



INOVAÇÕES NA QUÍMICA VERDE: A APLICAÇÃO DA MODELAGEM COMPUTACIONAL EM PROCESSOS SUSTENTÁVEIS

Júlia Ellen Barboza Aguiar¹, Alan Santana Benevides³, Erenilson dos Santos Moreira²,
Luis Felipe Santana Aguiar², Mario Rodrigues Oliveira², Jaime Dias da Silva Filho²

^{1,2}Programa de Pós-Graduação em Química (PGQUI), Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Jequié, Brasil (juliaellenquimica@gmail.com)

³Secretaria de Educação do Estado da Bahia (SEC-BA), Salvador-BA, Brasil (alanbenevides11@outlook.com)

Resumo: A modelagem computacional tem sido uma ferramenta poderosa para a implementação de práticas sustentáveis em processos químicos. O primeiro estudo de caso discute a escolha de solventes ecológicos com base em simulações computacionais, destacando a eficácia dos solventes eutéticos profundos (DESs) e de suas variantes naturais (NADESSs) na melhoria da biocatálise de CO₂. O segundo estudo aborda a otimização de rotas sintéticas e cristalização na indústria farmacêutica, utilizando o método CAMbD para reduzir os impactos ambientais e melhorar a eficiência do processo. Por fim, o terceiro estudo exemplifica a aplicação da modelagem computacional na previsão de propriedades toxicológicas e da exposição a substâncias químicas, contribuindo para a criação de produtos mais seguros e sustentáveis. A modelagem computacional permite uma abordagem mais racional e eficaz, alinhada aos princípios da Química Verde, tais como a prevenção de impactos ambientais e a redução de riscos toxicológicos.

Palavras-chave: Química computacional; Química Verde; Desenvolvimento sustentável; Otimização de processos.

INTRODUÇÃO

A modelagem computacional consolidou-se como uma ferramenta essencial para a aplicação dos princípios da Química Verde, permitindo o planejamento racional de processos químicos mais sustentáveis. Seu emprego possibilita prever propriedades físico-químicas, selecionar solventes, otimizar rotas sintéticas e estimar riscos toxicológicos antes da realização de experimentos laboratoriais, reduzindo o consumo de reagentes, a geração de resíduos e os impactos ambientais.

Diversas abordagens computacionais, como simulações de dinâmica molecular, métodos quânticos, modelos QSAR e técnicas de aprendizado de máquina, vêm sendo empregadas em áreas como a indústria farmacêutica, a biocatálise e a avaliação de segurança química. Essas ferramentas contribuem diretamente para princípios da Química Verde relacionados ao uso de solventes mais seguros, prevenção de resíduos, aumento da eficiência energética e desenvolvimento de produtos menos tóxicos.

Assim, este trabalho tem como objetivo apresentar exemplos da aplicação da modelagem computacional na promoção da Química Verde, destacando sua contribuição para o desenvolvimento de processos

químicos mais eficientes, seguros e ambientalmente sustentáveis.

MATERIAL E MÉTODOS

Este estudo caracteriza-se como uma revisão narrativa baseada no capítulo "Innovations in Green Chemistry: The Application of Computational Modeling in Sustainable Processes". Foram analisados três estudos de caso que demonstram diferentes aplicações da modelagem computacional na Química Verde. A análise concentrou-se na seleção de solventes verdes por meio de simulações computacionais, otimização de rotas sintéticas e processos de cristalização na indústria farmacêutica e utilização de modelos computacionais para previsão de propriedades toxicológicas e exposição química. Além dos estudos de caso, foram analisados os impactos ambientais e econômicos decorrentes da utilização dessas ferramentas, considerando aspectos relacionados à redução do consumo de reagentes, economia de energia, substituição de ensaios experimentais, avaliação do ciclo de vida e otimização de processos industriais.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A análise dos estudos de caso evidencia que a modelagem computacional tem desempenhado papel



estratégico na implementação dos princípios da Química Verde, permitindo a previsão do comportamento de sistemas químicos antes da realização de experimentos laboratoriais. Essa abordagem reduz significativamente o consumo de reagentes, a geração de resíduos e os custos associados ao desenvolvimento de processos químicos, favorecendo a tomada de decisões mais eficientes e sustentáveis.

No primeiro estudo de caso, referente à seleção de solventes verdes, verificou-se que a combinação entre triagem experimental e simulações computacionais possibilitou identificar misturas de solventes eutéticos profundos (Deep Eutectic Solvents – DESs) e seus derivados naturais (NADESs) com elevado potencial para processos biocatalíticos. A mistura de cloreto de colina e glicerol apresentou desempenho superior na redução enzimática de CO₂ a formiato catalisada pela formiato desidrogenase (FDH), proporcionando aumento de aproximadamente quinze vezes na meia-vida da enzima, além de maior estabilidade do cofator NADH e aumento da produtividade do processo. Esses resultados demonstram que ferramentas computacionais permitem selecionar solventes menos tóxicos e mais eficientes antes mesmo de sua síntese ou aplicação experimental, contribuindo diretamente para os princípios relacionados ao uso de solventes mais seguros, catálise e prevenção de riscos ambientais.

Além disso, o capítulo destaca que métodos como COSMO-RS, simulações de dinâmica molecular e cálculos baseados em mecânica quântica vêm sendo utilizados para prever propriedades físico-químicas e de solubilidade dos DESs em diferentes matrizes. Essas simulações permitem compreender o comportamento molecular dos solventes e planejar racionalmente sistemas solvente-substrato antes da etapa experimental, reduzindo desperdícios de reagentes e tempo de laboratório.

