

CAPÍTULO 3

Consideraciones termodinámicas en la aplicación de la química verde

Santiago José Guevara Martínez
Adalberto Zamudio Ojeda
Rebeca Escutia Gutiérrez
Universidad de Guadalajara

Ernesto David García Bustos
CONAHCYT Universidad Politécnica
del Valle de México

Manuel Arroyo Albiter
Universidad Michoacana
de San Nicolás de Hidalgo

<https://doi.org/10.56604/qflaQVERJ2025-03c>

Introducción

La sociedad global actual está intrínsecamente relacionada con los derivados de productos químicos y sus respectivos procesos de síntesis, manufactura y aplicación. Con base en esta correlación y el conocimiento detallado de algunas de las interacciones adversas que una amplia variedad de ellos ha presentado en el medio ambiente, la química está directamente relacionada con la declaración de Río de 1992 sobre el Medio Ambiente y el Desarrollo. Esta puntualiza en el principio 1 que:

“los seres humanos constituyen el centro de las preocupaciones relacionadas con el desarrollo sustentable. Los seres humanos tienen derecho a una vida saludable y productiva en armonía con la naturaleza”.

La sustentabilidad de nuestra civilización depende completamente de si podemos suministrar fuentes de energía, alimentos y productos químicos a la creciente demanda poblacional, sin comprometer la salud e integridad de nuestro planeta a largo plazo. El desarrollo y sofisticación de herramientas y dispositivos que logran esos objetivos es un reto importante para el área científica, tecnológica y social.

El cambio químico del mundo nos ha conducido a sorpresas desagradables. En lo que se refiere a la sociedad, la química y sus tecnologías han sido los actores en la mayor parte de los procesos que marcan el progreso científico y tecnológico. La industria química, los gobiernos y organizaciones no gubernamentales han tomado medidas para abordar el desafío de la interface entre la química y la sustentabilidad. Se incluyen varias iniciativas como la Iniciativa Global para el Cuidado Responsable del Consejo Internacional de Asociaciones Químicas, las conferencias de la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico (OCDE) sobre química sostenible y varias leyes y convenios internacionales que regulan los productos y procesos químicos.

Amplias discusiones en el gremio científico han incluido a la Química Verde como uno de los conceptos más interesantes y atractivos en química, para lograr la sustentabilidad ambiental. Esa se ha convertido en una rama importante en la industria química, ya que busca reducir o eliminar el uso de productos químicos peligrosos y la generación de residuos en los procesos químicos. En este sentido, las consideraciones termodinámicas juegan un papel fundamental en la aplicación de la Química Verde, ya que permiten evaluar la eficiencia y sustentabilidad de los procesos químicos.

En este capítulo, discutiremos cómo la termodinámica puede ser aplicada en la optimización de procesos químicos para promover la sostenibilidad y reducir su impacto ambiental. Además, exploraremos cómo los conceptos termodinámicos como la entropía, la energía libre de Gibbs y la eficiencia energética pueden ser utilizados para diseñar procesos químicos más eficientes y respetuosos con el medio ambiente. De igual manera abordaremos un enfoque de cómo la Química Verde ha surgido como una alternativa sostenible y responsable a la química convencional, que busca reducir o eliminar los impactos negativos de los procesos químicos en el medio ambiente y en la salud humana. Sin embargo, para garantizar que la aplicación de la Química Verde sea ética, es fundamental tener en cuenta una serie de principios y valores que guíen nuestras acciones. La termodinámica juega un papel crucial, ya que nos permite entender cómo se comportan los sistemas químicos en términos de energía y entropía.

En este sentido, la termodinámica de la Química Verde busca optimizar las condiciones de reacción para minimizar el consumo de energía, reducir los residuos y maximizar la eficiencia de los procesos químicos. Además, se centra en el uso de materias primas renovables y la eliminación de productos tóxicos o dañinos para el medio ambiente. Así, en este trabajo se explorarán los principios fundamentales de la termodinámica de la Química Verde, así como su importancia en el desarrollo de procesos químicos más sustentables y respetuosos con el medio ambiente.

Aunado a lo anterior, la ética en la aplicación de la Química Verde implica el gran compromiso de considerar el bienestar de las personas y del planeta como una prioridad, y tomar decisiones responsables que sean respetuosas con el entorno y con las generaciones futuras. Esto implica, por ejemplo, utilizar materias primas renovables, minimizar el uso de productos químicos peligrosos, y diseñar procesos que generen menos residuos y emisiones. Además, la ética en la aplicación de la Química Verde también nos coloca en un escenario donde es inminente promover la transparencia y la colaboración en la investigación y en la industria química, así como el diálogo abierto con la sociedad para informar y sensibilizar sobre los beneficios y desafíos de esta disciplina.

En resumen, se destaca la importancia de considerar las leyes termodinámicas en la aplicación de la Química Verde, y cómo estas pueden ayudar a impulsar la innovación y el desarrollo de procesos químicos más sostenibles y amigables con el medio ambiente, bajo la ética que nos permite comprender como la aplicación de la Química Verde es fundamental para garantizar un desarrollo sostenible y equitativo en nuestro entorno.

Fundamentos termodinámicos de la química verde

La Química Verde es un enfoque contemporáneo en la química que busca minimizar el impacto ambiental de los procesos químicos, promoviendo la utilización de métodos y técnicas que sean sostenibles y respetuosas con el medio ambiente. En este sentido, los fundamentos termodinámicos juegan un papel fundamental en la Química Verde, ya que permiten entender y optimizar los procesos químicos desde una perspectiva energética y ambientalmente responsable. El objetivo de emplear principios de la termodinámica es que sea posible diseñar procesos químicos sostenibles y eficientes. Esta postura ideológica se alinea con los estatutos generales de la Química Verde, ya que también busca minimizar el uso de sustancias que puedan resultar agresivas con el medio ambiente, reducir la generación de residuos, además de optimizar el consumo de energía. En particular, siguiendo esos principios fundamentales, en años recientes se ha realizado el diseño de nuevos productos no solo en el área de materiales, polímeros, bioplásticos y aerosoles.¹

Exploraremos los conceptos básicos de la termodinámica aplicados a la Química Verde, como la energía libre de Gibbs, la entalpía y la entropía, y su importancia en la selección de rutas de síntesis y diseño de reacciones químicas más eficientes y sostenibles. La aplicación de estos principios termodinámicos puede contribuir a la reducción de residuos, la disminución del consumo de energía y la utilización de materias primas renovables en la industria química.

Las leyes de la termodinámica son principios fundamentales que rigen la energía y la transformación de la materia en sistemas termodinámicos. Son aplicables a cualquier sistema, incluyendo procesos químicos, y se utilizan para predecir y controlar la dirección de las reacciones químicas, así como para determinar la eficiencia y viabilidad de estas. En el contexto de la Química Verde, las leyes de la termodinámica guían la selección de reacciones químicas que sean termodinámicamente favorables, es decir, aquellas que se llevan a cabo de manera espontánea y liberan energía en forma de trabajo útil. Esto permite evitar la generación de subproductos innecesarios, reducir la cantidad de residuos generados y minimizar el consumo de materias primas y energía.

1. Sharma, M.; Sharma, M. Fundamental and Principles of Green Synthesis. In *Advances in Green Synthesis: Avenues and Sustainability*, Inamuddin; Boddula, R.; Ahamed, M. I.; Khan, A., Eds. Springer International Publishing: Cham, 2021; 257-265.

Adicionalmente se utilizan en la Química Verde para diseñar procesos más eficientes y sostenibles, optimizando las condiciones de temperatura, presión y concentración de reactivos para maximizar el rendimiento de una reacción y minimizar el impacto ambiental. Lo anterior permite comprender la implicación de las leyes de la termodinámica en las reacciones químicas. La primera ley de la termodinámica indica que “La energía no puede producirse ni destruirse, sólo puede transferirse o convertirse de una forma a otra”, dicho de otra forma, la energía de un sistema cerrado se conserva.² En una reacción química esto puede interpretarse como que la energía absorbida o liberada durante una reacción química debe permanecer en equilibrio con el entorno. Así, durante una reacción química la energía del sistema va a estar cambiando de forma, debido a que los enlaces de los átomos en cada reactivo se reorganizan, dando lugar a la formación de nuevas moléculas las cuales pueden tener enlaces más o menos requerimientos energéticos, comparados con las moléculas iniciales de las que provenían. Si dichos enlaces son más energéticos, la energía debe de provenir de alguna fuente externa, a estos se les conoce como procesos endotérmicos. En el caso de que los enlaces sean menos energéticos, el sistema tiende a liberar parte de su energía y se trata de un proceso exotérmico. En el contexto de la Química Verde, esta ley implica que se debe minimizar el uso de energía en las reacciones y en los procesos industriales, y que se deben buscar formas más sostenibles de producción que minimicen la generación de residuos y maximicen el uso de recursos renovables, con el objetivo de promover prácticas más sostenibles en la industria química y en la sociedad en general.³

La segunda ley de la termodinámica establece que la entropía, la cual coloquialmente se asocia con el grado de desorden de un sistema cerrado, tiene la tendencia de aumentar conforme transcurre el tiempo. Esto lo podemos entender como que un sistema desordenado presenta un mayor número de microestados posibles en comparación a un sistema ordenado. Además, es un indicativo de que reacciones espontáneas son el resultado del incremento en la entropía del sistema. Como ejemplo podemos mencionar cuando algún sistema químico se degrada es el resultado de un incremento de su entropía. Lo anterior nos coloca en un escenario donde debemos minimizar la cantidad de desechos y residuos generados en los procesos químicos, ya que estos representan una pérdida de energía y materiales útiles. La Química Verde se basa en la optimización de los procesos químicos para reducir al máximo la generación de productos secundarios indeseados, maximizando la eficiencia

2. Struchtrup, H., The First Law of Thermodynamics. In *Thermodynamics and Energy Conversion*, Struchtrup, H., Ed. Springer Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 2014, 33-53.
3. The First Law of Thermodynamics. In *Modern Thermodynamics*, 2014; 45-88.

en el uso de materias primas y energía. De esta manera, se busca cumplir con los principios de la segunda ley de la termodinámica para minimizar las pérdidas y maximizar la eficiencia en los procesos químicos. La segunda ley de la termodinámica y la Química Verde van de la mano, ya que ambas se enfocan en optimizar los procesos para garantizar la sostenibilidad y eficiencia en la utilización de los recursos naturales.⁴

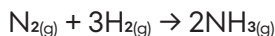
La tercera ley de la termodinámica establece que la entropía de un sistema puro y cristalino a la temperatura de 0 K (-273.15 °C) es igual a cero. Con base en lo anterior, esta ley es fundamental en la Química Verde, ya que establece límites en la eficiencia de los procesos químicos y la producción de residuos. Explora alternativas para diseñar procesos que operen a temperaturas cercanas a la temperatura ambiente y evitar condiciones extremas que requieran grandes cantidades de energía para mantenerse. De igual forma optimiza el diseño de rutas sintéticas que operen en condiciones suaves y que minimicen la formación de subproductos no deseados. Al considerar la tercera ley de la termodinámica, se busca desarrollar catalizadores que funcionen eficientemente a temperaturas moderadas y que minimicen la energía de activación requerida para la reacción. Adicionalmente permite diseñar sistemas de reciclaje que operen de manera eficiente y que minimicen las pérdidas de energía y materiales.

Resulta crucial el comprender y determinar aquellos procesos químicos que pueden producirse de forma espontánea. Por consiguiente, resulta imperante la determinación de los parámetros termodinámicos que dan lugar a una reacción, estos tienen implicaciones directas en la determinación de la viabilidad y predicción de una reacción. Dicho lo anterior, es necesario que antes de realizar una reacción de Química Verde se tenga en cuenta los parámetros termodinámicos que intervienen durante el proceso de una reacción:

-Entalpía (H): Función termodinámica que se utiliza para describir la energía total de un sistema. En la Química Verde, uno de los requisitos fundamentales que se busca es que las reacciones químicas minimicen los requisitos energéticos y maximicen la eficiencia del proceso. Esto se logra mediante el diseño de rutas sintéticas más eficientes y el uso de catalizadores que reduzcan la energía de activación de las reacciones.

4. Schlitter, J., The Second Law of Thermodynamics as a Force Law. *Entropy* (Basel, Switzerland) **2018**, 20 (4).

Un ejemplo de ello es la síntesis química en donde para disminuir la entalpía de una reacción, como en la producción de amoníaco (NH_3) mediante el proceso de síntesis de Haber-Bosch, donde se combina nitrógeno gaseoso (N_2) e hidrógeno gaseoso (H_2) según la siguiente reacción química:



Esta reacción es exotérmica, lo que significa que libera calor al entorno y tiene una entalpía negativa. Sin embargo, la entalpía estándar de formación del amoníaco es negativa, lo que indica que la formación de amoníaco es termodinámicamente favorable en condiciones estándar de presión y temperatura. Esto permite que las rutas sintéticas minimicen el consumo de energía.⁵

-Eficiencia energética: Este es uno de los parámetros fundamentales de la Química Verde. Se refiere a cuánta energía se invirtió y se consumió en una reacción. En todas las reacciones químicas los aspectos que deben considerarse son: la entalpía y la cinética de la reacción. En muchos la eficiencia energética se mejora mediante la recuperación y reutilización de la energía liberada (calor) durante el proceso de una reacción. La entalpía de formación está relacionada con la cantidad de energía liberada o absorbida durante el proceso de formación de una sustancia a partir de los elementos constituyentes en su forma más estable, a una presión y temperaturas determinadas. Esto implica dos tipos de proceso, el proceso endotérmico en el cual se absorbe energía en forma de calor del entorno, lo que resulta en un aumento de la energía interna del sistema. Esto suele manifestarse como un aumento de la temperatura del sistema. Ejemplos comunes de procesos endotérmicos incluyen la evaporación del agua, la fusión del hielo y muchas reacciones químicas que absorben calor.

Por otro lado, en un proceso endergónico se absorbe energía en forma de trabajo o energía potencial del entorno. En términos químicos, un proceso endergónico es aquel en el cual la energía libre de Gibbs (ΔG) es positiva, lo que significa que se requiere una aportación de energía externa para que la reacción ocurra espontáneamente. Por ejemplo, la síntesis de moléculas complejas a partir de moléculas más simples, como la fotosíntesis en plantas.⁶

5. Keifer, D., Enthalpy and the Second Law of Thermodynamics. *Journal of Chemical Education* **2019**, 96, 1407-1411.
6. Liu, L.; Fan, X.; Zhang, Y.; Zhang, S.; Wang, W.; Jin, X.; Tang, B., Novel bio-based phase change materials with high enthalpy for thermal energy storage. *Applied Energy* **2020**, 268, 114979.

-Equilibrio químico (K_{eq}): El estado final de las reacciones químicas se encuentra determinado por la cantidad de reactivos que fue posible consumir y la cantidad de productos que fue posible producir, a dicho estado final se le conoce como Equilibrio químico. Desde el punto de vista matemático esas cantidades se pueden expresar prácticamente en cualquier unidad de masa o concentración y cuando se observa que no varían es posible calcular un valor que las asocia a todas: la constante de equilibrio (K). Más que un resultado numérico, el equilibrio químico es un estado que informa fielmente los requerimientos energéticos y reactivos para que una transformación se lleve a cabo; está determinado por aspectos como la solubilidad de los componentes de la reacción en el medio, la concentración, qué tanta energía se requiere para el proceso y la reactividad intrínseca de los componentes en la reacción. En Química Verde es importante determinar los parámetros en los cuales se pueden tener las condiciones de reacción y de equilibrio, para que ocurra la formación de un producto, tratando de evitar al máximo la formación de productos secundarios.⁷

Las estrategias para manipular el equilibrio químico

La manipulación del equilibrio químico es importante en la industria química y en la síntesis de productos químicos. Algunas de estas estrategias incluyen:

-Cambio en la concentración de los reactivos o productos: Según el principio de Le Chatelier, si se altera la concentración de un reactante o producto en un sistema en equilibrio, el equilibrio se desplazará en la dirección que compense el cambio. Por ejemplo, si se aumenta la concentración de un reactante, el equilibrio se desplazará hacia la formación de más productos para compensar el aumento de reactantes.

