

CRESCIMENTO E IMPACTO DA MODELAGEM MOLECULAR NA ECONOMIA CIRCULAR: UMA ANÁLISE BIBLIOMÉTRICA

GROWTH AND IMPACT OF MOLECULAR MODELING IN CIRCULAR ECONOMY: A BIBLIOMETRIC ANALYSIS

Ícaro Hilário Antunes Alves

Aluno de Graduação em Química, 7º período, FTESM

Período PIBIC: maio de 2024 a agosto de 2024

cdcicaro@gmail.com

Julio Cesar Guedes Correia

Orientador, Químico Industrial, D.Sc.

jguedes@cetem.gov.br

Letícia Maia Prates

Coorientadora, Química, D.Sc.

lmprates@cetem.gov.br

RESUMO

A economia circular é um modelo sustentável que visa eliminar desperdício e poluição ao manter produtos em circulação através da reciclagem, reutilização e renovação de materiais, equilibrando aspectos econômicos, ambientais, tecnológicos e sociais. A modelagem molecular permite prever e simular comportamentos de materiais em nível atômico e molecular, aumentando a eficiência de produtos e reduzindo experimentos laboratoriais. Relatórios destacam a modelagem molecular como uma ferramenta bastante promissora na promoção da economia circular, apontando seus impactos positivos em inovação e economia de custos, especialmente nos setores industrial e mineral. Este estudo bibliométrico analisa a interseção entre economia circular e modelagem molecular de 1990 a 2023, usando a base Scopus, revelando um crescimento exponencial de publicações desde 2016 e um aumento significativo nas pesquisas combinadas desde 2018. China, EUA, Reino Unido e Índia lideram em publicações, enquanto o Brasil mostra potencial de ampliação. Ciências Ambientais, Química e Engenharia são áreas influentes nessa interseção. No setor mineral, a economia circular pode ser destacada em estudos de extração de minerais estratégicos de fontes secundárias, como resíduos eletrônicos e baterias, reduzindo a demanda por atividades de mineração.

Palavras-chave: economia circular, modelagem molecular, bibliometria.

ABSTRACT

Circular economy is a sustainable model aimed at eliminating waste and pollution by keeping products in circulation through recycling, reuse, and material renewal, balancing economic, environmental, technological, and social aspects. Molecular modeling allows for the prediction and simulation of material behaviors at the atomic and molecular levels, increasing product efficiency and reducing laboratory experiments. Reports highlight molecular modeling as a highly promising tool in promoting the circular economy, emphasizing its positive impacts on innovation and cost savings, especially in the industrial and mineral sectors. This bibliometric study analyzes the intersection between circular economy and molecular modeling from 1990 to 2023 using the Scopus database, revealing an exponential increase in publications since 2016 and a significant rise in combined research since 2018. China, the USA, the UK, and India lead in publications, while Brazil shows potential for growth. Environmental Sciences, Chemistry, and Engineering are influential areas in this intersection. In the mineral sector, circular economy can be highlighted in studies on the extraction of strategic minerals from secondary sources such as electronic waste and batteries, reducing the demand for mining activities.

Keywords: circular economy, molecular modeling, bibliometrics.

1. INTRODUÇÃO

Economia circular é um modelo de produção e consumo que envolve compartilhar, reutilizar, reparar, renovar e reciclar materiais e produtos existentes pelo maior tempo possível, visando eliminar o desperdício e a poluição. Este sistema busca equilibrar aspectos econômicos, ambientais, tecnológicos e sociais, mantendo os produtos em circulação por meio de manutenção, remanufatura, reciclagem e compostagem, contribuindo para um desenvolvimento sustentável e uma sociedade mais harmoniosa. (EUROPEAN PARLIAMENT, 2015; GHISELLINI et al., 2016; GIESE et al., 2022).

A modelagem molecular, que consiste no uso de métodos computacionais para simular o comportamento da matéria em nível atômico ou molecular, tem contribuído significativamente para a economia circular em diversos setores. O emprego desta técnica reduz ou elimina etapas de bancada, economizando tempo, energia e custos, além de minimizar a necessidade de sintetizar e testar fisicamente numerosos materiais, diminuindo a geração de resíduos. Além disso, propicia maior velocidade ao possibilitar a simulação de processos químicos complexos e previsão de propriedades, o que auxilia na identificação, avaliação e otimização de novos materiais, e permite o desenvolvimento de alternativas mais sustentáveis. (ARMAND et al., 2020; GLEISER, 2023).