O segundo estudo de caso demonstrou a aplicação da modelagem computacional na otimização de rotas sintéticas e processos de cristalização da indústria farmacêutica. Utilizando o método CAMbD (Computer-Aided Mixture Design), foram integrados modelos termodinâmicos com indicadores ambientais e econômicos, como o fator E (E-factor) e o rendimento cristalino. Essa abordagem permitiu selecionar solventes e antissolventes com menor impacto ambiental e maior eficiência de purificação durante a produção de ácido mefenâmico, reduzindo operações adicionais de troca de solventes e aumentando a eficiência global do processo. Dessa forma, a modelagem computacional promove uma visão integrada entre síntese química e separação,

favorecendo a prevenção da formação de subprodutos e o melhor aproveitamento de matérias-primas.

Outro aspecto relevante abordado no capítulo refere-se à utilização da modelagem computacional para previsão de propriedades toxicológicas e níveis de exposição humana a substâncias químicas. Modelos QSAR aliados a técnicas de aprendizado de máquina vêm sendo empregados por agências reguladoras, como a Environmental Protection Agency (EPA), para priorizar milhares de compostos químicos quanto aos riscos toxicológicos e ambientais. Plataformas como ToxCast e ExpoCast permitem realizar triagens em larga escala, antecipando possíveis efeitos adversos e favorecendo a substituição de substâncias perigosas por alternativas mais seguras antes da produção industrial.

Complementarmente, estudos envolvendo parâmetros de solubilidade de Hansen e o Índice Integrado de Toxicidade (Integrated Toxicity Index – ITI) demonstraram que a modelagem computacional também pode ser aplicada na avaliação da eficiência e segurança de solventes utilizados na conservação do patrimônio cultural. Os resultados indicaram elevada confiabilidade na previsão da aplicabilidade de solventes alternativos, como éteres cíclicos e ésteres metílicos de ácidos graxos (FAMES), sem comprometer a integridade dos materiais originais, ampliando o campo de aplicação das ferramentas computacionais para além da indústria química tradicional.

Sob o ponto de vista ambiental e econômico, o capítulo evidencia que a modelagem computacional possibilita reduzir o número de experimentos laboratoriais, otimizar o uso de energia, minimizar o consumo de insumos e diminuir a geração de resíduos químicos. Além disso, permite realizar avaliações virtuais do ciclo de vida dos processos, antecipando impactos ambientais ainda durante o planejamento experimental. A substituição parcial de ensaios in vivo e in vitro por métodos in silico, apoiados em modelos QSAR e inteligência artificial, representa outro avanço importante, reduzindo custos, tempo de desenvolvimento e utilização de animais em pesquisas toxicológicas.

De maneira geral, os resultados apresentados demonstram que a modelagem computacional atua como uma ferramenta integradora entre eficiência química, sustentabilidade ambiental e viabilidade econômica. Sua utilização permite direcionar experimentos para condições mais promissoras, reduzir falhas experimentais, otimizar processos industriais e incorporar os princípios da Química Verde desde as etapas iniciais do desenvolvimento de produtos e processos químicos. Dessa forma, essas metodologias consolidam-se como importantes



instrumentos para a inovação científica e tecnológica voltada ao desenvolvimento sustentável.

CONCLUSÃO

A modelagem computacional representa uma importante ferramenta para o desenvolvimento de processos químicos sustentáveis. Os estudos analisados demonstram que essas técnicas permitem selecionar solventes mais seguros, otimizar rotas sintéticas, prever propriedades toxicológicas e reduzir impactos ambientais antes da realização de experimentos.

Além de promover ganhos econômicos pela redução de custos e maior eficiência dos processos, a modelagem computacional fortalece a aplicação dos princípios da Química Verde, contribuindo para uma produção química mais limpa, segura e sustentável. Dessa forma, consolida-se como um recurso estratégico para inovação científica e tecnológica na química contemporânea.

REFERÊNCIAS

ANASTAS, P. T.; WARNER, J. C. *Green Chemistry: Theory and Practice*. Oxford University Press, 1998.

BUCKLEY, T. J. et al. *Environment International*, 2023.

LOGARUŠIĆ, M. et al. *Frontiers in Chemistry*, 2024.

MACCHIA, A. et al. *Sustainability*, 2025.

MAMMINO, L. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*, 2022; 2023.

MUHIEDDINE, M. H. et al. *Chemical Engineering Science*, 2022.

TOLMACHEV, D. et al. *International Journal of Molecular Sciences*, 2022.

KREBS, F. C.; McKEAGUE, M. Machine learning and QSAR: A powerful alliance for green chemistry. 2020.

KREBS, Johanna; MCKEAGUE, Maureen. Green Toxicology: Connecting Green Chemistry and Modern Toxicology. *Chemical Research in Toxicology*, [s. l.], vol. 33, no 12, p. 2919–2931, 2020.

JOSHI, Payal B. Navigating with chemometrics and machine learning in chemistry. *Artificial Intelligence Review*, [s. l.], vol. 56, no 9, p. 9089–9114, 2023.

LEWARS, E. G. *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*. New York: Springer, 2011.

LOGARUŠIĆ, Marijan et al. Harnessing the potential of deep eutectic solvents in biocatalysis: design strategies using CO₂ to formate reduction as a case study. *Frontiers in Chemistry*, v. 12, 2024. DOI: 10.3389/fchem.2024.1467810.