113

Série Estudos e Documentos

Convergências entre economia circular, modelagem molecular e os objetivos de desenvolvimento sustentável

Ícaro Hilário Antunes Alves
Letícia Maia Prates
Julio Cesar Guedes Correia
Kelly Fernandes Pessôa Laeber
Alexandre Nelson Matiniano Carauta

CETEM
CENTRO DE TECNOLOGIA MINERAL



SÉRIE ESTUDOS E DOCUMENTOS

Convergências entre economia circular, modelagem molecular e os objetivos de desenvolvimento sustentável

PRESIDÊNCIA DA REPÚBLICA

Luiz Inácio Lula da Silva
Presidente

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÃO

Luciana Santos
Ministra de Estado

Luis Manuel Rebelo Fernandes
Secretário Executivo

Isa Assef dos Santos
Subsecretária de Unidades de Pesquisa e Organizações Sociais

CETEM – CENTRO DE TECNOLOGIA MINERAL

Silvia Cristina Alves França
Diretora

Robson Araujo D´Avila
Coordenador de Administração - COADM

Andréa Camardella de Lima Rizzo
Coordenadora de Planejamento, Gestão e Inovação - COPGI

Paulo Fernando Almeida Braga
Coordenador de Processamento e Tecnologias Minerais - COPTM

Marisa Nascimento
Coordenadora de Processos Metalúrgicos e Ambientais - COPMA

Leonardo Luiz Lyrio da Silveira
Coordenador de Rochas Ornamentais - CORON

Andrey Linhares Bezerra de Oliveira
Coordenador de Análises Minerais - COAMI

SÉRIE ESTUDOS E DOCUMENTOS

ISSN 0103-6319

SED - 113

Convergências entre economia circular, modelagem molecular e os objetivos de desenvolvimento sustentável

Ícaro Hilário Antunes Alves
Químico com orientação Tecnologia, Licenciado em Química. Mestrado em Química em andamento pela UERJ.

Letícia Maia Prates
Química com orientação Tecnológica, Licenciada em Química, D.Sc. em Química pela UERJ.

Julio Cesar Guedes Correia
Químico Industrial, D.Sc. em Engenharia Mineral pela EPUSP
Pesquisador Titular do CETEM/MCTI

Kelly Fernandes Pessôa Laeber
Química com orientação Tecnológica, Licenciado em Química,
D.Sc. em Química pela UERJ
Professora Docente I do Estado do Rio de Janeiro.

Alexandre Nelson Martiniano Carauta
Químico com orientação Tecnológica, Licenciado em Química, D.Sc. em Química pela PUC-Rio.
Professor Titular de Química do Centro Universitário Souza Marques.

CETEM/MCTI
2026

SÉRIE ESTUDOS E DOCUMENTOS

Editor: Lúcia Helena Xavier

Subeditor: Fabio Giusti Azevedo de Britto

CONSELHO EDITORIAL: Marcelo Mansur (COPPE/UFRJ), Carlos Alberto Mendes Moraes (UNISINOS), Hugo Marcelo Veit (UFRGS), Suzana Borschiver (UFRJ), Sonia Denise Ferreira Rocha (UFMG), Daniel Majuste (UFMG), Carlos Cesar Peiter (CETEM), José Antônio Sena (IBGE), Marcelo Pires Negrão (Universidade de Angers – França), Maria Amélia Enriquez (UFPA), Ana Elezabeth Neirão Reymão (UFPA).

A mineração possui papel fundamental em diferentes setores da economia, mas também resulta em significativos impactos de ordem social e ambiental. Desta forma, a *Série Estudos e Documentos do CETEM* tem como proposta a abordagem da diversidade de temas relativos às atividades de mineração, tais como a provisão de recursos para subsidiar a transição energética, a reestruturação de territórios com a geração de emprego e renda, desenvolvimento de economias locais ou o potencial de recuperação de recursos por meio da economia circular. Dentre os temas compreendidos na série estão: ESG (*environmental, social and corporate governance*), recursos minerais, economia mineral, carbono neutro, transição energética, regulamentação, sustentabilidade, mineração urbana, economia circular, conflitos socioambientais e mineração, royalties da mineração e materiais críticos e estratégicos.

O conteúdo desse trabalho é de responsabilidade exclusiva do(s) autor(es).

Copyright © 2026 CETEM/MCTI

Todos os direitos reservados.
Qualquer parte desta publicação pode ser reproduzida, desde que citada a fonte e atribuídos os devidos créditos. (Lei n. 9.610, de 19/2/1998)

Valéria Cristina de Souza
Diagramação e Editoração Eletrônica

André Luiz Costa Alves
Projeto Gráfico

Informações:
CETEM - Centro de Tecnologia Mineral
Av. Pedro Calmon, 900 - Cidade Universitária
21941-908 - Rio de Janeiro - RJ
Homepage: www.cetem.gov.br

CIP – Catalogação na Publicação

C766
Convergências entre economia circular, modelagem molecular e os objetivos de desenvolvimento sustentável / Ícaro Hilário Antunes Alves ... [et al.]. – Rio de Janeiro: CETEM/MCTI, 2026.
72 p. – (Série Estudos e Documentos; 113).

ISBN 978-65-5919-069-0

1. Economia circular. 2. Modelagem molecular. 3. Desenvolvimento sustentável. 4. Objetivos de desenvolvimento sustentável. I. Alves, Ícaro Hilário Antunes. II. Prates, Letícia Maia. III.Correia, Julio Cesar Guedes. IV. Laeber, Kelly Fernandes Pessôa. V. Carauta, Alexandre Nelson Martiniano. VI. Centro de Tecnologia Mineral. VII. Título. VIII. Série.

CDD 338.927

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do CETEM/MCTI
Bibliotecário(a) Rosana Silva de Oliveira CRB7 – 5849

SUMÁRIO

RESUMO 7

ABSTRACT 8

1 | INTRODUÇÃO 9

2 | OBJETIVO 14

3 | ECONOMIA CIRCULAR: UM PILAR PARA A SUSTENTABILIDADE 15

4 | MODELAGEM MOLECULAR 18

4.1 | Mecânica Molecular 20

4.2 | Dinâmica Molecular 24

4.3 | Métodos Semiempíricos 28

4.4 | Métodos Quânticos 31

4.5 | Teoria Funcional de Densidade (DFT) 34

5 | INTEGRAÇÃO COM A MODELAGEM MOLECULAR E A ECONOMIA CIRCULAR 38

6 | INTERSEÇÃO ENTRE A ECONOMIA CIRCULAR, MODELAGEM MOLECULAR E OS OBJETIVOS DE DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL 42

7 | ECONOMIA CIRCULAR E MODELAGEM MOLECULAR NO SETOR MINERAL 49

8 | CONCLUSÃO 58

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 61

RESUMO

O trabalho investiga a integração entre Economia Circular (EC) e Modelagem Molecular (MM) como abordagem inovadora para impulsionar a sustentabilidade e alinhar-se aos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) da Agenda 2030. A EC é apresentada como alternativa ao modelo linear tradicional, priorizando práticas de reuso, reciclagem e otimização de recursos, com vistas à redução de resíduos e à criação de processos industriais mais eficientes e regenerativos. A MM é caracterizada como uma ferramenta científica avançada, capaz de prever propriedades estruturais, químicas e termodinâmicas de sistemas complexos. Essa capacidade permite o desenvolvimento racional de novos materiais, a otimização de processos industriais e a mitigação de impactos ambientais. Entre os métodos abordados, destacam-se a Mecânica Molecular, a Dinâmica Molecular e a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), amplamente aplicados nos setores farmacêutico, energético e mineral. No contexto mineral, o estudo evidencia como simulações computacionais promovem avanços significativos na extração e reaproveitamento de metais, contribuindo para maior eficiência produtiva e uso sustentável de recursos. A convergência entre EC e MM é, portanto, apresentada como eixo estratégico para inovação tecnológica, preservação ambiental e fortalecimento das práticas de desenvolvimento sustentável.

Palavras-chave

Economia circular, modelagem molecular, sustentabilidade, objetivos de desenvolvimento sustentável, agenda 2030.

ABSTRACT

The study investigates the integration between Circular Economy (CE) and Molecular Modeling (MM) as an innovative approach to drive sustainability and align with the Sustainable Development Goals (SDGs) of the 2030 Agenda. CE is presented as an alternative to the traditional linear model, prioritizing practices of reuse, recycling, and resource optimization, aiming to reduce waste and create more efficient and regenerative industrial processes. MM is characterized as an advanced scientific tool capable of predicting structural, chemical, and thermodynamic properties of complex systems. This capability enables the rational development of new materials, optimization of industrial processes, and mitigation of environmental impacts. Among the methods discussed are Molecular Mechanics, Molecular Dynamics, and Density Functional Theory (DFT), widely applied in the pharmaceutical, energy, and mineral sectors. In the mineral context, the study highlights how computational simulations promote significant advances in metal extraction and reuse, contributing to greater production efficiency and sustainable resource use. The convergence between CE and MM is therefore presented as a strategic axis for technological innovation, environmental preservation, and the strengthening of sustainable development practices.

Keywords
Circular economy, molecular modeling, sustainability, sustainable development goals, agenda 2030.