O relatório "Molecular Modelling Market Size 2024-2030" publicado pelo Market Reports World (2023) prevê um crescimento anual de 8,6% no mercado global de modelagem molecular, estimado em 1.136,78 milhões de dólares até 2030 (Figura 1-A). Em paralelo, o relatório de Goldbeck (2012) também destaca a importância da modelagem molecular na promoção da inovação, redução de custos, criação de empregos e aumento de receita em empresas entrevistadas (Figura 1-B). Esses dados confirmam a viabilidade econômica e a contribuição essencial da modelagem molecular para a economia circular e a sustentabilidade global, reforçando sua importância como uma ferramenta estratégica e inovadora em escala mundial.

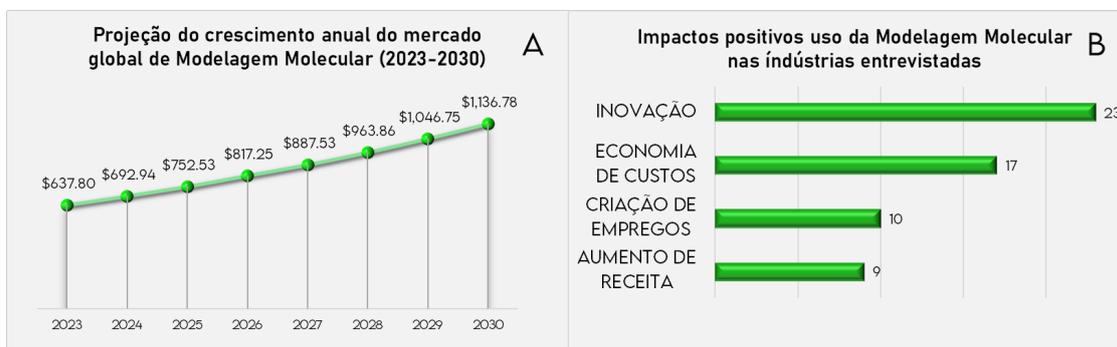


Figura 1: (a) Projeção de crescimento de mercado da modelagem molecular e (b) seus impactos econômicos em empresas (MARKET REPORTS WORLD, 2023; GOLDBECK G., 2012, adaptado).

Dada a relevância do tema para a promoção de um desenvolvimento sustentável, neste estudo é feito um levantamento bibliométrico utilizando a base de dados Scopus que destaca a importância da modelagem molecular na promoção da economia circular e como esta combinação vem contribuindo com o setor mineral.

2. OBJETIVO

Realizar um estudo bibliométrico para avaliar o crescimento das publicações sobre economia circular e a contribuição da modelagem molecular nas últimas três décadas, identificando os países mais relevantes e as áreas de estudo com maior adoção do modelo, com destaque para o setor mineral.

3. METODOLOGIA

Para conduzir o estudo bibliométrico foram estabelecidos os parâmetros período de estudo, que abrange de 1990 a 2023, o banco de dados e as categorias de busca. As buscas foram realizadas em idioma inglês, utilizando uma das maiores bases de dados da literatura internacional, a base Scopus. A ferramenta de pesquisa avançada foi usada, aplicando os critérios de busca ao título, resumo e palavras-chave (TITLE-ABS-KEY), conforme detalhado no Quadro 1.

Quadro 1. Sumário de palavras-chave.

Categoria	Descrição	Palavras-chave
EC	Economia circular	"circular" AND "economy"
ECMM	Economia circular e modelagem molecular	"economy" AND "circular" AND "molecular" AND ("modeling" OR "modelling" OR "simulation")

Duas categorias de busca foram definidas, baseadas nos temas principais que o estudo engloba. A análise considerou o número de publicações por período, relevância entre os países, com particular atenção à posição do Brasil nessa temática, e área de conhecimento quando aplicada na intersecção dos dois assuntos. Com o auxílio de *softwares* de análise de dados, as informações da base de dados foram extraídas e processadas para a elaboração dos gráficos.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A análise dos dados bibliométricos extraídos da base Scopus permitiu identificar tendências significativas em duas categorias principais: economia circular e a intersecção entre economia circular e modelagem molecular, conforme mostrado na Figura 2.

