fomentará colaboraciones más eficaces entre químicos teóricos, computacionales y experimentales, potenciando los beneficios de estas áreas.
- Contribución al combate del cambio climático: La química computacional puede acelerar el desarrollo de tecnologías clave para la captura y almacenamiento de carbono, así como para la producción de energía renovable. La predicción y optimización de procesos químicos facilitará la transición a una economía baja en carbono.

Hacia una colaboración interdisciplinaria para un impacto mayor

El fortalecimiento de las colaboraciones entre la química verde y la química computacional tiene el potencial de transformar tanto la investigación científica como las aplicaciones industriales. La capacidad de diseñar compuestos y procesos con menor impacto ambiental no solo contribuye a la sostenibilidad, sino que también impulsa la competitividad de las industrias químicas en un contexto global que demanda soluciones más ecológicas.

Esta sinergia permite un enfoque más preventivo y eficiente, alineado con los principios de sustentabilidad. A medida que ambas disciplinas sigan evolucionando, se espera que jueguen un papel relevante en la solución de desafíos ambientales. En definitiva, la integración de la química verde y la computacional representa un camino estratégico hacia un futuro más limpio, eficiente y respetuoso con el medio ambiente.

Referencias

1. Balaban, A. T.; Klein, D. J. Is chemistry 'The Central Science'? How are different sciences related? Co-citations, reductionism, emergence, and posets. *Scientometrics* **2006**, 69 (3), 615-637.

2. Gomollón-Bel, F.; García-Martínez, J. Connecting chemical worlds for a sustainable future. *Chem. Sci.* **2024**, 15 (14), 5056-5060.
3. Blum, C.; Bunke, D.; Hungsberg, M.; Roelofs, E.; Joas, A.; Joas, R.; Blepp, M.; Stolzenberg, H.-C. The concept of sustainable chemistry: Key drivers for the transition towards sustainable development. *Sustain. Chem. Pharm.* **2017**, 5, 94-104.
4. Identifying opportunities for green chemistry research to advance sustainable development <https://www.acs.org/content/dam/acsorg/greenchemistry/redesign/Research%20and%20> (accessed 18 de octubre, **2024**).
5. Anastas, P. T.; Warner, J. C. Green chemistry: theory and practice; Oxford university press, **2000**.
6. Cramer, C. J. Essentials of computational chemistry: theories and models; John Wiley & Sons, **2013**.
7. Stevens, J. Virtually going green: The role of quantum computational chemistry in reducing pollution and toxicity in chemistry. *Phys. Sci. Rev.* **2017**, 2 (7), 20170005.
8. Mammino, L. Green chemistry and computational chemistry: a wealth of promising synergies. *Sustain. Chem. Pharm.* **2023**, 34, 101151.