1 | INTRODUÇÃO

A emergência climática, intensificada pela crescente frequência de eventos extremos, pela degradação acelerada dos ecossistemas e pelo aprofundamento das desigualdades socioeconômicas, impõe a necessidade urgente de repensar os atuais modelos de produção e consumo. A insustentabilidade das práticas industriais lineares tradicionais, baseadas na extração intensiva de recursos, na produção em larga escala e na gestão ineficiente de resíduos, tornou-se incompatível com os limites planetários e a capacidade de resiliência dos sistemas terrestres, bem como com os compromissos éticos intergeracionais que devem nortear as decisões contemporâneas. Nesse contexto, o Balanço Ético Global (BEG), lançado pelo governo brasileiro em articulação com a Organização das Nações Unidas (ONU) e sob a liderança da Presidência da COP30, configura-se como uma iniciativa política e humanitária inovadora para reorientar a governança ambiental internacional. O BEG convoca governos, setor privado e sociedade civil a reassumirem suas responsabilidades frente à crise climática, com base em princípios de justiça climática, equidade e sustentabilidade (BRASIL, 2025).

Inspirado pelo primeiro Balanço Global do Acordo de Paris, o BEG busca transcender os limites da análise técnica, incorporando a dimensão ética como um fator estruturante para a implementação das metas climáticas globais. Ao enfatizar a urgência da transformação ecológica e a centralidade da justiça intergeracional, essa iniciativa reafirma a importância de integrar conhecimentos científicos de ponta com valores culturais, sociais e ambientais, propondo uma ética socioambiental global orientada pela solidariedade e pelo respeito à vida em todas as suas formas. Nesse contexto de transição para um novo paradigma

civilizatório, a Economia Circular (EC) emerge como um modelo promissor, capaz de redefinir o ciclo de vida dos materiais, contribuir para a descarbonização da economia e promover cadeias produtivas regenerativas que minimizem o desperdício, preservem os recursos naturais e priorizem a prevenção da geração de resíduos.

A Economia Circular busca promover a dissociação entre o crescimento econômico, a extração de recursos naturais e a geração de resíduos, por meio da manutenção dos recursos em uso e da valorização contínua dos materiais ao longo de seus ciclos de vida, substituindo a lógica linear de produção e descarte ao privilegiar práticas, por exemplo de: reuso, reciclagem, remanufatura e recuperação de produtos e materiais ao longo de todo o ciclo produtivo.

Ao projetar sistemas nos quais os produtos e materiais são mantidos em uso pelo maior tempo possível, este modelo busca conservar o valor econômico incorporado aos produtos, reduzir a pressão sobre os ecossistemas, diminuir as emissões de gases de efeito estufa e fortalecer a resiliência industrial frente às mudanças ambientais e geopolíticas. Seus princípios orientadores estão ancorados na eliminação de resíduos e poluentes desde a concepção dos produtos, na regeneração dos sistemas naturais e na circulação contínua de materiais em ciclos técnicos e biológicos fechados e otimizados (BENATTI, 2024).

No entanto, a plena implementação da Economia Circular exige o suporte de tecnologias e abordagens inovadoras, capazes de oferecer soluções eficazes, ambientalmente responsáveis e economicamente viáveis. Nesse sentido, a Modelagem Molecular (MM) desponta como uma ferramenta científica estratégica, com potencial para impulsionar a transição para uma economia

verdadeiramente sustentável. Ao permitir a investigação e a previsão, em escala molecular, das propriedades, estruturas e interações entre materiais e moléculas, a MM pode contribuir para o desenvolvimento de produtos mais eficientes e sustentáveis, a seleção e o aprimoramento de matérias-primas, a otimização de processos e o uso mais racional de recursos. Além disso, sua aplicação possibilita reduzir a necessidade de experimentação laboratorial, o consumo de insumos e energia e a geração de resíduos, bem como orientar o desenvolvimento de materiais com maior durabilidade, reciclabilidade, reutilização e potencial de recuperação. Dessa forma, a MM constitui uma abordagem de suporte à Economia Circular, favorecendo decisões baseadas em evidências e a concepção de soluções que considerem, desde as etapas iniciais de desenvolvimento, o ciclo de vida dos materiais e produtos.

A MM compreende um conjunto de métodos computacionais multiescala, que incluem desde técnicas baseadas em mecânica quântica até abordagens clássicas de mecânica molecular e dinâmica molecular, permitindo simular sistemas físicos e químicos, como átomos, moléculas, sólidos, líquidos e gases, com elevado grau de precisão (PESSÔA, 2020; OLIVEIRA, 2018). Essa abordagem possibilita a análise aprofundada das propriedades estruturais, eletrônicas e termodinâmicas de materiais, favorecendo o desenvolvimento racional de novas substâncias, catalisadores, membranas e processos industriais de baixo impacto ambiental e maior eficiência funcional.

A convergência entre Economia Circular e Modelagem Molecular representa uma estratégia poderosa para enfrentar os desafios ambientais contemporâneos. Ao integrar a MM à EC como ferramenta estratégica, é possível projetar, por exemplo,

catalisadores seletivos, solventes verdes, materiais biodegradáveis, polímeros de alto desempenho e materiais funcionais destinados a aplicações em purificação, captura de carbono, remediação ambiental e aproveitamento energético.

Nesse contexto, o conceito de *Circular-by-Design* emerge como uma abordagem estratégica para integrar os princípios da Economia Circular às etapas iniciais de desenvolvimento de materiais e produtos. Diferentemente de uma perspectiva convencional, na qual aspectos relacionados à reutilização, recuperação ou reciclagem são considerados apenas ao final do ciclo de vida, o *Circular-by-Design* incorpora a circularidade como requisito desde a concepção do produto. Nesse cenário, a Modelagem Molecular (MM) pode desempenhar um papel relevante ao permitir a investigação e a previsão das relações entre estrutura molecular, propriedades e desempenho dos materiais, contribuindo para a seleção e o desenvolvimento de sistemas que apresentem maior potencial de durabilidade, reutilização, separação, recuperação, reciclagem ou degradação controlada. Dessa forma, a integração entre Modelagem Molecular e *Circular-by-Design* possibilita uma abordagem preditiva para o desenvolvimento de materiais mais eficientes e circulares, reduzindo a dependência de processos de tentativa e erro e contribuindo para a redução do consumo de recursos, energia e geração de resíduos ao longo do ciclo de vida.

Essas inovações contribuem para a redução do consumo de recursos e das emissões associadas à produção industrial, ao mesmo tempo em que viabilizam a adoção de modelos produtivos mais eficientes, seguros e adaptáveis a diferentes contextos socioeconômicos. Ademais, essa sinergia fortalece a capacidade das indústrias em atender às exigências regulatórias internacionais, ampliando sua competitividade e reputação diante de um mercado cada vez mais orientado por critérios de sustentabilidade.

Portanto, a articulação entre os princípios da Economia Circular e as tecnologias avançadas oferecidas pela Modelagem Molecular constitui um eixo estratégico para a promoção da inovação sustentável, plenamente alinhado às diretrizes do Balanço Ético Global e às metas estabelecidas no Acordo de Paris. Essa abordagem integrada, que combina rigor técnico com responsabilidade ética, contribui diretamente para o alcance dos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS), sobretudo aqueles voltados à ação climática, à inovação e infraestrutura, ao consumo e produção responsáveis, e à preservação dos ecossistemas terrestres e aquáticos. Assim, a incorporação dessa perspectiva nos debates científicos, políticos e econômicos contemporâneos torna-se imprescindível para construir um futuro no qual o desenvolvimento tecnológico seja compatível com a justiça social e a integridade ambiental (BRASIL, 2025).

2 | OBJETIVO

O presente trabalho teve como objetivo realizar uma revisão bibliográfica sistemática da literatura sobre os fundamentos, aplicações e contribuições da Economia Circular, da Modelagem Molecular e de métodos selecionados de Química Computacional, buscando identificar suas principais interfaces, potencialidades e contribuições para o avanço dos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS).

3 | ECONOMIA CIRCULAR: UM PILAR PARA A SUSTENTABILIDADE

A Economia Circular (EC) é um sistema de produção industrial que busca manter produtos, componentes e materiais em circulação, com o objetivo de prevenir a geração de resíduos e reduzir a poluição, além de maximizar o valor dos recursos e promover o uso de matérias-primas renováveis. Diversos outros processos são abordados no contexto da Economia Circular, como manutenção, reutilização, recondicionamento, remanufatura, reciclagem e compostagem. A essência desse modelo é projetar produtos e sistemas de forma a eliminar o desperdício através de ciclos fechados e otimizados de produtos, componentes e materiais, garantindo que eles permaneçam em sua mais alta utilidade e valor econômico e ambiental (ELLEN MACARTHUR FOUNDATION, 2019; XAVIER, 2019).

Um exemplo relevante é o estudo de CECCI et al. (2019), que investigou as fibras do pseudocaule da bananeira, comparando-as com fibras naturais de juta e sisal, buscando identificar novas aplicações sustentáveis e ecológicas. Esse estudo analisou as características morfológicas e as propriedades mecânicas das fibras, como a resistência à tração e alongamento, impulsionado pela crescente conscientização ambiental e pelo grande volume de resíduos de pseudocaules gerados pela produção agrícola no Brasil. Neste processo, o resíduo de baixo valor agregado é valorizado e convertido em um novo produto, mantendo assim seu valor econômico e funcional ao máximo.

A consolidação de um desenvolvimento econômico sustentável requer o uso eficiente de recursos, matérias-primas e energia, substituindo o modelo linear de produção e consumo por um modelo circular que prioriza a redução de resíduos, a reutilização e

a valorização de materiais. Estudos indicam que essa transição pode gerar até 600 bilhões de euros em ganhos anuais no setor manufatureiro da União Europeia até 2025. Além disso, países como, China, Japão, Reino Unido, França e Canadá, já implementam esse novo sistema como estratégia para promover um crescimento econômico sustentável (ELLEN MACARTHUR FOUNDATION, 2016; CIRAIG, 2015; KORHONEN et al., 2018). A Economia Circular, ao reutilizar, renovar e valorizar materiais e energia, minimiza o desperdício, preserva os ecossistemas e reduz os impactos ambientais, contribuindo para a conservação dos recursos e para um crescimento econômico mais resiliente, como ilustrado na Figura 1.