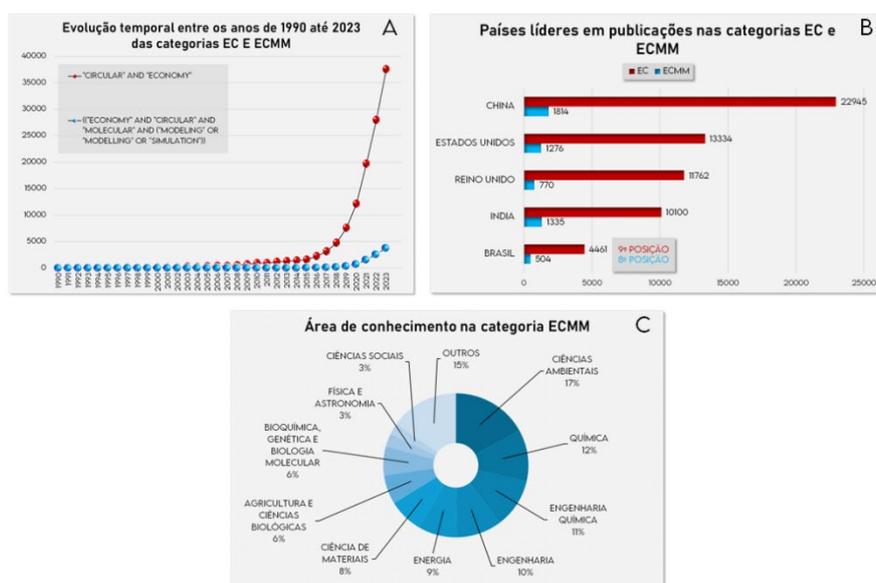


Figura 2: Levantamento bibliométrico do número de publicações nas categorias EC e ECMM (a) por tempo, (b) por contribuição de países e (c) por área de conhecimento.

4.1 Evolução Temporal

Ao longo do período de 1990 a 2023, constatou-se que a economia circular emergiu como um tema de relevância crescente a partir de 2016. Nesse ano, o número de publicações aumentou exponencialmente, passando de 2.223 publicações em 2016 para 37.576 em 2023. Este aumento significativo reflete o interesse crescente e a intensificação da produção científica na área, acumulando um total de 115.038 publicações entre 2016 e 2023 (Figura 1 -A).

A partir de 2018, dois anos após o início do crescimento acentuado na economia circular, observou-se um aumento nas publicações que abordam a combinação de economia circular com modelagem molecular. Em 2018, foram registradas 203 publicações sobre este tema, número que cresceu para 3.795 em 2023. Este crescimento resultou em um total de 9.305 publicações ao longo de seis anos, evidenciando a rápida consolidação da modelagem molecular como uma ferramenta crucial para a economia circular, especialmente no contexto da sustentabilidade.

4.2 Contribuição dos Países

A análise das publicações por país, conforme ilustrado na Figura 1 – B, revela que China, Estados Unidos, Reino Unido e Índia são os principais contribuintes para a produção científica nas áreas de economia circular e modelagem molecular. Esses países têm investido significativamente em tecnologia e ciência alinhadas com parâmetros sustentáveis.

O Brasil, por sua vez, ocupa a nona posição na categoria de economia circular (EC) e a oitava posição na categoria de economia circular combinada com modelagem molecular (ECMM). Apesar de estar atrás dos líderes globais, a posição do Brasil indica um potencial significativo para crescimento. A necessidade de maior investimento em modelagem molecular aplicada à economia circular é evidente, visando não apenas aumentar a produção científica, mas também alinhar-se aos avanços globais e maximizar os benefícios sustentáveis dessa integração.

4.3 Áreas de Conhecimento

A análise bibliométrica da distribuição das publicações nas categorias EC e ECMM nas áreas de conhecimento disponibilizadas pela base de dados Scopus (Figura 1 - C) indica os campos mais influentes nesta interseção temática. As cinco áreas de maior relevância são: Ciência Ambiental, liderando com 17% das publicações, Química com 12%, Engenharia Química com 11%, Engenharia com 10% e Energia com 9%. Estes dados evidenciam a forte interconexão entre as áreas de Química e Engenharia com as Ciências Ambientais, enfatizando a relevância dessas disciplinas no avanço da economia circular.