-Cambio en la presión: En sistemas gaseosos, un cambio en la presión puede afectar el equilibrio químico si el número total de moles de gas en los reactantes y productos es diferente. Si se aumenta la presión, el equilibrio se desplazará hacia el lado con menos moles de gas para compensar el cambio y viceversa.

-Cambio en la temperatura: El cambio en la temperatura también puede afectar el equilibrio químico. En general, un aumento de la temperatura favorecerá la reacción endotérmica (que absorbe calor) y un descenso de la temperatura favorecerá la reacción exotérmica (que libera calor). Sin embargo, esto depende de la entalpía de la reacción.

7. Novak, I., Geometrical Description of Chemical Equilibrium and Le Chatelier's Principle: Two-Component Systems. *Journal of Chemical Education* 2018, 95, 84-87.

-Uso de catalizadores: Los catalizadores pueden acelerar o inhibir tanto la reacción directa como la inversa, pero no afectan el equilibrio químico en sí. Sin embargo, al aumentar la velocidad de las reacciones, pueden ayudar al sistema a alcanzar el equilibrio más rápidamente. Muchas reacciones en las que se involucran dos productos pudieran parecer no selectivas a tiempos cortos de reacción, sin embargo, si se dejan reaccionando un tiempo prolongado o se les incorpora un catalizador, pueden orientarse hacia la acumulación de un producto de forma preferencial.

-Uso de membranas semipermeables: En sistemas que contienen solutos en solución, el uso de membranas semipermeables puede permitir que ciertos iones o moléculas atraviesen la membrana mientras que otros no. Esto puede ayudar a mantener constantes las concentraciones de ciertas especies y, por lo tanto, afectar el equilibrio químico.

-Selección del medio: Ha sido posible demostrar que para reacciones que generan dos o más productos en los que solo uno de ellos sea de interés, la elección de un disolvente donde este último tenga buena afinidad propiciará su acumulación. Esta selectividad (que puede ocurrir en diferentes niveles: regioselectividad, quimioselectividad o estereoselectividad) también se puede alcanzar eligiendo adecuadamente fuentes energéticas de activación como microondas, ultrasonido, irradiación o enzimas.

Lo anterior implica cambiar las condiciones del sistema para desplazar el equilibrio en la dirección deseada y obtener el rendimiento máximo de la reacción. Estas estrategias son fundamentales en la síntesis de productos químicos y en la industria química en general. Esto permite maximizar el rendimiento, optimizando la eficiencia energética.⁸

-Cinética química: Esta se refiere al estudio de la velocidad a la cual se realiza una reacción química, y la influencia que tienen los factores que la rodean. Algunos de los factores que pueden afectarla son temperatura, concentración de reactivos, presión y el uso de catalizadores. Siendo estos últimos los encargados de acelerar las reacciones y de reducir los tiempos de reacción, lo cual sólo es posible si se conocen los mecanismos implicados en una reacción química. Por otro lado, en

8. de Nevers, N. Chemical Equilibrium. In *Physical and Chemical Equilibrium for Chemical Engineers*, 2012; pp 217-242. <https://doi.org/10.1002/9781118135341.ch12>

Química Verde, suele analizarse la influencia del tiempo de reacción dependiendo de los disolventes utilizados y así determinar cómo pueden influir en la obtención de un producto. Algunos de estos procesos involucran reacciones en interfaces como puede ser la síntesis enzimáticas, catálisis heterogénea o conversiones de biomasa.⁹ En la actualidad, gran parte de los estudios para determinar estos parámetros se realizan mediante el modelado matemático y diversas herramientas de simulación molecular, ya que permiten entender cómo realizar estos procesos de la forma más eficiente.⁹

-Entropía: La entropía usualmente se asocia con la cantidad de desorden o aleatoriedad de un sistema. Sin embargo, de acuerdo con la física estadística, la entropía es una cantidad extensiva que se puede adicionar a un sistema en forma de calor y que hace que el sistema tenga un incremento en los posibles estados que puede adquirir, por lo que la entropía se puede relacionar con la distribución de energía en un sistema.¹⁰ En una reacción química, el cambio de la entropía se calcula a partir de las diferencias en la entropía de los productos y los reactivos. Esto es, si el número de moléculas aumenta en la reacción, el número de estados posibles hará que la entropía del sistema aumente, por lo tanto, el cambio en la entropía será positivo. De acuerdo con la segunda ley de la termodinámica en todos los sistemas aislados, la entropía tiende a aumentar con el tiempo. Es por esto por lo que, las reacciones espontáneas tienden a ser más eficientes al observarse cambios positivos en la entropía.¹¹ En la Química Verde, se busca es el uso de materiales que aumenten la entropía del sistema y que optimicen el uso de la energía, incluyendo la disminución en la generación de desechos tóxicos.¹² Para lograr esto, es importante diseñar, sintetizar y utilizar materiales que aumenten la entropía del sistema, ya que esto puede conducir a una mayor eficiencia en los procesos químicos y a una reducción en la cantidad de energía necesaria para llevar a cabo dichos procesos.¹³ Además, al optimizar el uso de la energía, se reduce la dependencia de fuentes de

9. Peer Reviewed: Design Through the 12 Principles of Green Engineering. *Environmental Science & Technology* **2003**, *37*, 94A-101A.
10. Li, W.; Xie, D.; Li, D.; Zhang, Y.; Gao, Y.; Liaw, P. K., Mechanical behavior of high-entropy alloys. *Progress in Materials Science* **2021**, *118*, 100777.
11. Deltete, R. J., Entropy in Chemistry. In *Philosophy of Chemistry*, Woody, A. I.; Hendry, R. F.; Needham, P., Eds. North-Holland: Amsterdam, **2012**; *6*, 495-506.
12. Ma, Y.; Ma, Y.; Wang, Q.; Schweidler, S.; Botros, M.; Fu, T.; Hahn, H.; Brezesinski, T.; Breitung, B., High-entropy energy materials: challenges and new opportunities. *Energy & Environmental Science* **2021**, *14*, 2883-2905.
13. Amiri, A.; Shahbazian-Yassar, R., Recent progress of high-entropy materials for energy storage and conversion. *Journal of Materials Chemistry A* **2021**, *9*, 782-823.

energía no renovables, como los combustibles fósiles, lo que contribuye a la sostenibilidad a largo plazo. Esto promueve una química más sostenible y respetuosa con el medio ambiente.¹⁴ Un ejemplo de este principio se basa en la posibilidad de formar iones enolato empleando hidruros como base; en esta reacción el ácido conjugado es un gas, que se libera del medio impidiendo que la reacción inversa se lleve a cabo, cuando se encuentran las condiciones óptimas de operación para este tipo de reacciones es relativamente sencillo, económico y rápido estandarizarlas. Existe también la posibilidad de que uno de los productos de una reacción se transforme espontáneamente y ya no sea tan sencillo emplearlo en la reacción inversa.

-Energía Libre de Gibbs (G): En general la energía libre de Gibbs es una herramienta de la termodinámica química que permite entender la espontaneidad de los procesos químicos y su comportamiento en el equilibrio. Dicho de otra forma, describe la cantidad de energía disponible para realizar trabajo útil en un sistema químico a temperatura y presión constantes.

Está definida como:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

En donde:

ΔG : es el cambio en la energía libre de Gibbs

ΔH : es el cambio en la entalpía del sistema.

T: temperatura absoluta de Kelvin

ΔS : es la variación de la entropía del sistema.

Cuando ΔG es menor que 0, es un indicativo de que el proceso puede ocurrir de forma espontánea. Eso ocurre porque el sistema tiene menos energía libre después de ocurrida la reacción, como consecuencia de que durante la reacción se libera calor, lo que aumenta la entropía del sistema y del entorno, favoreciéndose así la espontaneidad de la reacción. Mientras que, si ΔG mayor que cero, es necesario proporcionar energía al sistema o realizar trabajo externo para que se lleve a cabo la reacción. En el caso en el cual no hay cambio en el valor de ΔG , indica que el sistema está en equilibrio.¹⁵

14. Oluah, C.; Akinlabi, E. T.; Njoku, H. O., Selection of phase change material for improved performance of Trombe wall systems using the entropy weight and TOPSIS methodology. *Energy and Buildings* **2020**, *217*, 109967.
15. Salike, S.; Bhatt, N., Thermodynamically consistent estimation of Gibbs free energy from data: data reconciliation approach. *Bioinformatics* **2019**, *36*, 1219-1225.

Diseño de procesos termodinámicos sostenibles

Un proceso termodinámico sostenible lo podemos ejemplificar cuando hablamos de la producción de biocombustibles a partir de residuos agrícolas. En este proceso la simbiosis de los principios fundamentales de la termodinámica y de la química verde, permiten minimizar el impacto ambiental en cuanto a los procesos llevados a cabo, buscando tener eficiencia energética. Usualmente, estos métodos de producción se basan en el pretratamiento de las biomásas residuales y el empleo de energía de forma eficiente, que permita la descomposición de materiales orgánicos. Por ejemplo, se puede hacer mención del proceso de fermentación en el cual se busca transformar los azúcares en etanol mediante el uso de microorganismos aprovechando la presencia de reacciones exotérmicas que dan lugar a la liberación de energía, la cual puede reutilizarse dentro del sistema. En este proceso, los residuos pueden ser aprovechados para promover un ciclo cerrado que permita maximizar el uso de recursos.

Los nuevos procesos enfocados en el cumplimiento de los postulados de la Química Verde deben considerar un enfoque sistemático en el diseño de productos químicos para reducir el impacto ambiental, no sólo considerando cómo se utilizan las materias primas y cómo se pueden reutilizar, reciclar o re-usar estos materiales y bienes. El diseño de procesos termodinámicos sostenibles implica la creación de sistemas que maximizan la eficiencia energética, minimizan el consumo de recursos y reducen al mínimo los impactos ambientales negativos. Algunas estrategias clave para lograr esto son:

-Selección de materias primas sostenibles: Utilizar materias primas renovables y de bajo impacto ambiental puede reducir significativamente el impacto ambiental de un proceso. Esto puede incluir la utilización de materias primas de origen vegetal, recicladas o de bajo contenido de carbono.

-Optimización del diseño del proceso: Diseñar procesos que minimicen la energía y los recursos necesarios para llevar a cabo las operaciones. Esto puede incluir el diseño de sistemas de reciclaje de materiales, la optimización de los flujos de energía y materiales, y la implementación de tecnologías de recuperación de calor y energía.

-Uso eficiente de la energía: Incorporar tecnologías y prácticas que mejoren la eficiencia energética del proceso, como el uso de equipos de alta eficiencia energética, la optimización de las condiciones de operación y la implementación de sistemas de gestión energética.

-Minimización de residuos y emisiones: Reducir al mínimo la generación de residuos y emisiones mediante la implementación de prácticas de prevención de la contaminación, el uso de tecnologías de tratamiento de residuos y emisiones, y la optimización de los procesos para reducir la formación de subproductos no deseados.

-Uso de tecnologías limpias y renovables: Incorporar tecnologías limpias y renovables, como la energía solar, eólica o hidroeléctrica, puede reducir significativamente las emisiones de gases de efecto invernadero y disminuir la dependencia de los combustibles fósiles.¹⁶

-Diseño para la circularidad: Diseñar procesos que maximicen la recuperación y el reciclaje de materiales, promoviendo así la economía circular del sistema y reduciendo la dependencia de los recursos naturales finitos.¹⁸

Estrategias termodinámicas para minimizar residuos

De acuerdo con la primera ley de la termodinámica, que indica que la energía no se destruye, solo se transforma, en el concepto clave y básico en el que se basa la minimización de residuos, debido a que se busca que se maximicen los procesos de conversión de energía de los reactivos empleados, con un mínimo de pérdidas energéticas, en diversas ocasiones dan lugar a la formación de agentes secundarios no deseados los cuales pueden considerarse contaminantes. Así mismo se busca que los procesos que ocurran sean espontáneos, lo cual pudiera ser un indicativo de cambios en la energía libre de Gibbs ($\Delta G < 0$). Imagina que tienes un vaso de agua con un cubo de azúcar. Cuando colocas el cubo de azúcar en el agua, el azúcar comienza a disolverse sin que necesites hacer nada más. Este es un ejemplo de un proceso espontáneo, ya que ocurre de manera natural sin intervención externa.

Adicionalmente, en diversas circunstancias de desarrollo, síntesis o manufactura, existe una variedad de procesos donde no se pueden eliminarse completamente los residuos a la cual se le conoce como reducción de efluentes, esta se refiere a estrategias de diseño y fabricación de productos o servicios que

16. Conrad, Z.; Niles, M. T.; Neher, D. A.; Roy, E. D.; Tichenor, N. E.; Jahns, L., Relationship between food waste, diet quality, and environmental sustainability. *PloS one* **2018**, *13*, e0195405.

18. Howe, D.; Garcia-Perez, M.; Taasevigen, D.; Rainbolt, J.; Albrecht, K.; Li, H.; Wei, L.; McDonald, A.; Wolcott, M., Thermal pretreatment of a high lignin SSF digester residue to increase its softening point. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* **2019**, *142*, 103691

reducen la cantidad de residuos generados y/o reducen la toxicidad de los residuos resultantes. Con frecuencia, estos esfuerzos surgen de tendencias o productos específicos que pueden estar causando problemas en el flujo de residuos, y las medidas tomadas para evitarlos.¹⁹ Los residuos en la industria se pueden reducir mediante la reutilización de materiales, el uso de materiales alternativos menos peligrosos o la modificación de elementos de diseño y procesamiento. La minimización de los desechos o la reducción de fuentes puede tener muchas ventajas, incluida una reducción en el uso de los recursos naturales y una reducción en la toxicidad de los residuos.²⁰

Las estrategias de minimización de residuos son muy comunes en la fabricación porque ahorran recursos y reducen costos significativos. Los desarrollos en el empaque simplificado reducen el uso de materiales, la mayor eficiencia de distribución reduce el consumo de combustible y las emisiones al aire.²¹ Además, los materiales de construcción diseñados, con frecuencia se pueden fabricar con características ventajosas específicas que, cuando se toman en cuenta en el diseño estructural general, pueden reducir significativamente la masa total y el peso del material necesario para una estructura específica.²² Esto reduce la necesidad de material excesivo y los residuos relacionados con la fabricación de componentes.²³

Optimización termodinámica para mejorar la eficiencia energética

Las herramientas de la Química Verde incluyen la elección de materias primas/materiales, influye en los parámetros termodinámicos, debido a que se promueve el uso de procesos eficientes, que necesiten un menor gasto energético y sobre todo sostenible, para tener un impacto ambiental positivo. Por lo que se busca que los sistemas tengan una energía de activación y una entalpía reducida. Para esto, se promueve el uso de biomasa, reactivos y disolventes alternativos como líquidos iónicos, fluidos supercríticos y disolventes eutécticos, química analítica de procesos y catalizadores alternativos

19. Lamba, P.; Kaur, D. P.; Raj, S.; Sorout, J., Recycling/reuse of plastic waste as construction material for sustainable development: a review. *Environmental Science and Pollution Research* **2022**, *29*, 86156-86179.
20. Khalid, M. Y.; Arif, Z. U.; Ahmed, W.; Arshad, H., Recent trends in recycling and reusing techniques of different plastic polymers and their composite materials. *Sustainable Materials and Technologies* **2022**, *31*, e00382.
21. Freitas, L. C.; Barbosa, J. R.; da Costa, A. L. C.; Bezerra, F. W. F.; Pinto, R. H. H.; Carvalho Junior, R. N. d., From waste to sustainable industry: How can agro-industrial wastes help in the development of new products? *Resources, Conservation and Recycling* **2021**, *169*, 105466.
22. Conrad, Z.; Niles, M. T.; Neher, D. A.; Roy, E. D.; Tichenor, N. E.; Jahns, L., Relationship between food waste, diet quality, and environmental sustainability. *PloS one* **2018**, *13*, e0195405.
23. Howe, D.; Garcia-Perez, M.; Taasevigen, D.; Rainbolt, J.; Albrecht, K.; Li, H.; Wei, L.; McDonald, A.; Wolcott, M., Thermal pretreatment of a high lignin SSF digester residue to increase its softening point. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* **2019**, *142*, 103691

como enzimas u organocatalizadores.²⁵ En el esquema 1, se muestran los pasos a seguir para el desarrollo de un proceso en los cuales la elección adecuada de los parámetros termodinámicos permite la eficacia y minimización de desechos a lo largo del ciclo de vida de un producto químico. El fondo gris del esquema destaca la relevancia de los principios de la Química Verde.²⁴ La transición de industrias enteras también requiere superar la resistencia al cambio e integrar la experiencia multidisciplinaria. Lo anterior fomenta la innovación, generando nuevos descubrimientos para el desarrollo de productos biosustentables.²⁵

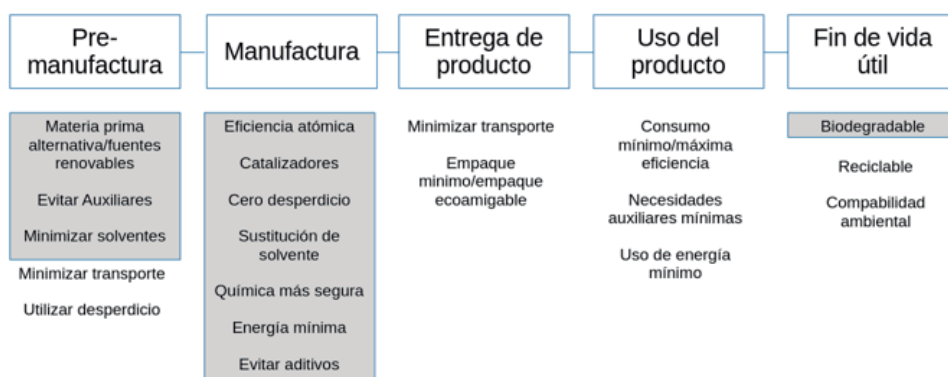


Figura 1. Minimización de residuos a lo largo del ciclo de vida de un producto químico.