Fonte: VICKERS, (2019).

Figura 1. Ciclo da Economia Circular.

Nesse modelo, a produção de bens sustentáveis prioriza processos limpos, prolonga a vida útil dos produtos e, ao final do ciclo de uso, viabiliza a reciclagem de resíduos para a geração de novos produtos. Aqui se faz menção, também a série ISO 59000,

ressaltando a importância do Brasil como líder em boa parte do processo. A implementação estruturada da Economia Circular (EC) no Brasil apresenta potencial para promover benefícios econômicos, sociais e ambientais significativos, embora a magnitude e a abrangência desses impactos ainda não estejam suficientemente quantificadas e compreendidas no contexto nacional. Em particular, a adoção de princípios e estratégias de circularidade pode contribuir para o enfrentamento de desafios sistêmicos associados às mudanças climáticas, por meio da redução do consumo de recursos naturais, da minimização da geração de resíduos, da manutenção do valor dos materiais e produtos em ciclos produtivos e da redução das emissões de gases de efeito estufa.

Contudo, esse potencial permanece parcialmente inexplorado, evidenciando a necessidade de ampliar a produção de conhecimento científico, a avaliação de impactos e a identificação de mecanismos capazes de viabilizar sua aplicação em diferentes setores da economia. Nesse contexto, o envolvimento articulado de instituições públicas, privadas, acadêmicas e de pesquisa torna-se fundamental para o desenvolvimento de políticas, tecnologias, modelos de negócio e estratégias de governança capazes de promover a transição para uma economia circular no Brasil.

A série ISO 5900, é uma família de normas internacionais criada especificamente para estabelecer conceitos, princípios, métodos de implementação e formas de mensuração da Economia Circular (EC). Ela foi desenvolvida pelo comitê técnico ISO/TC 323 – Circular Economy e passou a ter suas principais normas publicadas em 2024. (VALENTE, 2024; VICKERS, 2019; GUARNIERI et al., 2026).

4 | MODELAGEM MOLECULAR

De acordo com Goldbeck (2012), a modelagem e simulação molecular utilizam técnicas para compreender e prever o comportamento de sistemas atômicos e moleculares, empregando metodologias baseadas em mecânica quântica e em abordagens clássicas de dinâmica molecular (DM). Os métodos de química computacional podem ser classificados em duas categorias principais: os métodos clássicos, que incluem mecânica molecular e dinâmica molecular, e os métodos quânticos, como os semiempíricos, ab initio e Teoria do Funcional da Densidade (DFT). No entanto, neste trabalho, serão destacados apenas os métodos mais utilizados no Laboratório de Modelagem Molecular (LABMOL) do Centro de Tecnologia Mineral (CETEM), que incluem mecânica molecular, DM e DFT (MORGON e COUTINHO, 2007; BARROS, 2010).

Para que a Modelagem Molecular possa simular com precisão os sistemas mais próximos do real, é necessário definir um modelo que descreva o comportamento do sistema, incluindo as interações inter- e intramoleculares. A escolha do método deve ser baseada em três critérios principais: o tamanho do sistema (número de átomos), a propriedade a ser estudada e o custo computacional, considerando o hardware disponível. Essas etapas são fundamentais, pois a escolha correta do método, permite uma otimização do tempo e diminuição do custo computacional de um projeto (BARROS, 2010; PESSÔA, et. al. 2018).

Os métodos clássicos (ou empíricos) utilizam abordagens baseadas em parâmetros derivados de dados experimentais, sendo empregados em softwares como HyperChem (FROIMOWITZ, 1993). Os métodos semiempíricos, por sua vez, embora fundamentados na mecânica quântica, combinam princípios

teóricos com parâmetros ajustados experimentalmente, de modo a simplificar os cálculos e reduzir o custo computacional. Estão disponíveis em programas como GAUSSIAN (FRISCH et al., 2016), MOPAC (*Molecular Orbital Package*) (STEWART, 2016), xTB (*eXtended Tight-Binding*) (BANNWARTH et al., 2020) e no HyperChem (FROIMOWITZ, 1993), que incorpora níveis empíricos e semiempíricos.

Esses métodos utilizam aproximações semiempíricas do Hamiltoniano, como os modelos AM1 (DEWAR et al., 1985), PM3 (STEWART, 1991) e MNDO (DEWAR e THIEL, 1977), para estimar de forma simplificada a energia total do sistema molecular. Nesses modelos, certos parâmetros são ajustados empiricamente com base em dados experimentais e cálculos ab initio, permitindo descrever de maneira eficiente as interações eletrônicas com custo computacional reduzido. O Hamiltoniano, por sua vez, é o operador fundamental que representa a energia total de um sistema quântico (cinética dos elétrons e núcleos, além das energias potenciais de interação), servindo de base para todos os métodos de modelagem e simulação molecular.

A partir dessa fundamentação, os métodos ab initio configuram-se como abordagens totalmente teóricas, baseadas diretamente nos princípios da mecânica quântica e que, em princípio, não dependem de parâmetros ajustados empiricamente. Esses métodos estão amplamente implementados em softwares como GAUSSIAN (FRISCH et al., 2016), GAMESS (BARCA et al., 2020) e ORCA (NEESE, 2025).

Complementarmente, a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) representa uma vertente quântica voltada para o estudo da estrutura eletrônica, utilizando a densidade eletrônica como variável central e incorporando, de forma aproximada, os efeitos

de correlação eletrônica (BARROS, 2010; PESSÔA et al., 2018). Essa metodologia também está presente em programas como GAUSSIAN, HyperChem e ORCA, consolidando-se como uma das principais ferramentas para o cálculo de propriedades moleculares e energéticas.

4.1. | Mecânica Molecular

A Mecânica Molecular é um dos métodos clássicos amplamente utilizados em Modelagem Molecular, sendo baseada em campos de força empíricos que se fundamentam nas leis da mecânica clássica. Nesse método, as moléculas são representadas como um conjunto de "átomos conectados" por ligações, diferentemente dos métodos quânticos, que consideram explicitamente os núcleos e elétrons. Os campos de força utilizados consistem em um conjunto de funções de energia que impõem penalidades energéticas quando os parâmetros geométricos das moléculas (como comprimentos de ligação, ângulos e torções) se afastam de seus valores de equilíbrio. A conformação mais estável de uma molécula é determinada por uma equação de energia potencial que inclui a soma de múltiplos termos, cada uma descrevendo movimentos moleculares específicos, como vibrações, rotações e interações entre diferentes partes da molécula. Esses termos são baseados em princípios da mecânica clássica e fornecem uma representação matemática detalhada das forças atuando no sistema molecular. O processo de minimização de energia, realizado por meio de algoritmos matemáticos apropriados, busca reduzir essas penalidades energéticas até atingir um valor mínimo, correspondente ao estado mais estável da molécula (SANT'ANNA, 2009; PESSÔA, et al., 2018).

A principal equação que governa os métodos baseados em Mecânica Molecular é conhecida como Campo de Força (CF). Seguindo a definição da IUPAC, pode ser descrito como "um conjunto de funções e parametrização usadas em cálculos de

Mecânica Molecular". Essa equação descreve a energia total do sistema molecular como a soma de diferentes potenciais analíticos clássicos, que são cuidadosamente parametrizados para reproduzir com precisão determinadas propriedades estruturais e termodinâmicas das moléculas. O cálculo da energia total leva em consideração uma série de interações intra- e intermoleculares, incluindo deformações em comprimentos de ligação, variações nos ângulos entre átomos, torções em torno de ligações, além de termos cruzados, como os que relacionam deformações simultâneas de ligação e ângulo. Também estão incluídas interações descritas pelo termo de Urey-Bradley, que considera as forças entre átomos ligados a um mesmo centro, bem como forças eletrostáticas de Coulomb e interações de van der Waals representadas pelo potencial de Lennard-Jones. Todas essas contribuições estão formalmente expressas na Equação 1, que se desdobra em termos específicos nas Equações 2 e 3 (PESSÔA, 2020).

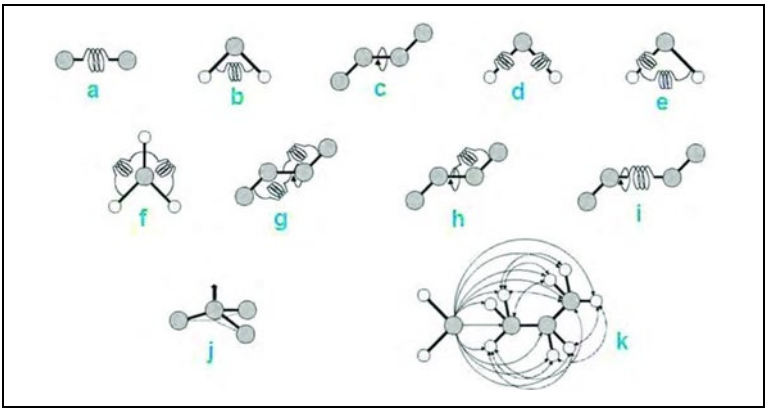
$$E_{total} = E_{valência} + E_{termos\ cruzados} + E_{termos\ não\ ligados} \quad (1)$$

$$E_{valência} = E_{ligação} + E_{angular} + E_{torsional} + E_{interações\ oop} + E_{termo\ UB} \quad (2)$$

$$E_{não\text{-}ligados} = E_{vdW} + E_{Coulomb} + E_{ligações\ de\ H} \quad (3)$$

Os diferentes componentes da Equação 1 estão ilustrados na Figura 2, que apresenta de forma esquemática como cada termo contribui para a energia potencial total do sistema. As Equações 2 e 3 exemplificam os termos da Equação 1. Esses termos refletem as diversas interações moleculares que determinam o comportamento dinâmico e a estabilidade estrutural das moléculas. Assim, a Mecânica Molecular, ao descrever interações

por meio do uso de campos de força[1], fornece uma ferramenta poderosa para estudar e prever propriedades moleculares com precisão e eficiência.