4.4 Economia Circular no Setor Mineral

No setor mineral, a economia circular tem sido aplicada para reduzir o descarte e prolongar a vida útil de minerais de alto valor econômico, aprimorando etapas de recuperação. Estas iniciativas diminuem a necessidade de obtenção de minerais críticos por atividades de mineração e aumentam a extração em fontes secundárias, como lixo eletrônico, subprodutos industriais e baterias (FUNARI et al., 2024; XAVIER et al., 2023). Como exemplos destaca-se o trabalho de BATISTA et al. (2023), onde processos piro- e hidrometalúrgicos foram empregados para a recuperar lítio e manganês em baterias esgotadas. A modelagem molecular pode auxiliar na compreensão dos mecanismos de extração e na simulação de sistemas para a proposição de métodos mais eficientes e mais sustentáveis. Silva et al (2024) utilizaram simulações computacionais para investigar os mecanismos de extração de cobalto e níquel por sistemas aquosos bifásicos, uma técnica de menor toxicidade e maior flexibilidade que a clássica extração por solvente em meio orgânico.

5. CONCLUSÃO

Em suma, a análise bibliométrica confirma a relevância e o impacto positivo da modelagem molecular na promoção da economia circular, destacando seu potencial para inovações, economia de custos e sustentabilidade, especialmente no setor industrial e mineral. Estas observações reforçam a importância de continuar investindo em pesquisas e tecnologias para um desenvolvimento econômico equilibrado e sustentável.

6. AGRADECIMENTOS

Agradeço ao CNPq pela bolsa de iniciação científica e aos colegas pelo apoio.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ARMAND, M. et al. Review - Development of Hückel Type Anions: From Molecular Modeling to Industrial Commercialization. A Success Story. JES, vol. 167, p. 070562, 21 abr. 2020.

BATISTA, M. et al. Recuperação de lítio de baterias de íons de lítio por uma combinação de processos pirometalúrgico e hidrometalúrgico. JORNADA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA, 2023, Rio de Janeiro. CETEM/MCTI, 2023. 6p.

EUROPEAN PARLIAMENT. Circular economy: definition, importance and benefits. 2015 Disponível em: <https://www.europarl.europa.eu/topics/en/article/20151201STO05603/circular-economy-definition-importance-and-benefits>. Acesso em 3 jul de 2024.

FUNARI, V. et al. Urban mining of municipal solid waste incineration (MSWI) residues with emphasis on bioleaching technologies: a critical review. Environ. Sci. Pollut. Res. Int., vol. 30, p. 59128-59150, 12 abr. 2023.

GIESE, E.C. et al. Cooperatives and e-waste management in Brazil. Rio de Janeiro: CETEM/MCTI, 2022.

GHISELLINI, P. et al. A review on circular economy: The expected transition to a balanced interplay of environmental and economic systems. J. Clean. Prod., vol. 114, p. 11-32, 1 fev. 2016.

GLEISER, I. The benefits of computational chemistry for the circular economy. AWS HPC Blog, 2023. Disponível em: <https://aws.amazon.com/pt/blogs/hpc/the-benefits-of-computational-chemistry-for-the-circular-economy/>. Acesso em: 2 jul 2024.

GOLDBECK, G. The economic impact of molecular modelling of chemicals and materials. 2012. Dissertação/Tese - Goldbeck Consulting, 2012.

MARKET REPORTS WORLD – Molecular Modelling Market Size 2024-2030. 2023. Disponível em: <https://www.linkedin.com/pulse/molecular-modelling-market-size-2024-2030-lufuf/>. Acesso em: 3 jul, 2024.

SILVA, L.A. et al. Computational investigation on the molecular driving forces for extraction of Co^{2+} , Ni^{2+} , and Fe^{3+} in poly(ethylene oxide)/thiocyanate salt aqueous two-phase systems. Hydrometallurgy, vol. 223, p. 106220, jan. 2024.

XAVIER, L.H. et al. A. Diagnóstico da Mineração Urbana dos Resíduos Eletroeletrônicos no Brasil: projeto MINARE: relatório final. Rio de Janeiro: CETEM/MCTI, 2023.