Procesos verdes basados en consideraciones termodinámicas

El diseño de procesos verdes es fundamental para mitigar el impacto ambiental de las actividades industriales. A través de casos de estudio concretos, se puede observar cómo la integración de consideraciones termodinámicas en el diseño de procesos puede llevar a soluciones más sostenibles y respetuosas con el medio ambiente. Estos casos de estudio permiten identificar oportunidades de mejora en la eficiencia energética, la minimización de residuos y la reducción de emisiones, entre otros aspectos clave. En esta sección, se presentan algunos ejemplos de diseño de procesos verdes basados en consideraciones termodinámicas, destacando los beneficios y desafíos asociados a esta aproximación.

24. Chandel, L. K.; Bhadauria, S.; Mandloi, D., An overview of Green Chemistry and its applications. **2023**, 10, g845-g853.

25. Trost, B. M.; Crawley, M. L., Asymmetric transition-metal-catalyzed allylic alkylations: applications in total synthesis. *Chemical reviews* **2003**, 103, 2921-44.

Gasificación de agua supercrítica

El agua supercrítica se refiere a un estado en el que el agua se somete a condiciones más allá de su punto crítico que es 374 °C y presión de 22.1 MPa, en dichas condiciones el agua presenta propiedades que difieren del su comportamiento gaseoso o líquido debido a una perturbación en la red de enlaces de hidrógeno de las diferentes moléculas, esto permiten que se pueda mezclar con solventes no polares, así como un incremento en la movilidad de iones.²⁶

La gasificación de agua supercrítica es una tecnología prometedora para la conversión eficiente de biomasa y residuos orgánicos en gases combustibles y otros productos químicos útiles. Aprovecha las propiedades únicas del agua supercrítica para mejorar la eficiencia de las reacciones y reducir la formación de residuos, alineándose con los principios de la química verde y la sostenibilidad. Este proceso tiene importancia en la producción de hidrógeno, ya que ofrece ventajas con respecto a otros métodos de producción de este gas. En primer lugar, la gasificación de agua supercrítica permite obtener un alto rendimiento en la producción de hidrógeno, con un menor consumo de energía. Además, este proceso es eficiente y puede realizarse a altas temperaturas y presiones, lo que facilita la obtención de hidrógeno de alta pureza.²⁷

Se determina como un proceso base aquel que puede ser eficiente y efectivo en cierta medida, pero puede no ser óptimo en términos de costos, eficiencia energética, calidad del producto, impacto ambiental u otros criterios de rendimiento. Por el contrario, el proceso optimizado es el resultado de la aplicación de técnicas de optimización, análisis de datos y mejoras continuas al proceso base. El objetivo es maximizar la eficiencia, minimizar los costos, mejorar la calidad del producto y reducir el impacto ambiental. Esto se logra mediante la identificación y eliminación de cuellos de botella, la optimización de parámetros de operación, la implementación de tecnologías más eficientes y limpias, y la incorporación de prácticas de gestión de la calidad y la sostenibilidad.

26. Chen, J.; Liu, Y.; Wu, X.; E, J.; Leng, E.; Zhang, F.; Liao, G., Thermodynamic, environmental analysis and comprehensive evaluation of supercritical water gasification of biomass fermentation residue. *Journal of Cleaner Production* **2022**, *361*, 132126.
27. Cao, W.; Guo, L.; Yan, X.; Zhang, D.; Yao, X., Assessment of sugarcane bagasse gasification in supercritical water for hydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy* **2018**, *43*, 13711-13719.

Por ejemplo, un proceso donde se tomó como materia prima un residuo procedente de un proceso de sacarificación y fermentación simultáneas (simultaneous saccharification and fermentation, SSF) utilizando el rastrojo de maíz como material para estudiar el rendimiento termodinámico y medioambiental de la gasificación de agua supercrítica para la producción de hidrógeno. El avance tecnológico ha permitido que software como Aspen Plus, un simulador de procesos químicos que permite la integración de diferentes operaciones unitarias que se encuentran en la industria dentro de un mismo entorno, analice sistemas de gasificación de agua supercrítica de desechos SSF (simultaneous saccharification and fermentation-supercritical water gasification, SSF-SCWG). Se estudió el desempeño de la gasificación y el desempeño termodinámico del sistema en diferentes condiciones de funcionamiento. Se utilizaron temperaturas (600, 650 y 700 °C) y concentraciones de desechos (5, 10 y 15 %) como variables independientes. Se propusieron dos métodos para mejorar la eficiencia energética: el ciclo orgánico Rankine de reciclaje de calor residual y el ciclo de recalentamiento. Los hallazgos indican que el aumento de la temperatura y la reducción de la concentración de desechos aumentan la tasa de producción de hidrógeno.²⁷

Cuando la temperatura de reacción es de 700 °C y la concentración de masa es de 15 %, el sistema tiene la mayor eficiencia energética del 36.8 % y la eficiencia de exergía del 39.5 % entre todas las condiciones de trabajo. En consecuencia, la incorporación del ciclo de recalentamiento y del ciclo Rankine orgánico mejoraron la eficiencia energética en un 5.68 % y un 9.2 %, respectivamente. El estudio del ciclo de vida se aplica a la etapa de funcionamiento del sistema SSF-SCWG, y la unidad funcional es 1 tonelada de desechos SSF. Los métodos de evaluación de impacto de los puntos finales e intermedios se utilizaron para calcular la carga ambiental del sistema. Con un potencial de calentamiento global de -216.6 kg CO₂-eq/unidad funcional y un potencial de acidificación de -8.9 kg SO₂-eq/unidad funcional, los resultados del ciclo de vida demuestran que el sistema es respetuoso con el medio ambiente.²⁷

Finalmente, después de examinar minuciosamente los índices termodinámicos y ambientales, se empleó el método de peso de entropía (analiza sistemas termodinámicos donde se asignan pesos a diferentes componentes de acuerdo con su contribución a la entropía total del sistema) y la técnica de preferencia de orden por similitud (análisis útil cuando se enfrentan

múltiples alternativas y se debe tomar una decisión en función de una evaluación subjetiva). Esto permite tomar una decisión multiatributo para todas las condiciones de trabajo, lo que resultó en las condiciones ideales para el sistema SSF-SCWG.^{27,28} En resumen, la gasificación de agua supercrítica es un proceso clave para la producción sostenible de hidrógeno, un combustible limpio y versátil que puede contribuir de manera significativa a la lucha contra el cambio climático.²⁹ Esto promueve el uso de fuentes renovables de energía, como la energía solar o eólica, para obtener el hidrógeno de forma más limpia y sostenible.^{29,30,31,32,33}

Integración de la termodinámica y energías renovables

El conocimiento de la influencia de los parámetros termodinámicos permite el diseño y la optimización de nuevas tecnologías dirigidas a la creación de energías renovables, lo cual es esencial ya que permite desarrollar procesos eficientes, sostenibles y sobre todo económicos. La manipulación adecuada de estos favorece el aprovechamiento en cuanto al rendimiento energético, minimizando residuos, además de reducir el impacto ambiental. Un claro ejemplo es la electrificación de la industria química, un desafío importante que implica el uso directo de fuentes de energía renovables (*renewable energy sources*, RES). Se debería utilizar energía eléctrica de fuentes renovables en lugar de calor producido por combustibles fósiles para ejecutar operaciones. Esto no es solo un cambio tecnológico en el suministro de energía para la transformación química, sino que también provoca un cambio completo en la ingeniería del diseño de procesos químicos, donde la recuperación y transferencia de calor son elementos de diseño importantes y uno de los factores clave que determinan la necesidad de tener plantas grandes.³⁴

28. Chen, J.; Wang, Q.; Xu, Z.; E, J.; Leng, E.; Zhang, F.; Liao, G., Process in supercritical water gasification of coal: A review of fundamentals, mechanisms, catalysts and element transformation. *Energy Conversion and Management* 2021, **237**, 114122.
29. Chen, J.; Xu, W.; Zuo, H.; Wu, X.; E, J.; Wang, T.; Zhang, F.; Lu, N., System development and environmental performance analysis of a solar-driven supercritical water gasification pilot plant for hydrogen production using life cycle assessment approach. *Energy Conversion and Management* 2019, **184**, 60-73.
30. Montiel-Bohórquez, N. D.; Pérez, J. F., Generación de Energía a partir de Residuos Sólidos Urbanos. Estrategias Termodinámicas para Optimizar el Desempeño de Centrales Térmicas. *Información tecnológica* 2019, **30**, 273-284.
31. Mendiburu, A.; Roberts, J.; Carvalho, J.; Silveira, J., Thermodynamic analysis and comparison of downdraft gasifiers integrated with gas turbine, spark and compression ignition engines for distributed power generation. *Applied Thermal Engineering* 2014, **66**, 290-297.
32. Vaezi, M.; Passandideh-Fard, M.; Moghiman, M.; Charmchi, M., On a methodology for selecting biomass materials for gasification purposes. *Fuel Processing Technology* 2012, **98**, 74-81.
33. Yang, Y. B.; Sharifi, V. N.; Swithenbank, J., Converting moving-grate incineration from combustion to gasification – Numerical simulation of the burning characteristics. *Waste Management* 2007, **27**, 645-655.
34. Harris, H. H., Review of Chemical Energy Storage. *Journal of Chemical Education* 2015, **92**, 1781-1781.

La comprensión de las leyes de la termodinámica, influyen significativamente en la evaluación acerca la eficacia, sostenibilidad y viabilidad de la incorporación de energía renovables en procesos químicos. Por ejemplo, en la producción de hidrógeno mediante la electrólisis de agua empleando energía solar se busca que la energía libre de Gibbs sea negativa para que el proceso ocurra de forma eficiente. Mientras que, el conocimiento de la entalpía del sistema permite conocer si el sistema está optimizado. Parámetros como la energía libre de Gibbs (ΔG), cambio de entalpía (ΔH) y cambio de entropía (ΔS) de un sistema, son fundamentales para determinar si la energía empleada es transformada de forma efectiva en algún otro tipo de energía almacenada, con la posibilidad de posteriormente liberar la energía ganada sin descomponerse, esto acompañado de una alta eficiencia energética, con una generación mínima de residuos.

En resumen, la termodinámica permite cuantificar y mejorar la eficiencia de las energías renovables, asegurando un menor gasto energético y un impacto ambiental positivo. Las energías renovables son fuentes de energía que se regeneran de manera natural y pueden ser utilizadas de forma continua sin causar daño al medio ambiente, como alternativas más limpias y sostenibles a los combustibles fósiles, ya que generan menos emisiones de gases de efecto invernadero y contribuyen a la reducción del cambio climático.³⁵

La combinación de energías renovables y Química Verde puede jugar un papel importante en la transición hacia una economía más sostenible y respetuosa con el medio ambiente.³⁶ Al utilizar fuentes de energía limpias y producir productos químicos de manera más sostenible, podemos reducir nuestra dependencia de los recursos no renovables, disminuir la contaminación ambiental y promover el desarrollo sostenible a nivel global.³⁵⁻³⁶

Por lo tanto, la integración de RES en la producción química vuelve a provocar grandes cambios tecnológicos y científicos, por lo que los catalizadores, los reactores, las operaciones tienen que ser completamente rediseñados. Existen diferentes maneras en que los RES pueden ser acoplados a la producción química: uso de electrones (energía eléctrica producida a partir de fuentes renovables) en procesos electrocatalíticos o de plasma no térmicos, y uso de fotones en procesos fotocatalíticos.^{37,38}

35. Zuin, V. G.; Eilks, I.; Elschami, M.; Kümmerer, K., Education in green chemistry and in sustainable chemistry: perspectives towards sustainability. *Green Chemistry* **2021**, *23*, 1594-1608.

36. Sheldon, R. A.; Bode, M. L.; Akakios, S. G., Metrics of green chemistry: Waste minimization. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry* **2022**, *33*, 100569.

37. Navarrete Muñoz, A.; Centi, G.; Bogaerts, A.; Martín, Á.; York, A.; Stefanidis, G., Harvesting renewable energy for CO₂ catalysis. *Energy Technology* **2016**, *5*.

38. Bensaid, S.; Centi, G.; Garrone, E.; Perathoner, S.; Saracco, G., Towards Artificial Leaves for Solar Hydrogen and Fuels from Carbon Dioxide. *ChemSusChem* **2012**, *5*, 500-521.

Algunas formas en que se puede lograr la integración de energía renovable en procesos químicos incluyen:

- **Energía solar y eólica:** La energía solar y eólica pueden ser utilizadas para generar electricidad que luego se puede utilizar en los procesos químicos. Además, la energía solar también puede ser aprovechada directamente para proporcionar calor en procesos de calentamiento.³⁵

- **Biomasa:** La biomasa puede ser utilizada como fuente de energía renovable para la generación de calor o electricidad en procesos químicos. También puede ser convertida en biocombustibles como el biogás, el bioetanol y el biodiésel, que pueden sustituir a los combustibles fósiles en los procesos de combustión.³⁵ La termodinámica se aplica en la conversión de energía solar en electricidad y calor. Por ejemplo, la primera ley de la termodinámica, trata de la conservación de la energía, y se aplica en la conversión de la energía solar en electricidad mediante celdas fotovoltaicas. La eficiencia de este proceso está determinada por la cantidad de energía solar que se convierte en energía eléctrica útil. Adicionalmente en los sistemas de energía solar térmica, la energía del sol se convierte en calor.³⁶ La eficiencia de estos sistemas depende de la capacidad de capturar y utilizar el calor, que es analizada mediante la segunda ley de la termodinámica, enfocada en la entropía y la eficiencia térmica.

- **Hidroeléctrica:** La energía hidroeléctrica puede ser utilizada para generar electricidad, que luego puede ser utilizada en los procesos químicos. Las plantas de energía hidroeléctrica pueden proporcionar una fuente de energía renovable constante y confiable, convirtiendo la energía potencial del agua almacenada en un embalse en energía cinética al hacerla fluir a través de turbinas. La primera ley de la termodinámica ayuda a determinar la eficiencia de esta conversión de energía potencial a energía eléctrica, mientras que la segunda ley de la termodinámica también es relevante, ya que define la eficiencia máxima teórica de los generadores y la gestión de la entropía en el sistema hidráulico.