Fonte: MAGALHÃES, (2014).

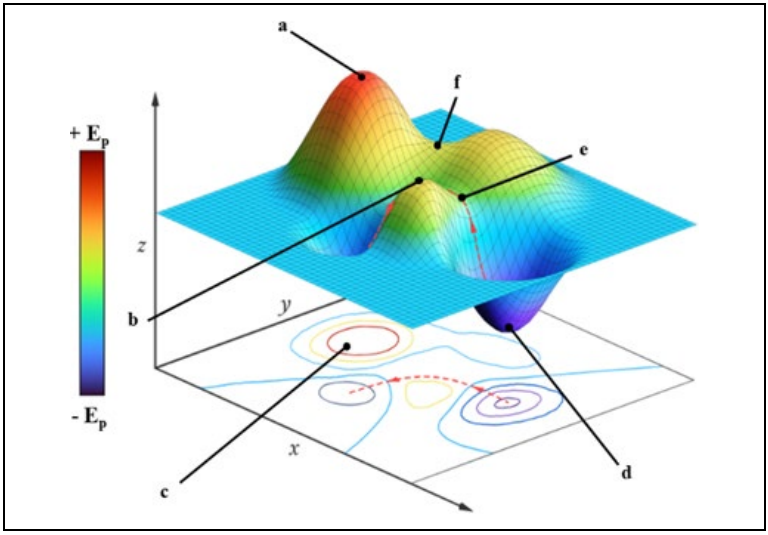
Figura 2. Forças de interações e deformações implícitas na composição de um campo de força.

Em relação à busca pela estabilidade estrutural e à previsão das interações moleculares, a otimização de geometria consiste em ajustar as coordenadas atômicas de uma molécula até que se obtenha uma conformação correspondente a um mínimo de energia potencial. Este procedimento é necessário visto que a estrutura de partida fornecida para o cálculo, a qual pode ser construída em um *software* gráfico, como o Avogadro ou

[1] Descrição dos componentes de um campo de força de acordo com a Figura 2: (a) Deformação no comprimento da ligação; (b) Deformação angular; (c) Torção da rotação em redor de um eixo; (d,e,f,g,h,i) Energia correspondente às ligações cruzadas; (j) Energia de van der Waals; (k) Forças eletrostáticas.

GaussView, ou obtida em um banco de dados, pode ter uma conformação distante de um mínimo local de energia, conforme mostrado na Figura 3, a qual ilustra uma superfície de energia potencial (SEP).

A SEP é uma representação matemática da energia potencial de um sistema, geralmente composto por um conjunto de átomos, em função das suas coordenadas nucleares. Essa superfície descreve como a energia do sistema varia conforme as posições dos núcleos são modificadas. O conceito fundamental é que cada configuração geométrica possível de uma molécula corresponde a um valor único de energia potencial, permitindo identificar mínimos locais (estruturas estáveis) e pontos de sela (estados de transição) ao longo de uma reação química (PESSÔA, 2020; KAYA, [s.d.]).



Fonte: KAYA (s.d.), adaptado.

Figura 3. Superfície de energia potencial.

Na Figura 3, os pontos indicados representam diferentes características da superfície de energia potencial (SEP): (a) máximo global, correspondente ao ponto de maior energia da SEP, geralmente inacessível em condições experimentais comuns; (b) máximo local, ponto de energia elevada em relação às configurações vizinhas, mas menor que o máximo global, podendo representar regiões instáveis; (c) mínimo local, ponto de energia menor que as configurações ao seu redor, mas não o mais estável de toda a superfície; (d) mínimo global, ponto de menor energia da SEP, associado à conformação mais estável da molécula; e (e, f) pontos de sela, que correspondem a pontos de energia crítica, sendo mínimos em uma direção e máximos em outra ao longo do caminho de reação. Esses pontos de sela estão diretamente relacionados aos estados de transição, representando configurações de energia máxima ao longo da trajetória reacional (ATKINS e PAULA, 2017).

4.2. | Dinâmica Molecular

A Dinâmica Molecular baseia-se nos fundamentos da Mecânica Molecular, onde as moléculas são tratadas como conjuntos de átomos cujos comportamentos podem ser descritos por forças newtonianas. Esse método é regido pela 2ª Lei de Newton, a qual afirma que a força resultante exercida sobre um corpo ou átomo é proporcional ao produto de sua massa pela aceleração.

A solução das equações de movimento da Dinâmica Molecular permite descrever a evolução temporal dos movimentos moleculares, conhecidos como trajetórias.

Essas trajetórias são cruciais para investigar propriedades dependentes do tempo, como o processo de difusão, o

enovelamento de proteínas e a distribuição de moléculas de solvente em torno de solutos (SANT'ANNA, 2002).

Através de procedimentos computacionais, a Dinâmica Molecular fornece uma descrição em nível atômico das mudanças que ocorrem em uma molécula ao longo do tempo. Esse método determina as trajetórias no espaço de fase, resolvendo numericamente as equações de movimento (PESSÔA et al., 2018).

Os cálculos de Dinâmica Molecular são conduzidos mediante a integração das equações derivadas da 2ª Lei de Newton, expressas pelas seguintes formulações:

$$F_i(t) = m_i a_i \tag{4}$$

$$F_i(t) = -\frac{\partial V(r_i)}{\partial \vec{r_i}} \tag{5}$$

De acordo com essa lei, a força F_i que atua sobre cada partícula em um dado instante t é igual ao produto da massa m_i do átomo i por sua aceleração a_i. Para calcular essas forças, é necessário definir um campo de força, que é um conjunto de funções matemáticas e parâmetros empíricos utilizados para descrever as interações entre os átomos de um sistema.

O campo de força permite calcular a energia potencial total do sistema V(r), que é derivada da estrutura tridimensional da molécula. A energia potencial V(r) é expressa como a soma de diferentes contribuições de energia, incluindo termos que descrevem interações entre átomos ligados e não ligados. Com a finalidade de determinar a aceleração de partícula, integrando as equações de movimento, obtêm-se as velocidades, permitindo calculas as novas posições dos átomos, prevendo o

comportamento futuro do sistema em estudo (NAMBA e SILVA, 2008). A fórmula para a energia potencial total do sistema é representada na Equação 6.

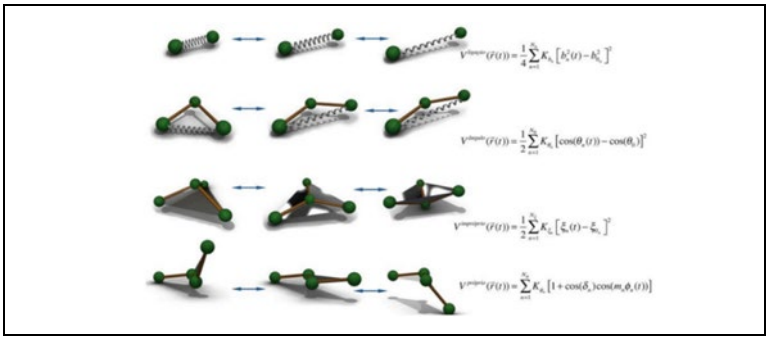
$$V(r) = \sum v_i + \sum v_o + \sum V_{vdW} + \sum V_{elet} \quad (6)$$

onde, V_i é a energia de estiramento das ligações, V_0 é a energia de deformação do ângulo de ligação em relação ao valor de equilíbrio, V_{vdW} é a energia associada às interações de van der Waals, e V_{elet} é a energia eletrostática, que representa as forças de atrações ou repulsão entre cargas.

Os campos de força disponíveis foram desenvolvidos de forma independente, cada um contendo um conjunto específico de parâmetros que refletem diferentes metodologias e pressupostos. A escolha do campo de força mais apropriado está diretamente relacionada ao tipo de sistema que se pretende estudar e às propriedades que se deseja analisar. A seleção entre eles depende, em grande parte, das especificidades do sistema e das propriedades alvo da investigação.

Entre os campos de força mais utilizados estão AMBER, CHARMM, OPLS e GROMOS.

Esses campos de força são amplamente reconhecidos por sua capacidade de representar de forma precisa as interações moleculares, proporcionando modelos mais robustos e confiáveis, visto que, essa abordagem considera características como a flexibilidade molecular por variação temporal de propriedades e os efeitos da temperatura, os quais são incorporados por meio da aceleração dos átomos, na Figura 4, é ilustrado, como exemplo, alguns termos que compõe o campo de força GROMOS96 (NAMBA e SILVA, 2008; VERLI, 2014).



Fonte: VERLI, (2014).

Figura 4. Representação de alguns termos que compõe o campo de força GROMOS96.

Um dos programas mais amplamente utilizados para cálculos de Dinâmica Molecular (DM) é o GROMACS (GROningen MAchine for Chemical Simulations) (ABRAHAM et al., 2024), um software de código aberto e livre acesso. Ele permite simular sistemas que vão desde moléculas biológicas, como proteínas, lipídios e ácidos nucleicos, até materiais inorgânicos e híbridos, mediante o uso de campos de força apropriados que descrevem as interações entre os átomos. Embora tenha sido originalmente desenvolvido para o estudo de biomoléculas, o GROMACS evoluiu significativamente, incorporando funcionalidades que permitem a simulação de materiais complexos, interfaces e interações externas, como campos elétricos e gradientes de pressão. Isso o torna altamente eficiente em simulações com diversos tipos de moléculas, devido à sua compatibilidade com diferentes campos de força (MOCHIUTTI et al., 2020).

PEREIRA et al. (2023) exemplificaram essa versatilidade ao utilizarem o GROMACS para investigar as propriedades interfaciais de sistemas orgânico-aquosos. Os autores validaram a

aplicação de extratantes organofosforados, como o D2EHPA, em soluções contendo interfaces água/dodecano com dois isômeros do extratante, DOP e DTPP, foram analisados para compreender suas interações na interface. Por meio de simulações de Dinâmica Molecular, foram capazes de caracterizar as propriedades interfaciais desses sistemas, demonstrando a precisão e a ampla aplicabilidade do GROMACS. Destacando que o software não apenas é valorizado pela sua eficiência em materiais biológicos, mas também pela capacidade de simular interações em sistemas químicos diversos.

4.3. | Métodos Semiempíricos

Os métodos semiempíricos constituem uma classe de abordagens em química computacional que buscam soluções aproximadas para a equação de Schrödinger, partindo de fundamentos da mecânica quântica, porém com simplificações significativas voltadas à redução do custo computacional. A equação de Schrödinger, em sua forma completa, envolve a resolução de um número elevado de integrais complexas, cuja avaliação para sistemas polieletrônicos se torna computacionalmente dispendiosa. Assim, os métodos semiempíricos adotam estratégias que negligenciam diversas dessas integrais, substituindo-as por parâmetros ajustados empiricamente, de modo a preservar a precisão dentro de limites aceitáveis para determinadas classes de moléculas (SANT'ANNA, 2009).

Para compensar as omissões inerentes ao modelo, esses métodos empregam parametrizações extensivas baseadas em dados experimentais e, em alguns casos, em cálculos realizados por métodos quânticos mais precisos. Os parâmetros são ajustados de forma a reproduzir com fidelidade propriedades químicas e físicas

como geometrias de equilíbrio molecular, energias de ligação, calores de formação, momentos de dipolo e energias de ionização (PESSÔA et al., 2018). No entanto, essas parametrizações são, em geral, limitadas a famílias moleculares específicas, compostas principalmente por sistemas orgânicos simples. Como consequência, os métodos semiempíricos tendem a apresentar desempenho insatisfatório para moléculas que se desviam dos padrões utilizados na calibração dos parâmetros, particularmente em química inorgânica, em compostos que envolvem metais de transição, ou em sistemas que exigem o tratamento de efeitos relativísticos.

Apesar de suas limitações, os métodos semiempíricos continuam sendo amplamente utilizados no estudo de moléculas de tamanho moderado, especialmente em contextos que requerem rapidez computacional e análises qualitativas iniciais. Entre os principais programas baseados nesses métodos destaca-se o MOPAC, um pacote computacional de domínio público amplamente empregado para a modelagem de estruturas moleculares e reações químicas. O MOPAC implementa diversos hamiltonianos semiempíricos, como MNDO, AM1, PM3, PM6, RM1, MNDO-d e PM7, cada qual com suas particularidades em termos de escopo de aplicação, precisão e nível de parametrização (STEWART, 2016).

Um dos caminhos intermediários entre a mecânica clássica e a mecânica quântica de alta precisão é representado pelo software xTB, cuja implementação reúne uma família de métodos semiempíricos de química quântica desenvolvidos para fornecer descrições rápidas e relativamente precisas de moléculas de grande porte, tanto em fase gasosa quanto em meios condensados. Com parametrizações que abrangem elementos até $Z < 86$, esses

métodos são aplicáveis a uma ampla variedade de sistemas, que vão de moléculas orgânicas a complexos metálicos e compostos organometálicos. Nesse contexto, os métodos da família xTB atuam como um nível intermediário entre os campos de força clássicos e os métodos quânticos mais precisos, oferecendo parte do rigor da química quântica com custo computacional reduzido, característica especialmente útil em estudos exploratórios, triagem molecular e pré-otimizações estruturais.

A fundamentação teórica dos métodos xTB baseia-se em uma expansão de perturbação da teoria do funcional da densidade (DFT) em torno de uma densidade de referência. A energia total do sistema é expressa como uma expansão de Taylor da densidade eletrônica, na qual diferentes ordens da expansão capturam interações de complexidade crescente. A parametrização é ajustada com base em dados de referência provenientes de cálculos quânticos de alta precisão. Entre os modelos implementados, destacam-se o GFN1-xTB e o GFN2-xTB, que incluem termos de ordem superior e requerem soluções iterativas autoconsistentes. Nesses métodos, a determinação dos coeficientes dos orbitais moleculares e das energias associadas envolve a solução de uma equação de autovalor generalizada do tipo Roothaan–Hall, garantindo autoconsistência entre densidade e energia (HOST et al., 2008).

Apesar das vantagens, os métodos xTB apresentam limitações intrínsecas. A precisão na descrição de energias de ligação covalente e na termodinâmica de reações químicas ainda não é comparável à dos métodos baseados em DFT ou ab initio. Além disso, o uso de bases atômicas quase mínimas restringe a representação detalhada dos orbitais moleculares. O tratamento spin-restrito pode ser inadequado para estados de multiplicidade diferente, e os métodos autoconsistentes podem sofrer com erros

de autointeração em sistemas polares, o que pode afetar a convergência. Mesmo assim, especialmente na forma do GFN2-xTB, esses métodos representam uma ferramenta poderosa e eficiente para acelerar pesquisas químicas, equilibrando velocidade, aplicabilidade e precisão relativa, constituindo uma alternativa confiável para pré-otimizações e triagens em sistemas moleculares complexos (BANNWARTH et al., 2020).

4.4. | Métodos Quânticos

Com o objetivo de determinar as propriedades de sistemas atômicos e moleculares por meio da química computacional, a base teórica é fundamentada na mecânica quântica, que busca soluções aproximadas para a equação de Schrödinger (Equação 7), devido à inviabilidade de uma solução exata desta equação para sistemas diferentes de hidrogênio ou de espécies hidrogenoides. Na Equação 7, $\widehat{H}$ é o operador Hamiltoniano, E é a energia total do sistema, e Ψ é a função de onda exata para o estado fundamental, ou estacionário. O operador Hamiltoniano quando aplicado a uma função de onda, permite a obtenção da propriedade energia do sistema. Ele contém termos referentes à energia cinética ($\widehat{T}$) e potencial ($\widehat{V}$) do sistema (Equação 8) (FISCHER, 1987; PESSÔA, 2020; PRATES, 2021).

$$\widehat{H}\Psi = E\Psi \tag{7}$$

$$\widehat{H} = \widehat{T} + \widehat{V} \tag{8}$$

Uma das aproximações fundamentais em mecânica quântica molecular é a aproximação de Born–Oppenheimer, a qual considera que, devido às massas nucleares serem muito maiores

que as massas eletrônicas, os núcleos movem-se muito mais lentamente que os elétrons.

Desta forma, o movimento dos núcleos pode ser desacoplado do movimento dos elétrons, simplificando os cálculos sem comprometer a precisão significativa.

Um exemplo de método *ab initio* ("do início" ou "dos primeiros princípios") é o Hartree-Fock (HF), que resolve a equação de Schrödinger de forma aproximada para sistemas multieletrônicos substituindo a função de onda de N elétrons pelo produto de N funções de um elétron. Cada elétron é tratado como se estivesse em um campo médio gerado pelos demais elétrons, o que inclui parcialmente os efeitos de correlação eletrônica.

Como o operador Hamiltoniano não faz nenhuma referência ao spin, a função de onda de N elétrons deve atender também ao requisito de ser antissimétrica ($\Phi\ (1,2) = -\Phi(2,1)$), refletindo o princípio de exclusão de Pauli, impedindo que dois elétrons estejam no mesmo estado quântico. Isso significa que, ao trocar dois elétrons, o sinal da função de onda muda, garantindo que não estejam no mesmo estado. O valor esperado da energia correspondente a essa função Φ é dado pela Equação 9.

$$E' \geq \int \Phi^* H \Phi d\tau \tag{9}$$

onde, a integração é sobre as coordenadas de todos os elétrons. Se Φ é a função de onda exata, Ψ, para o estado fundamental eletrônico, ela resolverá a equação de Schrödinger (PESSÔA et al, 2018).

Por meio do método de campo autoconsistente (*self-consistent field*, SCF), funções de onda teste, que descrevem orbitais atômicos, são

utilizadas como ponto de partida para resolver iterativamente a Equação 7. A cada iteração, novas funções de onda, diferentes das iniciais, são geradas. Esse conjunto atualizado de funções de onda é então usado para construir novos Hamiltonianos de um elétron. O processo se repete até que a diferença entre os orbitais assumidos e os calculados não varie ou varie dentro de um critério previamente definido, atingindo assim a autoconsistência.

O formalismo Hartree-Fock utiliza a aproximação LCAO (na tradução, Combinação Linear de Orbitais Atômicos) para representar cada orbital de spin, a partir da combinação de orbitais de um elétron, as quais são chamados de funções de base. Para aumentar a flexibilidade na descrição eletrônica, são frequentemente empregados conjuntos de base de valência dividida. Esses conjuntos dividem as funções associadas aos elétrons de valência em dois componentes: um mais interno e compacto e outro mais externo e difuso. Essa abordagem permite uma descrição mais detalhada das interações eletrônicas, especialmente em situações que envolvem ligações químicas mais complexas ou estados excitados. Exemplos de conjuntos de base incluem STO-3G, 6-31+G*, e 6-311++G*, cada um oferecendo diferentes níveis de precisão e capacidade de descrição das interações eletrônicas (BARROS, 2010; SANT'ANNA, 2009).