- **Geotérmica:** La energía geotérmica, que proviene del calor del interior de la Tierra, puede ser utilizada para proporcionar calor en procesos químicos que requieran altas temperaturas. La primera ley de la termodinámica se aplica al calcular el calor extraído y convertido en energía eléctrica o calor utilizable. Adicionalmente con la aplicación de la segunda ley de la termodinámica permite estudiar el diseño de ciclos de generación de energía geotérmica (como los ciclos Rankine y Kalina), que buscan maximizar la eficiencia en la conversión del calor geotérmico en electricidad, gestionando la entropía y las pérdidas térmicas.³⁶⁻³⁹

Termodinámica y fotoelectrocatalisis para la producción de hidrógeno verde

En comparación con la fotocatalisis, la fotoelectrocatalisis ha demostrado una mayor eficacia de degradación de los contaminantes. Un ejemplo es el reactor fotoelectrocatalítico (photo-electrocatalytic, PEC)⁴⁰ base para la creación de dispositivos futuros como la hoja artificial, dispositivo inspirado en la fotosíntesis de las plantas para imitar su capacidad para convertir la luz solar en energía química utilizable, como la producción de combustibles o productos químicos. Como se muestra en la **Figura 2**, los electrones en el contraelectrodo y en la banda de conducción (CB) atacan a los iones H⁺ para generar H₂, mientras que los huecos en la banda de valencia (VB) pueden reaccionar con el agua para producir oxígeno al mismo tiempo, este es fundamento general de un reactor PEC. Estos dispositivos podrían desempeñar un papel crucial en la transición hacia una economía más verde y basada en energías renovables.⁴¹

39. Perathoner, S.; Centi, G., Catalysis for solar-driven chemistry: The role of electrocatalysis. *Catalysis Today* **2018**, 330.

40. Nocera, D. G., The artificial leaf. *Accounts of chemical research* **2012**, 45, 767-76.

41. Joya, K. S.; de Groot, H. J. M., Artificial Leaf Goes Simpler and More Efficient for Solar Fuel Generation. *ChemSusChem* **2014**, 7, 73-76.

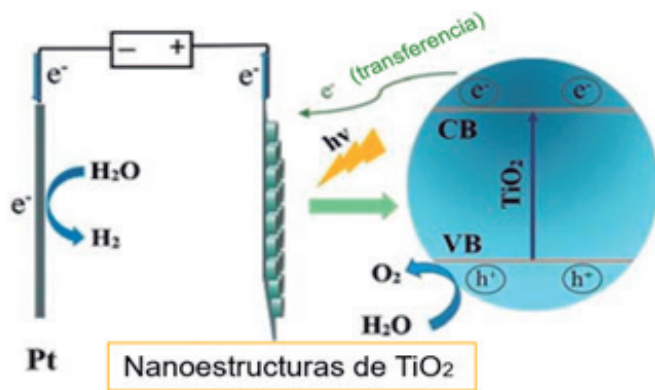


Figura 2. Mecanismo de un reactor PEC utilizando Nanoestructuras de TiO_2 para degradación fotoelectrocatalítica.

Por otro lado, teniendo en cuenta los efectos negativos que podrían ser causados por la degradación del suelo, el uso del agua o la competencia con la producción de alimentos, la transición de la química basada en los fósiles a la renovable debe ser considerada dentro de un contexto integrado de sistemas. Es esencial que se implementen procesos benignos para avanzar hacia recursos renovables. Esto implica un cambio de paradigma de los procesos lineales a los circulares (**Figura 2**). Por lo tanto, en el sector químico del mañana, los materiales que actualmente se consideran residuos de bajo valor deben tratarse como fuentes renovables. Un ejemplo es la conversión de lignina de desechos de harina de papel para producir vainillina y materias primas como catecol, fenol o guaiacoles y el uso directo de CO_2 para reemplazar parcialmente el óxido de propileno a base de petróleo en la producción de poliuretanos, lo que reduce significativamente la huella de carbono y, al mismo tiempo, mejora otros parámetros virulentos relevantes, como el consumo de energía no renovable, transporte de materias primas y productos, gestión de residuos y deforestación. Los químicos también deben tener en cuenta el "diseño de desechos", que es cómo se pueden ajustar las rutas de síntesis para evitar depender del tratamiento y eliminación de los subproductos y, en cambio, incluir decisiones de diseño que hagan que los subproductos sean útiles como materias primas (**Figura 3**).⁴²

42. Zimmerman, J. B.; Anastas, P. T., *Designing for a green chemistry future*. 2020, 367, 397-400

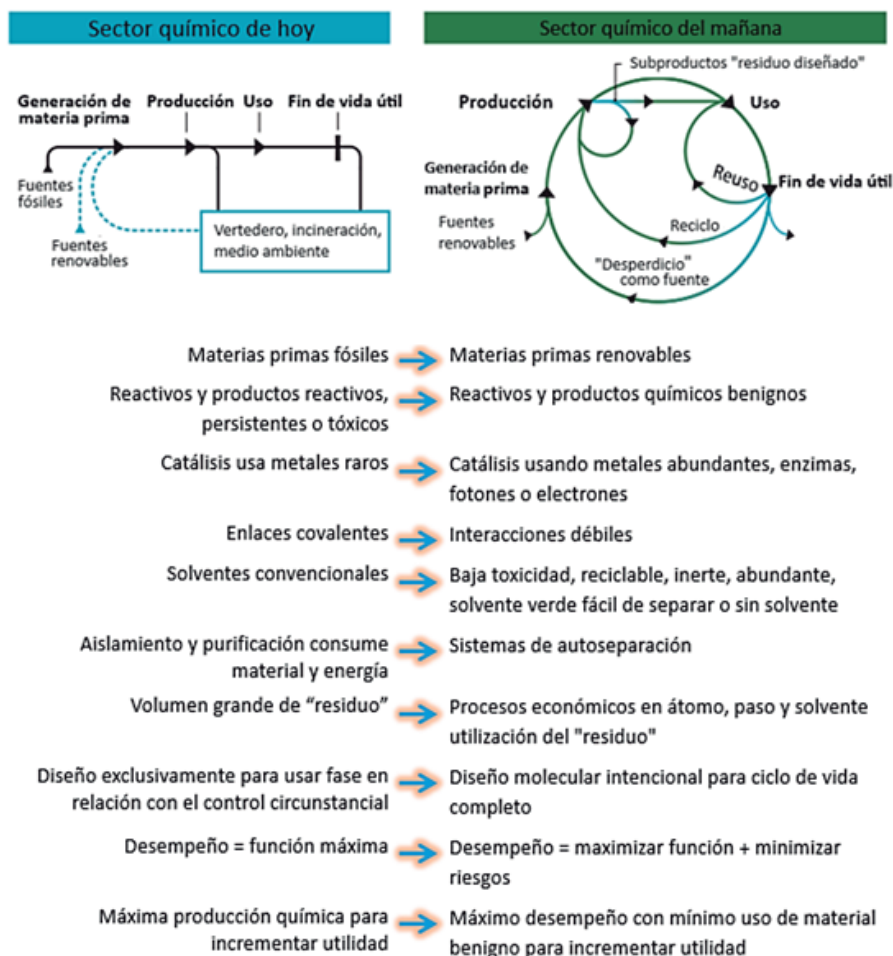


Figura 3. Características de los sectores químicos del hoy y el mañana.

El inherente agotamiento de un recurso finito como es el caso del petróleo, uno de los hidrocarburos de mayor importancia energética, no es una opción sostenible debido a su conexión con el cambio climático, esto subraya la necesidad urgente de diversificar las fuentes de energía, mejorar la eficiencia energética y desarrollar tecnologías sostenibles para asegurar un futuro energético estable y ambientalmente responsable. En definitiva, el diseño de nuevas cadenas de valor basadas en fuentes de carbono no fósiles y energía

de recursos renovables abrirá el camino a ciclos cerrados de carbón. Ya ha comenzado este cambio de paradigma, que marca nada menos que la próxima revolución industrial en la química (**Figura 4**). Para hacer mayor utilidad de las fuentes de carbono renovables y que sea cada vez más competitiva, se requerirán importantes avances científicos e innovaciones.⁴³

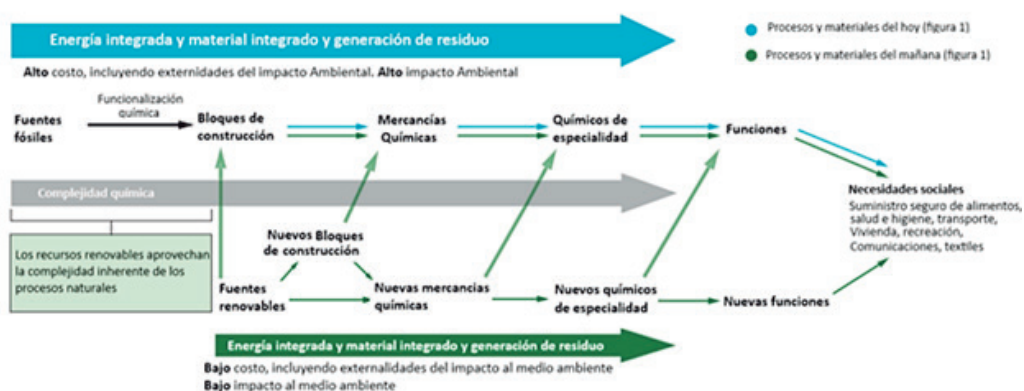


Figura 4. Beneficios de moverse de fuentes fósiles a renovables usando esquemas de transformación más verdes y cadenas de procesos en términos de energía incorporadas; materiales incorporados, incluyendo agua; generación de residuos; y costos ambientales y económicos.
(Traducida y actualizada de Niether, C., et. al. 2018)

Se están investigando activamente tecnologías de hidrógeno avanzadas⁴⁴ y procesos electroquímicos⁴⁴ para obtener la energía “decarbonizada” requerida. La biomasa lignocelulosa, una de las materias primas más abundantemente disponibles en la Tierra⁴⁵ y el CO₂⁴⁶ son fuentes de carbono en cantidades suficientes para lograr una “defosilización” de la cadena de valor química.

43. Niether, C.; Faure, S.; Bordet, A.; Deseure, J.; Chatenet, M.; Carrey, J.; Chaudret, B.; Rouet, A., Improved water electrolysis using magnetic heating of FeC–Ni core–shell nanoparticles. *Nature Energy* **2018**, *3*.
44. Wang, M.; Torbensen, K.; Salvatore, D.; Ren, S.; Joulie, D.; Dumoulin, F.; Mendoza Franzese, D.; Lassalle, B.; Işci, U.; Berlinguette, C.; Robert, M., CO₂ electrochemical catalytic reduction with a highly active cobalt phthalocyanine. *Nature Communications* **2019**, *10*.
45. Somerville, C.; Youngs, H.; Taylor, C.; Davis, S. C.; Long, S. P., Feedstocks for lignocellulosic biofuels. *Science* **2010**, *329*, 790-2.
46. Liu, Q.; Wu, L.; Jackstell, R.; Beller, M., Using carbon dioxide as a building block in organic synthesis. *Nat Commun* **2015**, *6*, 5933.

Análisis termodinámico en la conversión de energía de procesos químicos

En contraste con otros conceptos generalizados de termodinámica en los que se inicia con descripciones fenomenológicas sobre la temperatura y otras variables como la presión y el volumen, y en los que se recurre a la intuición de la vida diaria, aquí iniciaremos con especificar el concepto de la energía. Para hacerlo, apelaremos al hecho de que la materia está constituida por átomos y moléculas. La energía es una propiedad que podemos adjudicarle al estado de cualquier sistema, macroscópico o no. Es decir, existe una expresión o fórmula en términos de las variables del estado de un sistema tal que podemos calcularla y medirla. Por ejemplo, para un fluido la energía es igual a la suma de las energías cinética y potencial de todas las partículas (átomos o moléculas) que componen a dicho fluido. Si ahora suponemos que las partículas están cargadas eléctricamente y que campos magnéticos y eléctricos están presentes, el sistema será ahora el fluido más el campo electromagnético: a la energía del fluido le tenemos que añadir no sólo la energía del campo electromagnético, sino además la energía de interacción entre los anteriores. Esto implica que, si en un instante dado hiciéramos la suma de las energías y no diera igual al total, podríamos afirmar sin duda alguna que existe otro cuerpo o sistema que se está "llevando" la energía y que no lo tomamos en cuenta como parte del "todo". Es decir, estamos afirmando que la energía no puede crearse ni destruirse.⁴⁷

En la teoría de la termodinámica es común realizar una separación entre el sistema bajo estudio y el resto de los sistemas que interactúan con él. A estos últimos les llamamos "los alrededores". Por ejemplo, un fluido en un recipiente en contacto con la atmósfera puede separarse, como "sistema" al fluido y al recipiente y a la atmósfera como los "alrededores". El enunciado fundamental es que la energía del sistema más la de los alrededores se mantiene constante bajo cualquier interacción o transformación que ocurra entre ellos. La conclusión es que todos los cuerpos, incluidos los campos como los electromagnéticos, poseen una energía interna claramente especificada, de modo que cuando dos o más sistemas interactúan entre ellos, existe una transferencia de dicha cantidad tal que la suma total permanece constante. Más adelante, cuando hayamos desarrollado con más profundidad los conceptos termodinámicos, discutiremos que podemos hablar de una manera más fenomenológica del concepto de la energía sin recurrir al hecho

47. Centi, G.; Quadrelli, E. A.; Perathoner, S., Catalysis for CO₂ conversion: a key technology for rapid introduction of renewable energy in the value chain of chemical industries. *Energy & Environmental Science* 2013, 6, 1711-1731.

de que la materia está constituida por átomos y moléculas. Hemos procedido de la forma presentada para evitar vaguedades y porque la energía es un concepto universal y no exclusivo de la termodinámica. Cabe recalcar que históricamente el desarrollo de la termodinámica fue la que resaltó la importancia de la energía y su ley de conservación.^{47,48}

Electrones verdes; una mejora de la eficacia termodinámica

Las fuentes de energía juegan un papel crucial en la termodinámica, fundamentales para los procesos energéticos que impulsan la industria, la tecnología y la vida cotidiana. En la física y la química, se ha presentado en las últimas 2 décadas enormes acontecimientos científicos que ha cambiado la forma en que producimos, almacenamos y usamos la energía de manera más sostenible: algunos electrones se han convertido en verdes. Estos nuevos electrones tienen el mismo poder reductor que los viejos, se rigen por las mismas leyes de la física y la química, pero también tienen un activo nuevo: tienen la capacidad de eliminar nuestra adicción a diversos compuestos y derivados químicos con fines energéticos, como lo son los combustibles fósiles como fuente de energía y ayudar en la transición hacia un futuro menos contaminante.⁴⁹ Los electrones verdes no se limitan a los fotogenerados, ahora también fluyen en corrientes producidas por energías renovables, como la energía solar, eólica, hidroeléctrica y geotérmica, entre otras. Los mayores obstáculos para la integración de estas energías renovables en la infraestructura actual son la intermitencia y/o la distribución geográfica desigual. La química relacionada con cómo producirlos (uno por uno en una banda de valencia de un semiconductor o industrialmente a través de una turbina eólica), distribuirlos (en una celda fotovoltaica académica o en una red eléctrica (inteligente) urbana), almacenarlos y recuperarlos de nuevo desde el lugar de almacenamiento (ya sea una batería o en un enlace químico) definitivamente se ha convertido en Química Verde también.^{35,50}

47. Centi, G.; Quadrelli, E. A.; Perathoner, S., Catalysis for CO₂ conversion: a key technology for rapid introduction of renewable energy in the value chain of chemical industries. *Energy & Environmental Science* **2013**, *6*, 1711-1731.
48. Ciamician, G., THE PHOTOCHEMISTRY OF THE FUTURE. *Science* **1912**, *36*, 385-94
49. Klankermayer, J.; Leitner, W., Harnessing renewable energy with CO₂ for the chemical value chain: challenges and opportunities for catalysis. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences* **2016**, *374*, 2061.
50. Centi, G.; Iaquaniello, G.; Perathoner, S., Chemical engineering role in the use of renewable energy and alternative carbon sources in chemical production. *BMC Chemical Engineering* **2019**, *1*, 5

Además, la producción, distribución, almacenamiento y utilización de electrones incluye reacciones químicas (como reducciones de CO₂),³⁸ materiales (como electrodos, membranas, compuestos basados en compuestos orgánicos conductores y semiconductores) y reactores (como fotobioreactores, electrolizadores de óxido sólido o células solares sensibilizadas al color para citar solo tres). La Química Verde se relaciona con las ciencias químicas, los avances en las disciplinas moleculares, heterogéneas y bioquímicas, la ingeniería de procesos, las ciencias de los materiales y otras áreas que componen la plataforma de ciencia en el desafío energético.⁵⁰

La generación de energía renovable se complementará con otras formas de energía renovable, como el calor producido por la transformación eficiente de la biomasa, la energía solar térmica o el biogás y el transporte a través de biocombustibles.⁵¹ Como se mencionó anteriormente, el objetivo del campo es abordar los avances científicos necesarios en materia de materiales, procesos y, en general, química.

En la actualidad, las grandes centrales eléctricas de ciclo combinado superan el 70% de la eficiencia máxima teórica (Carnot). No obstante, estos éxitos solo se pueden alcanzar a gran escala en centrales eléctricas con una potencia superior a 300 MW. Para alcanzar el mismo nivel de rendimiento a costes viables en una escala menor, se requieren diseños innovadores. Es posible mejorar el rendimiento de la tecnología de energía a pequeña y mediana escala mediante el desarrollo de ciclos de energía, la integración de ciclos o la combinación de tecnologías existentes. El programa *New Energy Conversion Technologies* (NECT) de la Agencia de Energía y Medio Ambiente de los Países Bajos busca identificar y desarrollar nuevas tecnologías de conversión de energía y sistemas para aplicaciones de generación de energía distribuida.⁵²

Un inventario de las fuentes de energía usadas en las tecnologías existentes de conversión de energía se muestra en la **figura 5**. Las fuentes de energía terrestre, solar y atómica son normalmente excluidas de la consideración en el desarrollo de ciclos de energía.⁵³

51. Islam, M. M.; Hasanuzzaman, M.; Pandey, A. K.; Rahim, N. A., Chapter 2 - Modern energy conversion technologies. In *Energy for Sustainable Development*, Hasanuzzaman, M. D.; Rahim, N. A., Eds. Academic Press: 2020; pp 19-39.

52. Loste, N.; Roldán, E.; Giner, B., Is Green Chemistry a feasible tool for the implementation of a circular economy? *Environmental science and pollution research international* **2020**, *27*, 6215-6227

53. Lane, M. K. M.; Rudel, H. E.; Wilson, J. A.; Erythropel, H. C.; Backhaus, A.; Gilcher, E. B.; Ishii, M.; Jean, C. F.; Lin, F.; Muellers, T. D.; Wang, T.; Torres, G.; Taylor, D. E.; Anastas, P. T.; Zimmerman, J. B., Green chemistry as just chemistry. *Nature Sustainability* **2023**, *6*, 502-512.

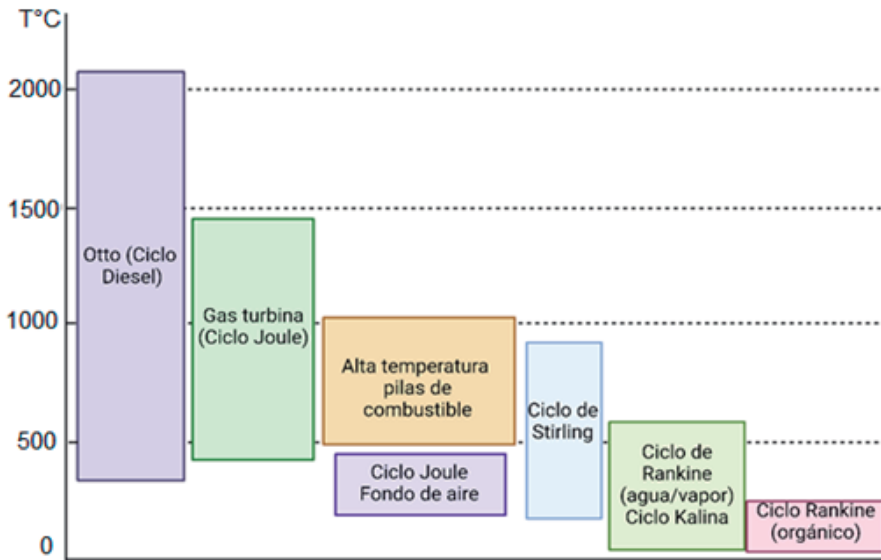


Figura 5. Fuentes de energía y tecnologías de conversión de energía

Un criterio de evaluación objetivo proporciona eficiencia en la exergía, mientras que la energía es una propiedad fundamental que se conserva en un sistema cerrado y se puede encontrar en diversas formas, la exergía es una medida de la capacidad de la energía para realizar trabajo útil y se utiliza para evaluar la eficiencia de los procesos y sistemas. Por lo tanto, las deficiencias pueden ser identificadas, cuantificadas y sugerir mejoras al analizar la pérdida de trabajo dentro de un sistema. Además, se pueden realizar comparaciones directas en términos de exergía entre los diversos tipos de energía. La **figura 6** muestra distintos parámetros de operación de los diferentes ciclos en los que se realiza la conversión de energía que aprovechan diferentes fuentes de energía para satisfacer las necesidades de energía de la sociedad en diversos contextos y aplicaciones. Las fuentes de energía y la termodinámica están intrínsecamente vinculadas. La termodinámica no solo ayuda a entender cómo se transforma y utiliza la energía, sino que también guía el desarrollo de tecnologías y estrategias para utilizar las fuentes de energía de manera más eficiente y sostenible, minimizando el impacto ambiental y mejorando la seguridad energética.⁵³

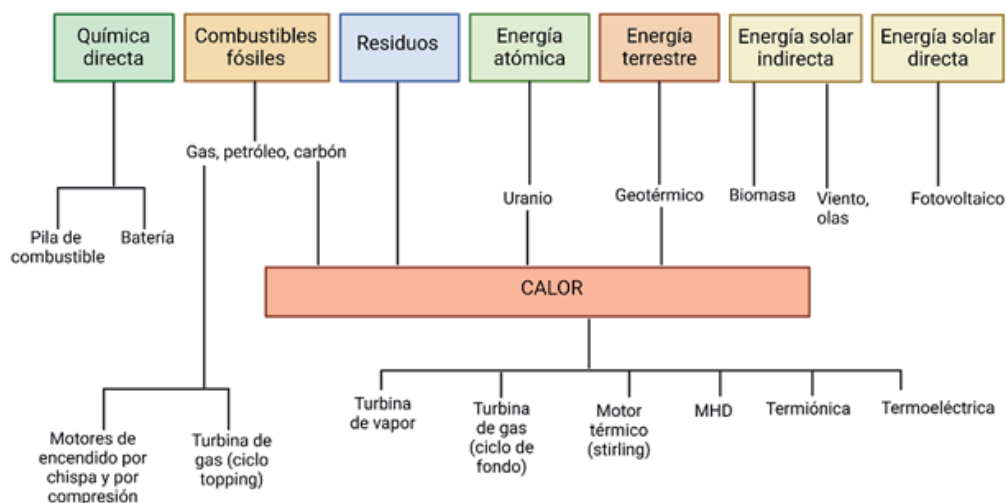


Figura 6. Fuentes y aplicaciones energéticas.

Desarrollos recientes y perspectivas de energías renovables y química verde

La producción de biocombustibles utilizando tecnologías y procesos biológicos emergentes está aumentando a nivel mundial. Con la producción de biocombustibles a partir de desechos de biomasa y desechos de cultivos agrícolas es probable que reduzca la carga ambiental y se resuelvan problemas ambientales, incluidos los problemas de eliminación de desperdicios.⁵⁴⁻⁵³ Debido a su naturaleza ecológica y ser recursos neutros en carbono, se ha llevado a cabo más investigación sobre la producción de biocombustibles a partir de plantas y materiales de biomasa de origen microbiano.⁵⁴ Existen varios géneros de algas como: *Chlorella*, algas verdes unicelulares que son ampliamente estudiadas por su alto contenido de proteínas, lípidos y carbohidratos. Se han utilizado en la producción de biocombustibles y como suplemento dietético debido a su alto valor nutricional; *Nannochloropsis*, es una microalga unicelular conocida por su alta

54. Mahaffy, P.; Krief, A.; Hopf, H.; Mehta, G.; Matlin, S., Reorienting chemistry education through systems thinking. *Nature Reviews Chemistry* 2018, 2, 0126.

tasa de crecimiento y su capacidad para acumular lípidos. Se ha investigado ampliamente para la producción de biodiesel y otros productos a base de lípidos; *Botryococcus braunii*, microalga verde conocida por su capacidad para producir grandes cantidades de hidrocarburos lipídicos, como los alquiladienos y triterpenoides, esto la hace interesante para la producción de biocombustibles y productos químicos; *Dunaliella salina*, conocida por su capacidad para acumular carotenoides, como el beta-caroteno, en condiciones de estrés. Estas algas tienen la capacidad de acumular biomasa a través de la fotosíntesis.⁵⁵ Como resultado, se está llevando a cabo más investigación sobre la tecnología más avanzada utilizada para producir biocombustibles como fuente de energía. Como se muestra en la **figura 7**, los biocombustibles se clasifican según la cantidad de biomasa utilizada y se clasifican como biocombustibles de primera, segunda, tercera y cuarta generación.⁵⁶

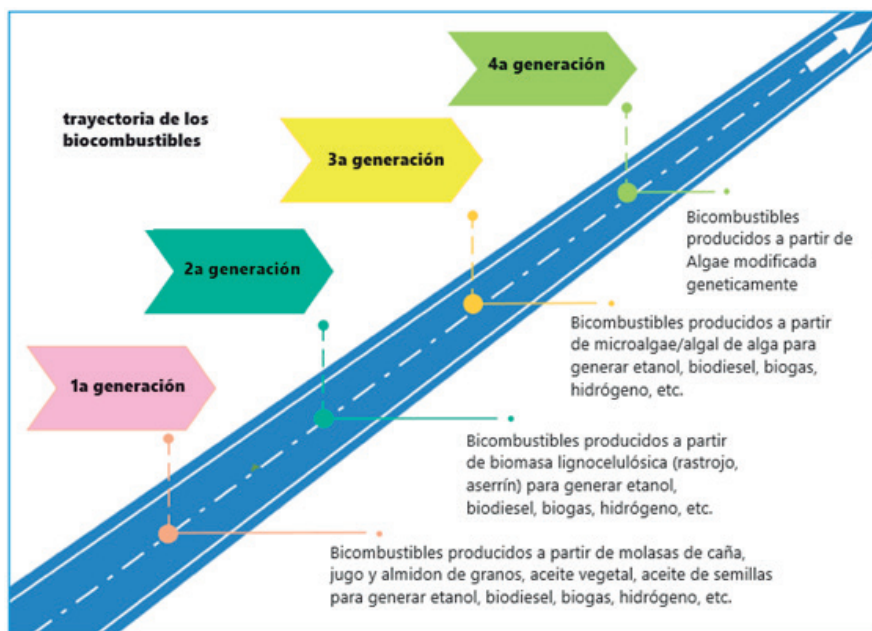


Figura 7. Demostración gráfica del avance de la producción de biocombustible.⁵⁷

55. Hjeresen, D.; Boese, J.; Schutt, D., Green Chemistry and Education. *Journal of Chemical Education* **2000**, 77, 1543.
56. Castillo, M., The scientific method: a need for something better? *AJNR. American journal of neuroradiology* **2013**, 34, 1669-71.
57. Hardian, R.; Liang, Z.; Zhang, X.; Szekeley, G., Artificial intelligence: The silver bullet for sustainable materials development. *Green Chemistry* **2020**, 22.

Para predecir el funcionamiento de tecnologías (disruptivas) en el futuro, el conocimiento y control de los parámetros termodinámicos resulta de vital importancia en algunos escenarios basados en energías renovables, pueden sugerir una forma de energía ambientalmente ideal en la que un consumo no controlado no tendría efectos negativos significativos en el medio ambiente o la sociedad.⁵⁸ Los sistemas de múltiples criterios como los análisis y evaluaciones del ciclo de vida, se han complementado con métricas apropiadas, para evaluar y medir su eficacia, algunas de ellas se describen brevemente a continuación.⁵⁹

-Factor de Efectividad Atómica (FEA): Mide la cantidad de material utilizado en un proceso químico que termina formando parte del producto deseado. Cuanto mayor sea el FEA, menor será la cantidad de desechos generados. Un claro ejemplo es la síntesis del ibuprofeno, un antiinflamatorio no esteroide común, ha sido optimizada utilizando un menor número de pasos sintéticos, menor cantidad de reactivos en exceso, como ácido isobutílico y cloruro de etilo y menor generación de residuos.

-Factor de Sostenibilidad de Procesos (FSP): Evalúa la sostenibilidad de un proceso químico considerando aspectos como la eficiencia de la materia prima, la eficiencia energética, la seguridad y el impacto ambiental. Algunos ejemplos de este punto es el uso de procesos de transesterificación asistidos por microondas, que requieren menor energía en su síntesis, o bien, la reducción significativa de residuos gracias a la recuperación y reutilización de catalizadores.

-Indicadores de Eficacia de Reacción (IER): Evalúan la eficiencia de una reacción química en términos de consumo de reactivos, generación de subproductos y producción de producto deseado. Por ejemplo, el rendimiento de una reacción química, este mide la cantidad de producto obtenido en relación con la cantidad teórica máxima posible.

58. Brown, N.; Ertl, P.; Lewis, R.; Luksch, T.; Reker, D.; Schneider, N., Artificial intelligence in chemistry and drug design. *Journal of computer-aided molecular design* **2020**, *34*, 709-715

59. Green, C. P.; Engkvist, O.; Pairaudeau, G., The convergence of artificial intelligence and chemistry for improved drug discovery. *Future medicinal chemistry* **2018**, *10*, 2573-2576.

-Métricas de disolventes verdes: Evalúan la toxicidad, la biodegradación y la renovabilidad de los disolventes utilizados en un proceso químico. Esto incluye métricas como el Índice de Sostenibilidad de Disolventes (SSI) y el Factor de Solvente Verde (FSV). Un ejemplo es el proceso tradicional de síntesis de aspirina, el cual implica la esterificación del ácido salicílico con anhídrido acético, utilizando acetonitrilo como disolvente. Este método genera residuos peligrosos y utiliza un disolvente que no es amigable con el medio ambiente. El proceso mejorado es el uso de disolventes verdes como etanol o agua, minimizando el impacto ambiental.

-Métricas de seguridad: Evalúan la seguridad de un proceso químico en términos de riesgos para la salud humana y el medio ambiente. Esto incluye métricas como la Toxicidad Aguda (LD50) y la Persistencia, Bio-acumulación y Toxicidad (PBT). Un ejemplo de este punto son las métricas de seguridad en modelos *in-vivo*, esenciales para garantizar que los nuevos medicamentos sean seguros antes de su uso en humanos. A través de estudios detallados y el uso de múltiples métricas como toxicidad aguda, subcrónica, genotoxicidad, carcinogenicidad y seguridad reproductiva, se puede evaluar y mitigar los riesgos asociados con los nuevos compuestos farmacéuticos.

-Indicadores de consumo de energía y agua: Evalúan el consumo de energía y agua asociado con un proceso químico, ayudando a identificar oportunidades para mejorar la eficiencia energética y reducir los costos operativos. Un ejemplo reciente es en la producción de bioplásticos, esta utiliza materias primas renovables (como el almidón de maíz) para producir polímeros biodegradables, esto permite identificar áreas de mejora, implementar tecnologías más eficientes y reducir significativamente su impacto ambiental.