A teoria HF baseia-se no Princípio Variacional, que afirma que, ao usar uma função de onda arbitrária para calcular a energia, o valor obtido nunca será menor que o da energia verdadeira. O princípio indica que, ao variar os coeficientes da função de onda hipotética para minimizar a energia do sistema, os coeficientes resultantes serão os melhores possíveis para aquela forma particular de função. Embora funções de onda mais complexas possam fornecer energias ainda mais baixas, o orbital molecular

construído a partir de um conjunto de orbitais atômicos tomados como base será o melhor dentro dessa configuração, pois corresponde à energia mínima nessa aproximação (ATKINS e PAULA, 2017).

4.5. | Teoria Funcional de Densidade (DFT)

A Teoria do Funcional de Densidade (*Density Functional Theory* - DFT) é amplamente reconhecida como uma das mais importantes ferramentas da química teórica para o estudo da estrutura eletrônica de moléculas e sólidos. Sua fundamentação estabelece que todas as propriedades eletrônicas de um sistema de muitos elétrons podem ser determinadas a partir de sua densidade eletrônica de estado fundamental, a qual é dependente apenas das coordenadas espaciais. Isso representa uma simplificação significativa em comparação com métodos *ab initio*, como Hartree-Fock (HF), que utilizam funções de onda dependentes de várias variáveis. A simplificação promovida pela Teoria do Funcional da Densidade (DFT) ocorre por meio da introdução de um observável fundamental: a densidade eletrônica (ϱ). Essa variável permite determinar a energia e outras propriedades do sistema. A utilização da densidade eletrônica torna a descrição do sistema mais simples, por se tratar de uma função positiva que depende apenas de três coordenadas espaciais e é independente do número total de elétrons (PRATES, 2021). Ao focar na densidade eletrônica $\varrho(r)$, a DFT torna viável o estudo de sistemas maiores e mais complexos com custos computacionais relativamente mais baixos (MORGON e COUTINHO, 2007; BARROS, 2010).

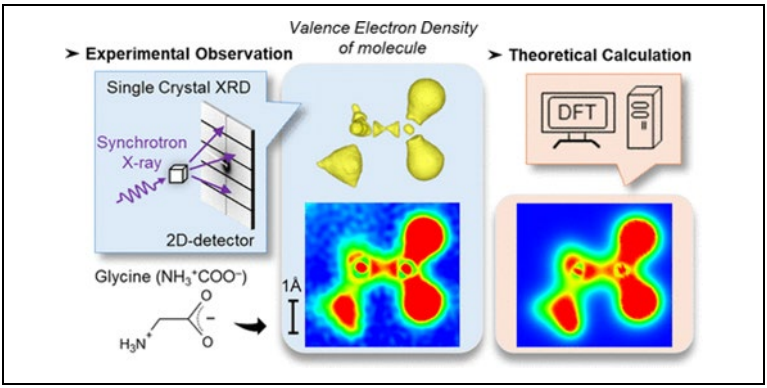
Os funcionais de troca e correlação, componentes fundamentais da DFT, desempenham um papel crucial no tratamento da correlação eletrônica, abordada de forma limitada no método HF.

Em particular, os funcionais híbridos, como o B3LYP[2], combinam uma fração da energia de troca exata do HF com termos empíricos de correlação e troca da DFT, oferecendo boa precisão para cálculos de sistemas moleculares, especialmente para moléculas orgânicas. Esse funcional, frequentemente utilizado em conjunto com conjuntos de base como 6-311++G(d,p), permite otimizações geométricas e cálculos de frequências vibracionais detalhados, ambos essenciais para a previsão de propriedades moleculares (BARROS, 2010; MORGON e COUTINHO, 2007).

A principal vantagem da DFT é sua capacidade de calcular propriedades moleculares com alta precisão, como energia total e eletrônica, geometria de equilíbrio, frequências vibracionais e intensidades de absorção nos espectros infravermelho e ultravioleta. Esses cálculos são especialmente úteis para compreender ligações químicas e reatividade, com base em conceitos como eletronegatividade, potencial químico e dureza, rigorosamente definidos no contexto da DFT conceitual (SANT'ANNA, 2009; MORGON e CUSTÓDIO, 1995; MORGON e COUTINHO, 2007). Além disso, a DFT permite prever propriedades termodinâmicas de sistemas moleculares com alta precisão, evidenciando seu potencial na descrição de sistemas complexos, especialmente quando validada por dados experimentais (PESSÔA et al., 2018; MIRANDA et al., 2024).

O estudo de Hara et al. (2024) combina experimentos de difração de raios X (DRX) com cálculos DFT para investigar a densidade eletrônica da glicina. A técnica de DRX permite observar a distribuição experimental da densidade eletrônica no espaço real, enquanto os cálculos DFT fornecem previsões teóricas com boa precisão com base nos orbitais moleculares ocupados. Essa combinação possibilita uma análise detalhada da densidade

eletrônica em moléculas como a glicina, promovendo uma compreensão aprofundada das ligações químicas e das distribuições de carga. A Figura 5 ilustra o processo combinado.



Fonte: HARA et. al., (2024).

Figura 5. Representação do processo combinado de distribuição da densidade eletrônica de valência da molécula de glicina obtida por difração de raios-X (DRX) e cálculo teórico por DFT.

Um exemplo de aplicação do método DFT é na obtenção da distribuição espacial das densidades de carga parcial em uma molécula por meio de mapas de potencial eletrostático (MPE). Esses mapas são uma ferramenta poderosa para compreender interações intermoleculares e prever a reatividade química.

As regiões de diferentes densidades eletrônicas são representadas por variações de cor, funcionando como um mapa das áreas de excesso e deficiência de elétrons. Isso permite identificar ataques eletrofílicos, reações nucleofílicas e interações por ligação de hidrogênio (CORREIA et al., 2022; SILVA et al., 2021; BARROS, 2010).

Na Figura 6 é possível visualizar, como exemplo, o mapa de potencial eletrostático calculado para a molécula da etanolamina com o funcional B3LYP e o conjunto de base 6-311++G(d,p), empregando o pacote de química quântica ORCA 5.0.4 (NESSE, 2023) e o *software* de análise da função de onda eletrônica Multiwfn versão 3.8 (LU e CHEN, 2012; LU, 2024).

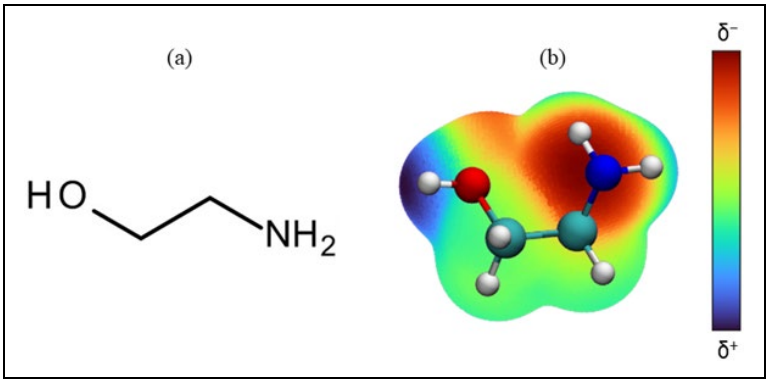


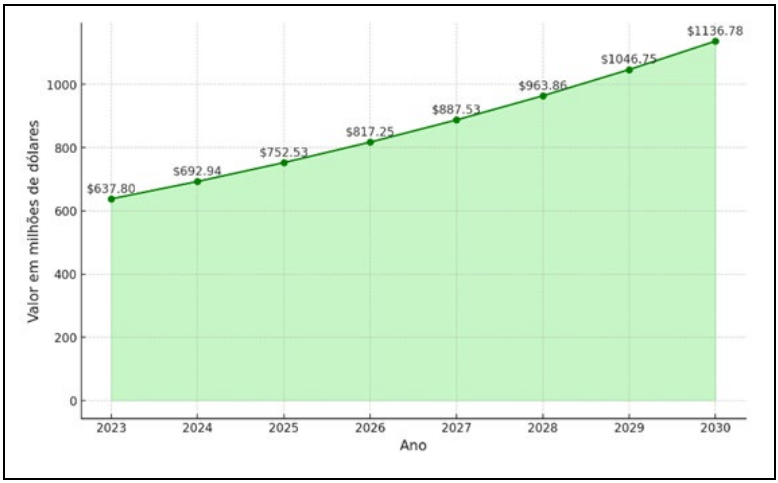
Figura 6. (a) Fórmula estrutural da etanolamina; (b) Etanolamina, otimizada com o método B3LYP 6-311++G(d,p), e seu mapa de superfície de potencial eletroestático. Regiões azuis refletem densidade de carga parcial positiva, regiões vermelhas densidade de carga parcial negativa e regiões verde densidade de carga parcial neutra.

5 | INTEGRAÇÃO DA MODELAGEM MOLECULAR COM A ECONOMIA CURCULAR

A química computacional desempenha um papel fundamental na promoção da Economia Circular, permitindo a determinação de propriedades como, energia livre e cálculos de solvatação, essenciais para avaliar interações moleculares (OLIVEIRA, 2024; MIRANDA, 2024). Esses avanços eliminam ou reduzem etapas experimentais de bancada, minimizando a geração de resíduos e proporcionando economia de tempo, energia e custos. Além disso, a integração da Modelagem Molecular com os princípios da Economia Circular aumenta a eficiência no desenvolvimento de novos materiais, reduzindo o consumo de recursos e evitando a síntese e teste físico de inúmeros compostos. O uso de simulações acelera a avaliação de processos químicos complexos, facilita a previsão de propriedades e auxilia na identificação de alternativas mais sustentáveis, destacando a importância da inovação para a sustentabilidade (ALVES et al., 2024; ARMAND et al., 2020; GLEISER, 2023).

O relatório "Molecular Modelling Market Size 2024-2030" publicado pelo Market Reports World (2023) em dezembro de 2023 prevê uma taxa de crescimento anual de 8,6% no mercado global de Modelagem Molecular, com estimativa de alcançar 1.136,78 milhões de dólares até 2030. Este crescimento reflete a crescente adoção da Modelagem Molecular como ferramenta essencial na promoção da Economia Circular e no desenvolvimento de novos materiais sustentáveis, vinculada à Agenda 2030. A projeção apresentada no Gráfico 1 ilustra a evolução desse mercado e suas implicações no contexto industrial, reforçando a importância da Modelagem Molecular na otimização

de processos e na minimização de resíduos. Esse aumento projetado demonstra como a Modelagem Molecular está se consolidando como uma tecnologia indispensável para indústrias que buscam não apenas inovar, mas também operar de maneira mais eficiente e sustentável, contribuindo para a redução dos custos operacionais e para a mitigação do impacto ambiental.



Fonte: MARKET REPORTS WORLDS, (2023), adaptado.

Gráfico 1. Projeção do crescimento anual do mercado global de Modelagem Molecular.

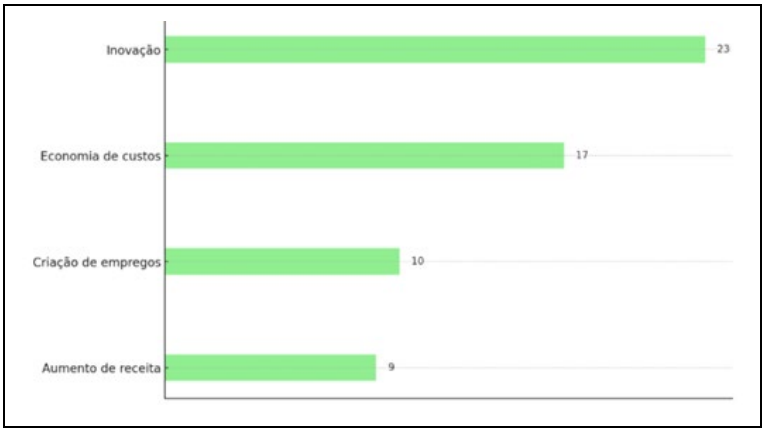
A Modelagem Molecular tem se consolidado como uma ferramenta convencional amplamente aceita por sua utilidade, praticidade e acessibilidade. O avanço tecnológico, especialmente no que tange às capacidades de *hardware* e *software,* ampliou significativamente sua aplicabilidade. Isso permite uma convergência mais eficaz entre a tecnologia real e as escalas

simuladas pela Modelagem Molecular, resultando em um conhecimento técnico mais profundo e foco específico da indústria em áreas onde essas simulações apresentam melhores resultados. Esse cenário viabiliza uma redução considerável nos custos de pesquisa e desenvolvimento, além de diminuir o tempo necessário para a produção de novos produtos, o que, por sua vez, impulsiona a competitividade entre as indústrias (GOLBECK, 2012).

No contexto do impacto econômico, a definição tradicionalmente focada em medidas de crescimento econômico e mudanças na produção, renda e riqueza das empresas se expandiu para incluir também os impactos sociais, ambientais e fatores de qualidade de vida. Conforme relatado pelo *Research Council Economic Impact Group*, após o estudo promovido pela União Europeia, o impacto econômico passou a ser discutido em termos de melhorias agregadas no bem-estar da população e no crescimento econômico sustentável. O relatório destaca que "uma ação ou atividade tem impacto econômico quando afeta o bem-estar dos consumidores, os lucros das empresas e/ou a receita do governo" (WARRY, 2006).

Em resposta a essa ampliação conceitual, o *European Materials Modelling Council* (EMMC), em parceria com a *Goldbeck Consulting* e a Comissão Europeia, conduziu uma avaliação detalhada de histórias de sucesso envolvendo a modelagem de materiais nas indústrias. O relatório de Goldbeck e Court (2016) destaca os benefícios econômicos da Modelagem Molecular, revelando seu impacto substancial em diferentes etapas do desenvolvimento industrial. Nesse contexto, o Gráfico 2 ilustra esses impactos positivos, evidenciando como a Modelagem Molecular contribui não apenas para a inovação tecnológica, mas também para a economia de custos, a criação de empregos e o aumento de receita

nas empresas que adotam essa tecnologia. Neste estudo, 29 empresas foram entrevistadas para descrever tais impactos econômicos. A aplicação crescente dessa ferramenta reforça sua relevância como instrumento estratégico para impulsionar a sustentabilidade e a competitividade no cenário industrial global.



Fonte: GOLDBECK e COURT, (2016), adaptado.

Gráfico 2. Impactos positivos do uso da Modelagem Molecular nas empresas entrevistadas.

6 | INTERSEÇÃO ENTRE A ECONOMIA CIRCULAR, MODELAGEM MOLECULAR E OS OBJETIVOS DE DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL

A Modelagem Molecular (MM), em conjunto com a Economia Circular (EC), desempenha um papel crucial na promoção da sustentabilidade, alinhando-se diretamente aos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) da ONU, ilustrado na Figura 7. A EC busca minimizar o desperdício e maximizar o uso eficiente dos recursos, enquanto a MM fornece as ferramentas tecnológicas para impulsionar esses objetivos por meio de inovações científicas. Essa convergência de tecnologia e sustentabilidade permite enfrentar desafios globais em várias frentes, contribuindo significativamente para o alcance dos ODS.



Fonte: ORGANIZAÇÃO DAS NAÇÕES UNIDAS, (2024).

Figura 7. Objetivos de desenvolvimento sustentável da ONU.

No âmbito do ODS 3: Saúde e Bem-Estar, a MM é uma ferramenta essencial no desenvolvimento de novos medicamentos e tratamentos. Por meio da simulação de interações entre fármacos e alvos biológicos, a MM acelera a descoberta de tratamentos mais eficazes, abordando doenças negligenciadas e emergentes. Singh et al. (2022) investigaram o complexo da proteína principal do SARS-CoV-2 com complexos inibidores dessa proteína, avaliando parâmetros como ligações de hidrogênio, e a energia livre de ligação utilizando dinâmica molecular no *software* GROMACS. Essa aplicação não apenas reduz custos e tempo de desenvolvimento, mas também garante que a saúde e o bem-estar global sejam promovidos de forma sustentável, atendendo às demandas críticas de saúde da população mundial.

Já no contexto do ODS 6: Água Potável e Saneamento, a dessanilização e poluição dos recursos hídricos é um desafio global que pode ser mitigado com a aplicação da MM. É possível investigar o processo de dessalinização da água utilizando grafeno nanoporoso. Para prever o comportamento deste material, os autores Cohen-Taguni e Grossman (2012) analisaram como os poros de grafeno permitem a passagem seletiva de moléculas de água, enquanto bloqueiam íons de sais. O estudo verificou que o processo depende de fatores como tamanho dos poros e interações eletrostáticas. Essa tecnologia permite avaliar a eficiência de remoção de sal e propor parâmetros otimizados para melhorar a performance nesses sistemas. Isso torna possível a manutenção da qualidade da água, um recurso vital, enquanto se promove o saneamento sustentável.

O setor energético, vital para o ODS 7: Energia Limpa e Acessível, também se beneficia amplamente da MM. A tecnologia auxilia no desenvolvimento de materiais inovadores para armazenamento e conversão de energia, como baterias, supercapacitores e células solares. O estudo de Armand et al. (2020) aborda o desenvolvimento dos chamados ânions de Huckel, moléculas aromáticas com excesso de elétrons π. Essas espécies podem ser utilizadas como componentes de eletrólitos para baterias, pois sua estrutura molecular especial permite projetá-las para otimizar a condutividade iônica e melhorar a estabilidade eletroquímica. Além disso, sua composição possibilita o uso de materiais mais abundantes e menos tóxicos em comparação aos eletrólitos convencionais, promovendo maior sustentabilidade. Os autores empregaram a Modelagem Molecular para projetar e otimizar a síntese do sal, seguida de caracterização estrutural e avaliação dos novos eletrólitos em diferentes sistemas de meia-células e células inteiras. Além disso, a MM otimiza etapas prévias de obtenção e processamento de matérias-primas, reduzindo o impacto ambiental e os custos energéticos, promovendo uma energia mais acessível e limpa.

A EC, fortemente conectada ao ODS 12: Consumo e Produção Responsáveis, visa a otimização dos processos industriais, tornando-os mais eficientes e menos poluentes. A MM contribui diretamente para esse objetivo, permitindo simulações de processos químicos e industriais que minimizam a necessidade de experimentação física.