Sin duda, estrategias energéticas como las tecnologías de energía renovable (solar, eólica, hidroeléctrica, geotérmica y de biomasa), o bien, la eficiencia energética, la cual se centra en maximizar la producción de energía útil mientras se minimiza el consumo de recursos y las pérdidas energéticas, comparten afinidades con los principios de la Química Verde al buscar reducir el impacto ambiental y promover la sostenibilidad en el sector energético, ayudando a mejorar en el desafío energético.⁶⁰

60. Mao, S.; Wang, B.; Tang, Y.; Qian, F., Opportunities and Challenges of Artificial Intelligence for Green Manufacturing in the Process Industry. *Engineering* 2019, 5.

Se han reportado y discutido en los últimos veinticinco años, las energías renovables, su producción, distribución y almacenamiento, mostrando cómo la Química Verde aborda el “desafío energético”. Sin embargo, la cuestión original de cómo reducir el consumo de energía (fósil) sigue siendo un problema. El objetivo final de todos estos esfuerzos, como se ha mencionado anteriormente, es facilitar la transición a un futuro sin emisiones de carbono. Solo en el contexto ambiental amenazante, la necesidad de un futuro sin emisiones de carbono se vuelve más urgente. Esto se ve agravado por los costos sociales asociados con mantener el acceso a los suministros de combustibles fósiles para los usuarios actuales y, por otro lado, por abordar el problema de que aún muy pocas personas tienen acceso a cantidades de energía aceptables.⁶¹

La reducción de los efectos ambientales de la producción química es uno de los retos importantes de la integración de la Química Verde y la sostenibilidad. Los procesos químicos convencionales con frecuencia requieren el uso de materiales peligrosos y no renovables, lo que resulta en la liberación de contaminantes perjudiciales en el aire, el agua y el suelo.⁶² Las industrias pueden diseñar procesos que utilizan productos químicos más seguros, consumen menos energía al adoptar los principios de la Química Verde. Esto no solo reduce los daños ambientales inmediatos, sino que también mejora la sostenibilidad de los ecosistemas a largo plazo. Además, el uso de técnicas de Química Verde ha permitido un avance significativo en la creación de fuentes de energía renovables. Por ejemplo, la creación de catalizadores para células de combustible más eficientes y la creación de materiales fotovoltaicos con mayor rendimiento.⁶³

Otro caso es la bioenergía por captura y almacenamiento de carbono, *Bioenergy with carbon capture and storage* (BECCS por sus siglas en inglés) ofrece una oportunidad única para realizar emisiones negativas netas porque el sistema elimina activamente el CO₂ de la atmósfera mientras produce electricidad de carga base confiable. Los sorbentes fundidos, son un tipo de material que se ha descubierto recientemente y que es extremadamente eficiente en la separación. Estos materiales consisten en sales fundidas, que son líquidos a altas temperaturas y que pueden absorber selectivamente gases ácidos, de una forma muy similar a como las esponjas absorben agua y podrían mejorar la viabilidad de los BECCS. Por ejemplo,

61. Hermann, E.; Hermann, G.; Tremblay, J. C., Ethical Artificial Intelligence in Chemical Research and Development: A Dual Advantage for Sustainability. *Science and Engineering Ethics* 2021, 27.

62. FeldmanHall, O.; Mobbs, D.; Evans, D.; Hiscox, L.; Navrady, L.; Dalgleish, T., What we say and what we do: the relationship between real and hypothetical moral choices. *Cognition* 2012, 123, 434-41.

63. Wiedicke, A., Ethical challenges in contemporary quantitative content analysis. *Studies in Communication and Media* 2023, 12, 354-376.

hidróxido de sodio fundido (NaOH), se utiliza para la captura de gases ácidos, como el dióxido de azufre (SO₂), en procesos industriales; el carbonato de potasio fundido (K₂CO₃), se utiliza para la captura de dióxido de carbono (CO₂) en aplicaciones de captura y almacenamiento de carbono. BECCS puede eliminar entre 300 y 850 kg de CO₂ equivalente de la atmósfera por megawatt hora de salida eléctrica (kg/MWhe) dependiendo del combustible utilizado. Los sorbentes de sal fundida podrían evitar el CO₂ por un costo de 45 a 50 dólares por tonelada en comparación con el carbón y de 80 a 100 dólares por tonelada en relación con la futura red eléctrica, en gran medida renovable. Enfatiza la capacidad de BECCS para resistir la competencia de otras tecnologías con niveles de carbono bajos, el costo bajo de los absorbentes fundidos en comparación con otros, y la posibilidad de compensar las emisiones de las industrias que son difíciles de reducir.⁶⁴

Por otro lado, otra tecnología reciente son los andamios metálicos-orgánicos fotosensibles (light-responsive metal-organic frameworks, LMOF), son una clase de materiales porosos formados por la unión de iones metálicos con moléculas orgánicas a través de enlaces coordinativos. Estos materiales se caracterizan por su estructura cristalina tridimensional ordenada y por su gran área superficial y porosidad, lo que les confiere una amplia gama de aplicaciones en diversas áreas, incluyendo la catálisis, el almacenamiento de gases, la separación de moléculas y la captura de contaminantes. Los LMOF, que responden a la luz son materiales interesantes para la captura de CO₂ debido a sus estructuras ajustables. Sin embargo, se sabe que los LMOF convencionales regulan la capacidad de adsorción de CO₂ por obstrucción estérica o variación estructural debido a la débil afinidad entre el adsorbente y el absorbente. Se reportó un adsorbente basado en LMOF con sitios de adsorción dirigidos incorporando polietileneimina en un LMOF decorado con azobenzeno para la captura de CO₂ controlable. Los sitios activos de las aminas hacen que el adsorbente sea más selectivo para capturar CO₂. Además, la isomerización de las moléculas de azobenzeno mediante la irradiación de luz puede controlar el potencial electrostático de la superficie alrededor de las aminas. La irradiación de luz reversible también produce adsorbentes con lugares de adsorción expuestos o protegidos, lo que permite la captura controlable de CO₂ en aminas (**Figura 8**). El avance actual nos anima a crear nuevos adsorbentes basados en LMOF para la separación de adsorción controlable, que es difícil de lograr con los LMOF tradicionales.⁶⁵

64. Keith, L. H.; Gron, L. U.; Young, J. L., Green analytical methodologies. *Chemical reviews* **2007**, *107*, 2695-708.

65. Wilson, M. P.; Chia, D. A.; Ehlers, B. C., Green chemistry in California: a framework for leadership in chemicals policy and innovation. *New solutions: a journal of environmental and occupational health policy: NS* **2006**, *16*, 365-72.

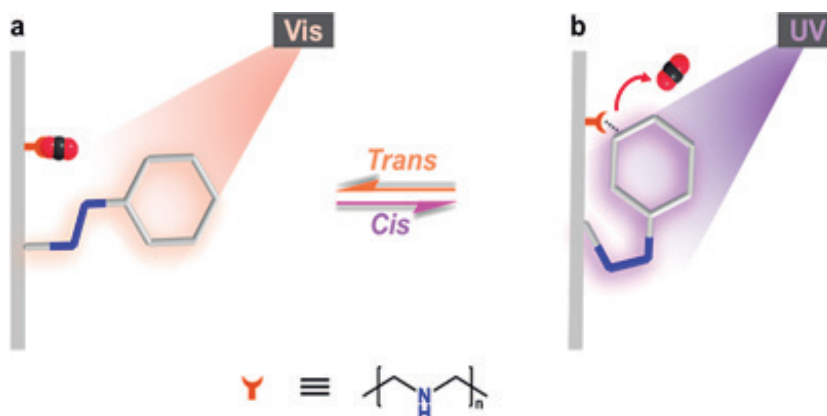


Figura 8. Moléculas de azobenzeno y los sitios de aminas interactuando para controlar la captura de CO₂ en LMOF. a) La irradiación por luz vis produce un isómero de trans-azobenzeno, que conduce a sitios de aminas expuestos para la captura de CO₂; b) La irradiación por luz ultravioleta produce isómeros de cis-azobenzeno, que conducen a sitios de aminas protegidos con una captación reducida de CO₂.

Aunque es necesario avanzar en los fundamentos, es importante acelerar el avance de las tecnologías que permitan lograr los objetivos requeridos en el ámbito de la energía y la química en transición. Además, se debe tener en cuenta que una estrategia de transición exitosa requiere la identificación de procesos críticos desde una perspectiva cronológica, con soluciones a corto, medio y largo plazo.⁵¹ El punto fundamental es que las soluciones rentables solo son aquellas que se integran en los sistemas y las cadenas de valor actuales para reducir las inversiones y, por lo tanto, reducir las barreras iniciales de costo. La sincronización adecuada entre las capacidades tecnológicas y el contexto socioeconómico es crucial.⁵²⁻⁵⁵

Simulación de propiedades termodinámicas y procesos químicos

La modelación teórica y la estimación de resultados son herramientas cruciales en la termodinámica y la Química Verde. Estas técnicas permiten optimizar procesos químicos para mejorar la eficiencia, reducir el consumo de recursos y minimizar la generación de residuos y emisiones. Uno de los principales conflictos de los desarrollos basados en la filosofía de la Química Verde es el demostrar la efectividad, posibles problemas y consecuencias del uso de un nuevo conocimiento, producto o proceso; a corto, mediano y largo plazo a la salud humana y al ambiente.⁵⁷ Actualmente el uso de herramientas de modelación teórico/matemático como redes neurales y su evolución a la generación de una inteligencia artificial (AI)⁵⁸ permiten un mayor uso de esta elevando hasta 1.2% las publicaciones, 0.3% las patentes y hasta el 3.0% la redacción de resúmenes enviados a los congresos y reuniones nacionales. Con base en lo anterior, trabajos relacionados con la química,⁵⁹ hacen uso de herramientas más avanzadas para el sector manufacturero⁶⁰ y principalmente en los programas dedicados a manufactura verde y procesos sostenibles,⁶² por ejemplo nuevas herramientas para el diseño y proceso de fabricación de excipientes, materias primas farmacéuticas y medicamentos.^{59, 62} Métodos como Peng-Robinson (simulador de procesos termodinámicos para estimar la correlación simultánea del equilibrio líquido-vapor, el volumen molar y las entalpías de exceso de mezclas polares y no polares) así como el software UNIQUAC (modelo termodinámico estadístico para calcular la energía libre excesiva y los coeficientes de actividad en sistemas poco ideales como gases y líquidos) permiten predecir la distribución de compuestos entre diferentes fases y ayudan a diseñar procesos de separación más eficientes y menos intensivos en energía. Lo anterior abre la puerta al uso de novedosos programas y modelos termodinámicos que optimizan condiciones para maximizar rendimientos y minimizar subproductos, describen la velocidad de reacciones en función de variables como concentración y temperatura, permitiendo el diseñar reactores más eficientes, reduciendo el tiempo y la energía necesarios para las reacciones.⁶³⁻⁶⁵

57. Hardian, R.; Liang, Z.; Zhang, X.; Szekely, G., Artificial intelligence: The silver bullet for sustainable materials development. *Green Chemistry* **2020**, *22*.
58. Brown, N.; Ertl, P.; Lewis, R.; Luksch, T.; Reker, D.; Schneider, N., Artificial intelligence in chemistry and drug design. *Journal of computer-aided molecular design* **2020**, *34*, 709-715
59. Green, C. P.; Engkvist, O.; Pairaudeau, G., The convergence of artificial intelligence and chemistry for improved drug discovery. *Future medicinal chemistry* **2018**, *10*, 2573-2576.
60. Mao, S.; Wang, B.; Tang, Y.; Qian, F., Opportunities and Challenges of Artificial Intelligence for Green Manufacturing in the Process Industry. *Engineering* **2019**, *5*.
62. FeldmanHall, O.; Mobbs, D.; Evans, D.; Hiscox, L.; Navrady, L.; Dalgleish, T., What we say and what we do: the relationship between real and hypothetical moral choices. *Cognition* **2012**, *123*, 434-41.
63. Wiedicke, A., Ethical challenges in contemporary quantitative content analysis. *Studies in Communication and Media* **2023**, *12*, 354-376.
64. Keith, L. H.; Gron, L. U.; Young, J. L., Green analytical methodologies. *Chemical reviews* **2007**, *107*, 2695-708.
65. Wilson, M. P.; Chia, D. A.; Ehlers, B. C., Green chemistry in California: a framework for leadership in chemicals policy and innovation. *New solutions: a journal of environmental and occupational health policy: NS* **2006**, *16*, 365-72.

Termodinámica aplicada y los desafíos tecnológicos que enfrenta la química verde

Actualmente, uno de los desafíos más complejos que enfrenta la Química Verde es la enseñanza de métodos basados en disciplinas tradicionales, es decir, lograr utilizar conocimientos que abarcan fenómenos químicos y físicos aplicando el uso de ingenierías, nanoquímica o bioquímica.⁶⁶ Resulta primordial que la enseñanza interdisciplinaria sea sustentada por la generación de un diseño e instrucción que integre diversas áreas del conocimiento con el objetivo de fomentar la capacidad de mejora constante en los estudiantes con educación de alta calidad.^{66,67} Con base en lo anterior, la enseñanza de la Química Verde busca generar un pensamiento de sostenibilidad en función de necesidades sociales y los factores de desarrollo interdisciplinario.⁶⁸

En términos de sostenibilidad, la Química Verde evita que se empleen los recursos futuros para satisfacer necesidades del presente. Con la concientización ecológica se busca generar soluciones a “crisis ecológicas” que se han presentado desde hace décadas como la degradación de los arrecifes en los océanos produciendo una acidificación,⁹¹ la contaminación blanca dada por desechos plásticos⁶⁹ la creciente presencia de disruptores endócrinos. Desde 1998 se conoce que, para generar Química Verde es importante contemplar los 12 principios estableciendo como preguntas bases el “cómo” y “porqué” de las diferentes prácticas. Con la finalidad de concientizar de forma acertada sobre la importancia de incluir Química Verde en los procesos es necesario introducir temas como innovación y tecnología, que consideran alternativas viables para el cuidado de los ecosistemas y las poblaciones.⁶⁷

Tecnología verde en la agricultura

La tecnología verde en la agricultura se centra en la adopción de prácticas y tecnologías sostenibles que reducen el impacto ambiental y mejoran la eficiencia en el uso de recursos. Entre estas prácticas se encuentran el uso de energías renovables, como paneles solares y sistemas eólicos, para

66. Trinidad, J., Nuancing Interdisciplinarity: Between and Beyond Liberal Arts and Professional Education. **2021**.

67. Constable, D. J. C., Green and sustainable chemistry - The case for a systems-based, interdisciplinary approach. *iScience* **2021**, *24*, 103489.

68. Ahn, C.; Jeung, E. B., Endocrine-Disrupting Chemicals and Disease *Endpoints* **2023**, *24* (6).

69. Morelle Hungria, E., La acidificación del Mediterráneo y sus efectos sobre la Posidonia oceánica: una aproximación al daño ecológico desde los límites planetarios. **2022**, *5*, 1-15.

88. Lomeli-Rosales, D. A.; Zamudio-Ojeda, A., One-step synthesis of gold and silver non-spherical nanoparticles mediated by Eosin Methylene Blue agar. *Scientific Reports* **2019**, *9*, 19327.

91. Singh, N.; Pandey, J., Recent Advances in Henry Reaction: A Versatile Method in Organic Synthesis. *Mini-Reviews in Organic Chemistry* **2019**, *16*

alimentar equipos agrícolas, lo cual disminuye la dependencia de combustibles fósiles. También incluye técnicas de cultivo orgánico y agroecología que minimizan o eliminan el uso de pesticidas y fertilizantes sintéticos, promoviendo la salud del suelo y la biodiversidad. Otro caso interesante es la aplicación de la nanotecnología, se han reportado síntesis de nanoestructuras de carbono con nanopartículas de óxido metálico de plata, oro y disulfuro de molibdeno, estas permiten usos en el tratamiento de agua con tecnología de membranas, eliminación de contaminantes, detección ambiental y nanorremediación de forma *in situ*, debido a sus características morfológicas, cristalinidad y dimensión de las mismas.⁴⁵ Así mismo, se exploran alternativas para ampliar la disponibilidad de nuevos agroquímicos a partir de la biomasa, se han descrito compuestos fenólicos que provienen de las ligninas, así como otros procesos estudiados como fermentaciones de azúcares y glicerol obtenidos de la biomasa para generar eritritol, el cual es un potencial agente biopesticida, se ha demostrado que puede ser tóxico para ciertas plagas, como los insectos, sin afectar significativamente a otros organismos no objetivo y al medio ambiente. Por ejemplo, estudios han indicado que el eritritol puede actuar como un insecticida eficaz contra ciertas especies de moscas y mosquitos, causando mortalidad y reduciendo su capacidad de reproducción.⁷⁰ De igual forma la tecnología verde en la agricultura ha implementado biocatalizadores a base de metales como cobalto (esencial para función de ciertas enzimas que catalizan reacciones enzimáticas específicas); hierro (útil en procesos de oxidación para la degradación de contaminantes orgánicos) y zinc (fundamental en la estructura de muchas enzimas que facilitan la síntesis de proteínas y el crecimiento), en general para aplicaciones de biorremediación, fertilización y bioestimulación del crecimiento de plantas.^{71,72,73}

Otra área clave es la optimización del riego mediante sistemas avanzados como el riego por goteo y el uso de sensores de humedad, que permiten un uso más eficiente del agua. Además, la maquinaria agrícola moderna se está diseñando para ser más eficiente y menos contaminante, incorporando tecnologías como motores eléctricos y sistemas de precisión que reducen el consumo de combustible y las emisiones.

70. Nakagawa, Y.; Kasumi, T.; Ogihara, J.; Tamura, M.; Arai, T.; Tomishige, K., Erythritol: Another C4 Platform Chemical in Biomass Refinery. *ACS Omega* **2020**, *5*, 2520-2530
71. Nakagawa, Y.; Kasumi, T.; Ogihara, J.; Tamura, M.; Arai, T.; Tomishige, K., Erythritol: Another C4 Platform Chemical in Biomass Refinery. *ACS Omega* **2020**, *5*, 2520-2530
72. Nattmann, L.; Cornella, J., Ni(4-tBustb)3: A Robust 16-Electron Ni(0) Olefin Complex for Catalysis. *Organometallics* **2020**, *39*, 3295-3300.
73. Key, R. J.; Tengco, J. M. M.; Smith, M. D.; Vannucci, A. K., A Molecular/Heterogeneous Nickel Catalyst for Suzuki-Miyaura Coupling. *Organometallics* **2019**, *38*, 2007-2014.

La biotecnología también juega un papel importante en la tecnología verde en la agricultura, con el desarrollo de cultivos genéticamente mejorados que son más resistentes a plagas y enfermedades, y que requieren menos recursos para crecer. Estas innovaciones no solo ayudan a proteger el medio ambiente, sino que también aumentan la productividad y la sostenibilidad económica de las explotaciones agrícolas, beneficiando tanto a los agricultores como a las comunidades rurales.

Aplicaciones en la cosmética

En años recientes el consumo de productos para el cuidado de la piel ha tenido un gran impulso en la población de todas las edades. Medios de comunicación han promovido el pensamiento “orgánico” entre los consumidores los cuales buscan alternativas con procesos de producción e ingredientes con menor impacto ambiental. La implementación tecnológica en los cultivos de células vegetales para la obtención de subproductos bioactivos e ingredientes que pueden ser utilizados para el cuidado del cabello,^{74,75} maquillaje^{75,76} o de uso dermatológico. Existen diversos estudios los cuales implementan extractos de plantas con usos de efecto antioxidante como, por ejemplo, el *Té verde*,⁷⁶ *Citrus limon*⁷⁷ en la formulación de vehículos para el transporte de componentes o el extracto de *Cynara scolymus* con efectos de antienvjecimiento.⁷⁸

El futuro de la Química Verde en disolventes

Los disolventes son utilizados en todas las áreas químicas como precursores o medios activadores en reacciones de síntesis, esto fomenta un desarrollo con base en precursores biológicos como son los cetals cíclicos o los éteres

74. Laneri, S.; Di Lorenzo, R.; Sacchi, A.; Dini, I., Dosage of Bioactive Molecules in the Nutricosmeceutical *Helix aspersa* Muller Mucus and Formulation of New Cosmetic Cream with Moisturizing Effect. *Natural Product Communications* **2019**, *14*, 1934578X1986860.
75. Laneri, S.; Dini, I., Plant cell culture extract of *Cirsium eriophorum* with skin pore refiner activity by modulating sebum production and inflammatory response. *Phytotherapy Research* **2021**, *35*, 530-540.
76. Lee, H. J.; Lee, W. J.; Chang, S. E.; Lee, G. Y., Hesperidin, A Popular Antioxidant Inhibits Melanogenesis via Erk1/2 Mediated MITF Degradation. *International journal of molecular sciences* **2015**, *16*, 18384-95.
77. Manconi, M.; Manca, M. L.; Marongiu, F.; Caddeo, C.; Castangia, I.; Petretto, G. L.; Pintore, G.; Sarais, G.; D'Hallewin, G.; Zaru, M.; Bacchetta, G.; Fadda, A. M., Chemical characterization of *Citrus limon* var. *pompia* and incorporation in phospholipid vesicles for skin delivery. *International journal of pharmaceutics* **2016**, *506*, 449-57.
78. Marques, P.; Marto, J.; Gonçalves, L.; Pacheco, R.; Fitas, M.; Pinto, P.; Serralheiro, M. L.; Ribeiro, H., *Cynara scolymus* L.: A promising Mediterranean extract for topical anti-aging prevention. *Industrial Crops and Products* **2017**, *109*, 699-706.

de glicol provenientes de carbohidratos (dioles),⁷⁹ uso de dióxido de carbono supercrítico para producir una mayor difusividad en matrices como la biomasa. Un proceso en exploración continua es el uso de mezclas eutécticas con grupos funcionales hidrófobos para obtener compuestos con potencial energético provenientes de contaminantes de procesos industriales como es el uso de plaguicidas.⁸⁰

Termodinámica de los sistemas biomoleculares en bionanotecnología

En la bionanotecnología, se aplican los conceptos termodinámicos para entender cómo las biomoléculas como proteínas, ácidos nucleicos y lípidos interactúan a nivel nanoscópico. La primera ley de la termodinámica, que trata sobre la conservación de la energía, se utiliza para estudiar la transferencia de energía y el trabajo realizado en estos sistemas. La segunda ley de la termodinámica es crucial para evaluar la espontaneidad y eficiencia de las reacciones bioquímicas y los procesos de autoensamblaje en nanoestructuras.

La bionanotecnología emplea técnicas como la nanomanipulación molecular y el autoensamblaje controlado para diseñar dispositivos y materiales biomiméticos. La termodinámica guía la optimización de estas técnicas, asegurando que los sistemas biomoleculares sean estables, eficientes y funcionales en condiciones específicas, como temperaturas y concentraciones de solventes. Además, la termodinámica permite modelar y predecir cómo cambios en las condiciones ambientales pueden afectar la estructura y función de las biomoléculas a nivel nanométrico. Esto es fundamental para el desarrollo de biosensores, sistemas de liberación de fármacos dirigidos y biocombustibles, contribuyendo así al avance de la medicina personalizada y la sostenibilidad ambiental mediante el uso eficiente de recursos biomiméticos.

La bio-nanotecnología es un campo interdisciplinario que relaciona los principios y técnicas de la biología y la nanotecnología, mediante los cuales se crean herramientas con base en materiales innovadores que tienen aplicaciones en medicina, agricultura, industria e investigación a nivel de ciencia básica y aplicada. Algunos de los avances científicos más memorables de los últimos 50 años, por mencionar algunos, es la secuenciación del

79. Torres, P.; Balcells, M., Effect of Four Novel Bio-Based DES (Deep Eutectic Solvents) on Hardwood Fractionation. *2020*, 25 (9).

80. Kachangoon, R.; Vichapong, J.; Santaladchaiyakit, Y.; Burakham, R.; Srijaranai, S., An Eco-Friendly Hydrophobic Deep Eutectic Solvent-Based Dispersive Liquid-Liquid Microextraction for the Determination of Neonicotinoid Insecticide Residues in Water, Soil and Egg Yolk Samples. *Molecules (Basel, Switzerland)* *2020*, 25 12.

genoma humano, desarrollo de la inteligencia artificial y la nanociencia. Esta última se encarga de estudiar el comportamiento de los materiales a escalas nanométricas, es decir materiales con tamaños menores a los 100 nm, en al menos una de sus dimensiones. Recientemente, se ha buscado generar metodologías, que disminuyan el costo de los reactivos empleados para la síntesis de diversas nanopartículas y aunado a esto que los productos secundarios sean más amigables o inocuos con el ambiente, y sobre todo que energéticamente sean menos costosos. Con base en lo anterior, se ha generado una nueva metodología de síntesis, en la cual se hace uso del aprovechamiento de algunas moléculas que son producidas por organismos vivos, plantas, hongos, algas.⁸¹

En las plantas, la termodinámica es relevante para entender cómo los agentes oxidantes, como el superóxido ($O_2^{\cdot-}$), se produce durante la fotosíntesis y otros procesos metabólicos. La formación de $O_2^{\cdot-}$ está determinada por la energía libre de Gibbs, que indica si la reacción es espontánea. La termodinámica evalúa cómo estas reacciones afectan el equilibrio redox dentro de la planta. El peróxido de hidrógeno (H_2O_2), proveniente de reacciones enzimáticas y no enzimáticas, es clave en el estrés oxidativo. Su presencia modula el potencial redox, donde la termodinámica es crucial para entender la cinética y equilibrio de estas reacciones. De igual forma los radicales hidroxilo ($\cdot OH$), generados por la presencia de H_2O_2 y metales de transición como hierro, cobre y manganeso. La termodinámica explica cómo estos metales catalizan la formación de $\cdot OH$ y cómo las plantas regulan estas reacciones para minimizar el daño celular.⁸²

En el caso de los microorganismos la termodinámica juega un papel crucial en la comprensión de cómo en bacterias, algas y hongos se producen algunas enzimas antioxidantes como las catalasas y peroxidasas,⁸³ las cuales tienden a contrarrestar la presencia del superóxido $O_2^{\cdot-}$ y el peróxido de hidrógeno (H_2O_2), las especies oxidantes más comunes en estos organismos, la termodinámica es esencial para modelar y predecir cómo estos sistemas responden a cambios en temperatura, pH y presencia de metales, afectando la actividad enzimática y la resistencia al estrés oxidativo.⁸⁴

81. Blokhina, O.; Virolainen, E.; Fagerstedt, K. V., Antioxidants, oxidative damage and oxygen deprivation stress: a review. *Annals of botany* **2003**, *91*, 2, 179-94.

82. Agati, G.; Brunetti, C.; Fini, A.; Gori, A.; Guidi, L.; Landi, M.; Sebastiani, F.; Tattini, M., Are Flavonoids Effective Antioxidants in Plants? Twenty Years of Our Investigation. *Antioxidants* **2020**, *9*, 1098.

83. Rezayian, M.; Niknam, V.; Ebrahimzadeh, H., Oxidative damage and antioxidative system in algae. *Toxicology Reports* **2019**, *6*, 1309-1313.

84. Rani, A.; Saini, K. C., Microorganisms: A Potential Source of Bioactive Molecules for Antioxidant Applications. *Molecules*, **2021**, *26*.

En los seres vivos más complejos, dígame el ser humano, animales o insectos se producen algunos antioxidantes endógenos. Las ROS en los seres vivos incluyen radicales libres como el anión superóxido ($\cdot\text{O}_2^-$), el radical hidroxilo ($\cdot\text{OH}$), además de moléculas no radicalarias como el H_2O_2 . Estas moléculas son producidas por los organismos vivos como resultado del metabolismo celular normal. Los antioxidantes más comunes en los organismos vivos son las enzimas superóxido dismutasa y las catalasas. Además del glutatión y la vitamina C, los cuales son antioxidantes no enzimáticos, la termodinámica ayuda a entender cómo los potenciales de electrodo de estos antioxidantes afectan su capacidad para reducir ROS y proteger contra el estrés oxidativo.⁸⁵ Los seres vivos ajustan la expresión y actividad de sus sistemas antioxidantes en respuesta a cambios en el ambiente, como la exposición a metales pesados o variaciones en la temperatura y pH. La termodinámica proporciona herramientas para modelar y predecir cómo estos sistemas se adaptan y responden eficientemente a diferentes condiciones ambientales.

El surgimiento y continuos avances en la nanotecnología han planteado nuevos escenarios de esta nueva línea de investigación, la cual tiene sus orígenes a finales del siglo pasado con el descubrimiento de los fullerenos y los nanotubos de carbono.⁸⁵ Sin embargo, siglos anteriores a este descubrimiento se tiene constancia que el hombre de forma inconsciente hacia uso de nanomateriales,⁸⁶ tanto para el desarrollo de herramientas de guerra como son las espadas de damasco y en ornamentos como es el caso de la copa de licurgo.⁸⁷ Algunos ejemplos de las propiedades que presentan estos materiales son las propiedades ópticas, como es el caso del oro y la plata que dejan de tener los colores usualmente relacionado con estos materiales como son el plateado y el dorado,⁸⁸ por colores dependientes de su tamaño y forma como son el color ámbar para la plata y colores que van del rosa al azul para el oro, lo cual está relacionado con la resonancia del plasmón de superficie de las nanopartículas.⁸⁹

85. Iijima, S., Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* **1991**, *354*, 56-58.

86. Reibold, M.; Paufler, P.; Levin, A.; Kochmann, W.; Pätzke, N.; Meyer, D., Materials - Carbon nanotubes in an ancient Damascus sabre. *Nature* **2006**, *444*, 286.

87. Freestone, I.; Meeks, N.; Sax, M.; Higgitt, C., *The Lycurgus Cup-A Roman Nanotechnology*. *Gold Bulletin* **2007**, *40*, 270-277.

88. Lomeli-Rosales, D. A.; Zamudio-Ojeda, A., One-step synthesis of gold and silver non-spherical nanoparticles mediated by Eosin Methylene Blue agar. *Scientific Reports* **2019**, *9*, 19327.

89. Lomeli-Rosales, D. A.; Zamudio-Ojeda, A.; Reyes-Maldonado, O. K.; López-Reyes, M. E.; Basulto-Padilla, G. C.; Lopez-Naranjo, E. J.; Zuñiga-Mayo, V. M.; Velázquez-Juárez, G., Green Synthesis of Gold and Silver Nanoparticles Using Leaf Extract of Capsicum chinense Plant. *Molecules (Basel, Switzerland)* **2022**, *27*, 1692.

Con base en lo anterior las biomoléculas con propiedades antioxidantes tienen cabida en los procesos de reducción de las nanopartículas mediante síntesis verde. Sin embargo, la función de un agente reductor es la de donar electrones, por lo que se oxida en una reacción redox. Mientras que el antioxidante protege contra la oxidación, lo cual conlleva a que pueda donar electrones y oxidarse, pero también cumple con la función de proteger contra la oxidación al inhibir o neutralizar las ROS, la termodinámica es esencial para entender cómo las biomoléculas antioxidantes pueden desempeñar un papel dual como agentes reductores y protectores contra la oxidación en los procesos de síntesis verde de nanopartículas, promoviendo así el desarrollo de métodos más sostenibles en la nanotecnología y la biotecnología.^{88, 89}

Aplicaciones de la Química Verde en síntesis de la industria farmacéutica

A pesar de que las industrias farmacéuticas son las que más contribuyen a la economía mundial, con unos ingresos totales de 1,27 billones de dólares, también han sido una de las causas fundamentales de la huella de carbono al producir aproximadamente 1,9 Mt de CO₂. Aunque las distintas vertientes de proteger el medio ambiente se remontan a los años 1970s, muchas de ellas fracasaron en su cumplimiento debido a la falta de esfuerzos de colaboración por parte de las industrias. El principal objetivo de las industrias farmacéuticas es garantizar el suministro de medicamentos revolucionarios para mejorar la calidad de vida de los pacientes, no existe un enfoque en el manejo de residuos generados durante el proceso farmacéutico. Para lograr este objetivo de forma respetuosa con el medio ambiente, las empresas necesitan trasladarse de los procesos sintéticos tradicionales a un mecanismo innovador moderno. Desde las pequeñas industrias hasta las grandes corporaciones han evolucionado para adaptarse de forma sostenible modificando los procesos de fabricación química para conseguir una síntesis verde de los productos que implique los principios de la Química Verde. Un avance importante es la aplicación de reacciones enzimáticas, que permiten condiciones de reacción más suaves y específicas, como en la producción de medicamento anticancerígeno, ejemplo de ello es el paclitaxel (Taxol), donde las enzimas favorecen una síntesis más selectiva y ecológica. Estos enfoques no solo benefician al medio ambiente, sino que también pueden reducir costos y mejorar la eficiencia de la producción farmacéutica.

Los fabricantes de productos químicos generan cantidades significativas de subproductos residuales y contaminantes, como reactivos agotados, contaminantes atmosféricos y disolventes contaminados. Las industrias farmacéuticas contribuyen significativamente a todos estos factores,⁹² por lo que resulta imperante identificar el trabajo necesario para desarrollar material de educación que promueva la adopción de metodologías verdes y sostenibles necesarias en las unidades de bioprocesos como en las industrias farmacéuticas.^{25,93} En las últimas décadas, las industrias farmacéuticas han evolucionado hacia una forma diferente de abordar el desarrollo de aquellos procesos que tratan problemas como la contaminación, el uso de recursos medioambientales limitados y fuentes renovables con sostenibilidad.⁹⁴ Cada vez se presenta una mayor concienciación sobre la contaminación ambiental y la mejora de las metodologías de ensayo, el sector farmacéutico se enfrenta a mayores presiones para mejorar tanto su eficiencia de fabricación como los impactos de sus productos.^{95,96}

Las industrias farmacéuticas se enfrentan a la nueva normativa sobre contaminación ambiental de las fuentes de agua, tanto por residuos industriales como por los restos de fármacos y medicamentos que se vierten en las masas de agua como residuos líquidos municipales, adicionalmente se ha reportado que las principales fuentes de contaminación provienen de desechos domésticos. Sin embargo, estudios han mostrado que la industria y la agricultura también son grandes contribuyentes a la contaminación, liberando cantidades masivas de desechos químicos y tóxicos que afectan el aire, el agua y el suelo. Las emisiones industriales, como los gases de efecto invernadero y otros contaminantes del aire, junto con los pesticidas y fertilizantes utilizados en la agricultura, representan una carga ambiental considerable. Esta complejidad subraya la necesidad de un enfoque holístico que considere todas las fuentes de contaminación para desarrollar estrategias

92. Madaraboina, M.; Yakambaram, B.; Pandey, J.; Chandrashekar, E.; Reddy, L.; Anireddy, J.; Bandichhor, R., Stereoselective Synthesis for Potential Isomers of Ticagrelor Key Starting Material. *Journal of Heterocyclic Chemistry* **2019**, *56*
93. Arora, G.; Shrivastava, R.; Kumar, P.; Bandichhor, R.; Krishnamurthy, D.; Sharma, R. K.; Matharu, A. S.; Pandey, J.; Rizwan, M., Recent advances made in the synthesis of small drug molecules for clinical applications: An insight. *Current Research in Green and Sustainable Chemistry* **2021**, *4*, 100097. doi: 10.1016/j.crgsc.2021.100097.
94. Dunn, P.; Hettenbach, K.; Kelleher, P.; Martinez, C., The Development of a Green, Energy Efficient, Chemoenzymatic Manufacturing Process for Pregabalin. *Green Chemistry in the Pharmaceutical Industry* **2010**, 161-177.
95. Cue, B.; Zhang, J., Green Process Chemistry in the Pharmaceutical Industry: Recent Case Studies. *Green Chemistry Letters and Reviews* **2009**, *2*, 193-211.
96. Silva, A.; Pires, F.; Ferreira, M.; Silva, I.; Aires, G.; Ribeiro, T.; Menezes, E.; Martins, L. H.; Carvalho, R., Case studies of green solvents in the pharmaceutical industry. **2021**, 151-159.

efectivas de mitigación.⁹⁷ Se ha descubierto que incluso concentraciones bajas de fármacos y metabolitos de fármacos contaminan fuertemente lagos, ríos y regiones costeras.⁹⁸ Además, los fármacos en concentraciones más elevadas afectan gravemente a organismos acuáticos como los peces y otros organismos bentónicos.⁹⁹ En su mayoría, los fabricantes de productos farmacéuticos son conscientes de estos hechos y se toman muy en serio los problemas medioambientales, aunque las normativas actuales no son óptimas para las industrias.¹⁰⁰

El principal problema detectado para la aplicación de la síntesis verde es que no es fácil acceder al material existente sobre materias primas verdes, debido a que no están en un formato fácil de usar o no son específicos de la industria, por ejemplo, la biocatálisis que se ha convertido en un gran complemento de los procesos químicos tradicionales para la producción de productos químicos y farmacéuticos a granel. Para superar las limitaciones de las enzimas naturales, la evolución dirigida se ha convertido en la herramienta más importante para mejorar rasgos críticos de los biocatalizadores como la termoestabilidad, la actividad, la selectividad y la tolerancia a disolventes orgánicos para aplicaciones industriales. Los recientes avances en la creación de bibliotecas de mutantes y el cribado de alto rendimiento han facilitado enormemente la ingeniería de biocatalizadores novedosos y mejorados.¹⁰¹ Sin embargo, en muchos lugares las industrias farmacéuticas han aplicado con éxito los principios y técnicas de la Química Verde para producir fármacos, por ejemplo los ya mencionados; producción del ibuprofeno, se han implementado procesos que reducen significativamente los residuos químicos mediante catálisis más eficiente. Asimismo, se utilizan disolventes verdes, como el agua supercrítica, que reemplazan a los solventes orgánicos volátiles, mejorando la seguridad del proceso y su sostenibilidad. Otro caso es la producción del Taxol, fármaco anticancerígeno, se han adoptado reacciones enzimáticas que permiten condiciones de reacción más suaves y específicas, resultando en una síntesis más selectiva y ecológica. Estos avances no solo reducen el impacto ambiental, sino que también pueden disminuir costos y aumentar la eficiencia en la producción farmacéutica, reflejando el potencial de la química verde para revolucionar la industria de los medicamentos.

97. Sobral, A., Synthesis of meso-Diethyl-2,2'-dipyrrromethane in Water. An Experiment in Green Organic Chemistry. *Journal of Chemical Education*, **2006**, 83.
98. Menges, N., The Role of Green Solvents and Catalysts at the Future of Drug Design and of Synthesis. *Green Chemistry*, **2018**.
99. Summerton, L.; Taylor, R. J.; Clark, J. H., Promoting the uptake of green and sustainable methodologies in pharmaceutical synthesis: CHEM21 education and training initiatives. *Sustainable Chemistry and Pharmacy* **2016**, *4*, 67-76.
100. Koenig, S., Scalable Green Chemistry: Case Studies from the Pharmaceutical Industry. **2013**
101. Wang, M.; Si, T.; Zhao, H., Biocatalyst development by directed evolution. *Bioresource technology* **2012**, *115*, 117-25.

Con la finalidad de reducir el empleo de los disolventes químicos como el tolueno, hexano, THF y sales metálicas como TiCl_4 sustituyéndolos con disolventes más ecológicos como el clorhidrato de sertralina, agua, y la eliminación de las sales metálicas y el catalizador Pd/C dio lugar a un protocolo más selectivo y ecológico. En la síntesis del paroxetina, se determinó que el rendimiento global fue casi el doble comparado con el método convencional, lo que condujo a una forma más ecológica, más corta y más rentable. El paso más importante fue aplicar la enzima proteasa que hidrolizaba de forma regioselectiva.¹⁰²

En la actualidad, la Química Verde ha ganado protagonismo en la escena mundial. Además de resolver muchos problemas medioambientales, genera productos de calidad con un mínimo de residuos de materiales tóxicos. Analizando el estado general de la industria farmacéutica y las complicaciones a las que se enfrenta, como los problemas medioambientales, los productos costosos y muchos otros. La Química Verde es una solución innovadora para aumentar la calidad de vida y minimizar los problemas medioambientales. Como resultado, se puede reducir la huella de carbono y de agua, reducir los productos químicos y disolvente peligrosos, sustituyéndolos por disolventes y materias primas ecológicas renovables. La Química Verde puede transformar la industria farmacéutica y la fabricación de medicamentos en el futuro. La Química Verde ofrece beneficios tanto medioambientales como económicos, que en algunos años será la plataforma para la transformación de las industrias farmacéuticas tradicionales en industrias sostenibles y a la sostenibilidad del medio ambiente.¹⁰³

Deben considerarse implicaciones económicas que los industriales farmacéuticos deberían de conocer sobre las ventajas del uso de la Química Verde.

-Reducción de productos secundarios o desechos. Como se ha mencionado previamente en la Química Verde (Economía de Átomos: Los métodos sintéticos deben diseñarse para maximizar la incorporación de todos los materiales utilizados en el proceso en el producto final), este es buscar el aprovechamiento de los componentes atómicos de los compuestos empleados, lo cual conlleva un ahorro implícito debido a que esto disminuiría el impacto económico que conlleva el tratamiento posterior o desecho de los residuos secundarios. Así como un aprovechamiento de la materia prima en cuanto al uso deseado. Además, se promueve el uso eficiente de los reactivos, lo cual maximiza el costo-beneficio.

102. Veleva, V.; Cue, B., Benchmarking green chemistry adoption by "big pharma" and generics manufacturers. *Benchmarking: An International Journal* 2017, 24.

103. Mishra, M.; Sharma, M.; Dubey, R.; Kumari, P.; Ranjan, V.; Pandey, J., Green synthesis interventions of pharmaceutical industries for sustainable development. *Current Research in Green and Sustainable Chemistry* 2021, 4, 100174.

-La posibilidad de no usar materiales peligrosos o nocivos, lo cual puede favorecer que las empresas no tengan que adecuar zonas para el desarrollo de algunos productos. Esto también conlleva a que las empresas puedan evitar gastos relacionados con multas y sanciones relacionados con la violación de normas oficiales establecidas sobre el tratamiento de residuos peligrosos.

-Impulsar el desarrollo y generación de nuevos productos que conlleven procesos químicos sostenibles.

-El uso alternativo de energías renovables que puede generar un ahorro en cuanto a la cantidad del costo económico causado por el consumo de energía empleada en los procesos desarrollados. Por lo anterior, la disminución del consumo de combustibles fósiles podría tener un impacto directo en cuestiones ecológicas.¹⁰⁴

Conclusión y perspectivas

La importancia de la termodinámica en la Química Verde radica en su capacidad para guiar y optimizar procesos químicos hacia prácticas más sostenibles y eficientes, esto presenta una nueva filosofía para llevar a cabo la investigación y producción de sustancias y procesos químicos, maximizando sus beneficios y minimizando los efectos secundarios que pueden ser dañinos al ser humano y al medio ambiente. Con base en este nuevo paradigma y a pesar de los éxitos alcanzados durante los últimos años, esta novedosa disciplina está en sus inicios y aún quedan bastantes retos que deben enfrentarse en laboratorios de investigación y desarrollo de institutos, universidades e industrias, por lo que los químicos y las distintas ramas que son partícipes en este crecimiento científico, deben poner en juego sus conocimientos y creatividad para lograr un continuo crecimiento y aportaciones significativas en esta nueva rama en busca de una autonomía química y sustentable.

La termodinámica nos permite entender y controlar las transformaciones energéticas que ocurren en los procesos químicos, permitiendo la optimización de estos, para reducir el consumo de energía y la generación de

104. Wollensack, L.; Budzinski, K.; Backmann, J. Defossilization of pharmaceutical manufacturing, *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*, **2022**, 33, 100586 <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2021.100586>.

residuos. Gracias a la termodinámica, se pueden diseñar procesos más eficientes y sostenibles, contribuyendo así a la protección del medio ambiente y al desarrollo de una industria química más respetuosa con el entorno. La termodinámica ha contribuido significativamente a la visión de una química sustentable al proporcionar un marco teórico y herramientas para analizar y predecir los procesos químicos con el objetivo de maximizar la eficiencia y minimizar daños. Lo anterior se basa en primeramente en la conservación de la energía, esto permite un enfoque más riguroso en la optimización de los procesos químicos para maximizar el rendimiento energético y minimizar las pérdidas. Esto se traduce en un uso más eficiente de los recursos y una reducción en la generación de residuos. Por otro lado, la tendencia hacia una mayor entropía en los sistemas cerrados ha llevado a un énfasis en la selección de reacciones químicas que minimicen la generación de subproductos o residuos indeseables. En resumen, esto ha impulsado el desarrollo de procesos químicos más limpios y sostenibles, proporcionando las bases científicas para la concepción y el diseño de procesos químicos más eficientes.

Se debe inculcar e inspirar a las nuevas generaciones de investigadores que uno de los retos principales de la Química Verde es eliminar gradualmente la generación de materiales peligrosos o nocivos, y sustituirlos por otros menos tóxicos y más seguros. Sin embargo, este proceso debe ser impulsado con desarrollos científicos o tecnológicos y planteamientos de carácter legislativo. Su aplicación en el sector industrial, gubernamental y académico ha generado múltiples beneficios ambientales, económicos y sociales. Aunque muchos procesos están todavía en fase de investigación, la magnitud del cambio es potencialmente promisorio y se observan resultados prometedores. Lo anterior implica un compromiso de todos los entes involucrados en este proceso, ya sea como investigadores, docentes y estudiantes, por lo cual la sociedad debe dar a conocer y comprender la aplicación de medidas a favor de la sostenibilidad que, aunque conlleva a un coste económico a corto plazo, su beneficio a medio y largo plazo es muy promisorio.

Del diseño y la manipulación adecuada de productos químicos, así como de la reducción de las emisiones generadas por las industrias química y farmacéutica, depende en gran parte, el futuro del planeta. Teniendo en cuenta que el desafío de la Química Verde es tan diverso como la imaginación científica, no es de sorprenderse que su aplicación involucre todos los sectores de la sociedad, desde la investigación hasta el gobierno y la educación. Esta última implica formar futuros ciudadanos con actitudes y comportamientos responsables en términos ambientales, abordando una ética profesional que nos permita un crecimiento de población científica en favor al cuidado ambiental. La ética en la Química Verde se basa en la responsabilidad de

los químicos y científicos en general hacia el medio ambiente y la sociedad. Este prototipo ético implica considerar las consecuencias de las acciones en el largo plazo, minimizando los impactos negativos en el medio ambiente, reduciendo el consumo de recursos naturales y evitando la generación de residuos peligrosos. También implica la transparencia en la comunicación de los riesgos asociados a los productos químicos y la colaboración con otros sectores para desarrollar soluciones más sostenibles. Con lo anterior se busca promover una ciencia y una industria química más responsables, que contribuyan a un desarrollo sostenible y a un mundo más saludable y equitativo para todos.

Al aplicar principios termodinámicos, es posible evaluar y optimizar los procesos para reducir las emisiones y minimizar el impacto ambiental de las diversas industrias como la química y farmacéutica. Esto se logra mediante la optimización de las condiciones de reacción para maximizar la eficiencia energética, reducir la generación de residuos y asegurar que las transformaciones químicas sean económicamente viables y sostenibles a largo plazo. Además, la termodinámica proporciona una base científica para evaluar la viabilidad y la espontaneidad de las reacciones químicas bajo diferentes condiciones ambientales y operativas. Esto es crucial para garantizar que las prácticas de Química Verde no solo sean eficientes desde el punto de vista técnico, sino también éticamente responsables. Lo anterior implica considerar las consecuencias a largo plazo de las acciones químicas, priorizando la seguridad ambiental y la salud pública. La transparencia en la comunicación de los riesgos asociados a los productos químicos y la colaboración intersectorial son aspectos clave que la termodinámica ayuda a fundamentar y apoyar.