Como exemplo da aplicação da modelagem molecular na investigação e predição de propriedades físico-químicas de interesse industrial, Case et al. (2011) abordaram os desafios e avanços relacionados à simulação computacional de sistemas moleculares, incluindo a determinação de propriedades como

densidade de líquidos, viscosidade, equilíbrio líquido-vapor e coeficientes de partição. Essas abordagens demonstram o potencial da química computacional e da modelagem molecular para estabelecer relações quantitativas entre a estrutura molecular, as interações intermoleculares e as propriedades macroscópicas dos materiais e sistemas estudados. Nesse contexto, a modelagem molecular pode desempenhar um papel estratégico na concepção e otimização de materiais e processos, permitindo a avaliação preliminar de diferentes estruturas e formulações antes de sua síntese ou implementação experimental. A integração dessas ferramentas com princípios da economia circular amplia essa perspectiva ao possibilitar uma abordagem de **Circular-by-Design**, na qual aspectos relacionados ao desempenho, à eficiência no uso de recursos, à redução de resíduos, à reutilização, à recuperação e à reciclabilidade podem ser considerados ainda nas etapas iniciais do desenvolvimento. Para que essas aplicações apresentem confiabilidade científica, contudo, é fundamental estabelecer procedimentos sistemáticos de parametrização, avaliação da qualidade dos modelos e validação mediante comparação com dados experimentais. Assim, a modelagem molecular e os métodos de química computacional podem contribuir para uma abordagem preditiva e orientada ao ciclo de vida, reduzindo a dependência exclusiva de processos experimentais de tentativa e erro e apoiando o desenvolvimento de materiais e processos mais eficientes e compatíveis com os princípios da economia circular.

Esses métodos foram desenvolvidos em busca de formalizar práticas para a avaliação e validação de resultados com dados experimentais. Apesar do aumento do poder computacional, as simulações ainda requerem grandes recursos e ajustes precisos, como no uso de campos de força, que podem impactar

significativamente. No entanto, a Modelagem Molecular demonstrou ser uma tecnologia promissora, ao permitir previsões de sistemas complexos, reduzindo custos, emissões e a geração de resíduos, enquanto torna possível a produção de bens de maneira mais sustentável e responsável. Em adição, o estudo de Yaghini et. al. (2022) retrata o uso da Modelagem Molecular para estudar as propriedades estruturais do polietileno de baixa densidade (*low density polyethylene* – LDPE) reciclado, mostrando como a aplicação de técnicas de simulação pode otimizar a distribuição de ramificações na cadeia carbônica e o peso molecular, melhorando as propriedades mecânicas do material. Essa abordagem interdisciplinar, envolvendo conceitos da Ciência de Materiais e da Química Computacional, reforça a importância de soluções sustentáveis que integram princípios de circularidade, favorecendo a reutilização de polímeros e com foco no desempenho aprimorado.

No conceitos dos ODS 9: Indústria, Inovação e Infraestrutura, no trabalho de Derecskei e Derecskei-Kovacs (2008), a Modelagem Molecular foi utilizada para prever propriedades de líquidos iônicos, como densidade e parâmetros de solubilidade, que são difíceis de obter experimentalmente. Os autores investigaram líquidos iônicos compostos por cátions orgânicos volumosos, combinando dinâmica molecular e cálculos quânticos à nível DFT. O estudo revela que o tamanho da cadeia do cátion impacta o componente eletrostático, enquanto o tipo de ânion afeta os componentes eletrostático e dispersivo. Tal publicação destaca o potencial da Modelagem Molecular para selecionar solventes verdes e personalizados, contribuindo para o desenvolvimento de materiais e processos mais sustentáveis, exemplificando como a Química é pilar fundamental dentro da categoria MM.

No contexto dos ODS 13: Ação contra a mudança global do clima, o estudo de Yang et. al. (2022) retrata estratégias para o combate das mudanças climáticas e problemas ambientais utilizando a Economia Circular, demostrando que essa abordagem pode ser utilizada como estratégica eficaz de gerenciamento de resíduos baseada em três aspectos: eliminação de resíduos, recirculação de materiais e regeneração de ecossistemas. As estratégias de Economia Circular, oferecem oportunidades ao longo do ciclo de vida dos produtos para gerenciar resíduos e emissões, aumentando a eficiência do sistema e promovendo indústrias mais verdes e seguras, pois garantem o uso adequado dos recursos, reduzem as emissões de carbono, descarte de resíduos, uso de energia, construção civil e transporte, contribuindo para a mitigação das mudanças climáticas globais. A ênfase no ciclo de vida completo dos produtos, especialmente na fase de fim de vida, é fundamental para garantir a reutilização, recuperação e reciclagem, pilares principais para alcançar uma Economia Circular.

A aplicação conjunta da MM e da EC representa uma estratégia robusta e sinérgica para promover a inovação e a sustentabilidade em escala global. Essa integração impulsiona a realização dos ODS de maneira multifacetada: a MM fornece as ferramentas computacionais e científicas necessárias para otimizar processos, desenvolver novos materiais e reduzir o impacto ambiental, enquanto a EC estabelece a garantia operacional para efetuar que esses avanços tecnológicos sejam implementados de forma sustentável e circular. A sinergia entre essas abordagens se manifesta em diversos setores, desde o desenvolvimento de fármacos mais eficientes e acessíveis até a criação de tecnologias limpas para tratamento de água e geração de energia. Os casos apresentados demonstram como essa integração podem acelerar

significativamente o progresso em direção aos ODS para a Agenda 2030, oferecendo soluções inovadoras para desafios complexos. Além disso, a combinação dessas abordagens promove uma transformação fundamental na maneira como recursos são utilizados e produtos são desenvolvidos, estabelecendo um novo paradigma de desenvolvimento sustentável. Esta convergência entre ciência avançada e princípios de sustentabilidade não apenas molda um futuro mais resiliente, mas também estabelece um modelo replicável de inovação responsável, onde o progresso tecnológico e a preservação ambiental se reforçam mutuamente. Assim, a MM e a EC emergem como pilares fundamentais na construção de um futuro onde o desenvolvimento científico e tecnológico serve como catalisador para a realização dos objetivos globais de sustentabilidade, demonstrando que é possível conciliar avanço científico, prosperidade econômica e responsabilidade ambiental.

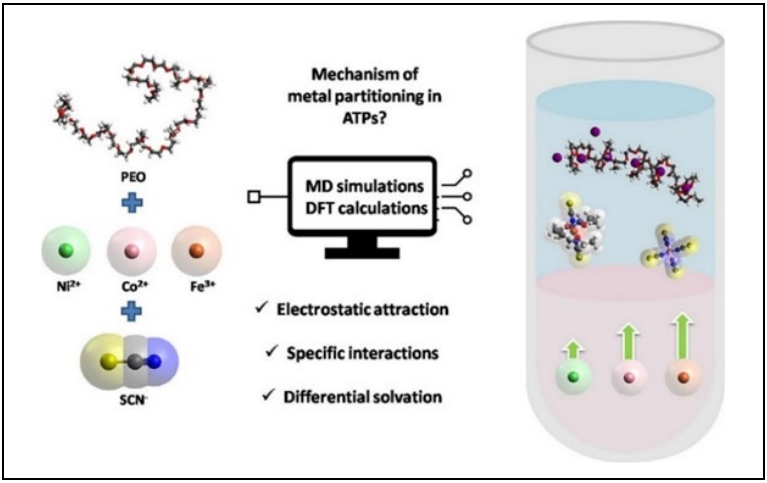
7 | ECONOMIA CIRCULAR E MODELAGEM MOLECULAR NO SETOR MINERAL

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 resíduos eletrônicos, subprodutos industriais e baterias (FUNARI et al., 2024; XAVIER et al., 2023). Como exemplo 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 (ALVES et al. 2024).

A Modelagem Molecular é uma ferramenta valiosa para compreender os mecanismos de extração e simular sistemas, visando propor métodos mais eficientes e sustentáveis. Por meio de diferentes programas, permite a análise das interações entre compostos minerais e reagentes químicos específicos, auxiliando na avaliação da viabilidade prática do produto final na indústria (IBRAM, 2014). Neste contexto, o Laboratório de Modelagem Molecular (LABMOL) do Centro de Tecnologia Mineral (CETEM/MCTI), inaugurado em dezembro de 2024, destaca-se com publicações de grande relevância empregando análise computacional voltada para o setor mineral.

Um dos trabalhos recentes do LABMOL, de Silva et al. (2023), representa um marco importante no uso de simulações computacionais para compreender os mecanismos de extração de metais em sistemas aquosos bifásicos (ATPS) formados por polímeros e sais, destacando seu potencial como alternativa

sustentável aos métodos tradicionais de extração em solventes orgânicos. Utilizando uma abordagem combinada de simulações de dinâmica molecular e cálculos de química quântica (DFT), os autores investigaram a extração de Co^{2+}, Ni^{2+} e Fe^{3+}, analisando os mecanismos fundamentais que governam o particionamento desses metais entre as fases, conforme ilustrado na Figura 8.



Fonte: SILVA, et. al., (2023).

Figura 8. Esquema de cálculos computacionais no sistema aquoso bifásico (ATPs)

Para modelar as interações moleculares foi utilizado o campo de força OPLS-AA com o software GROMACS, avaliando diferentes conformações do PEO, como linear, semicircular e enovelada. A conformação semicircular foi identificada como a mais estável devido à estabilização por ligações de hidrogênio com moléculas de água. Paralelamente, cálculos DFT, utilizando o método B97-3c, analisaram propriedades estruturais, eletrônicas e

energéticas dos complexos formados entre o PEO e os cátions metálicos, explorando cenários que incluíam ligantes aquosos e de tiocianato.

Os resultados computacionais confirmaram a presença de três mecanismos principais previamente propostos na literatura: (i) interações específicas, como transferência de carga e coordenação entre os cátions metálicos e grupos éter do PEO; (ii) interações eletrostáticas entre pseudo-polímeros catiônicos (PPCs) e metalatos; e (iii) solvatação diferencial em fases menos polares, promovendo a transferência seletiva de metais. A formação espontânea de PPCs foi observada, com estruturas helicoidais do PEO envolvendo os cátions, que interagiram fortemente com ânions de tiocianato. A análise eletrônica destacou a afinidade de ligação dos metais com o PEO, sendo mais pronunciada para Fe^{3+} devido à sua alta carga, seguida por Co^{2+} e Ni^{2+}. Além disso, complexos metal-tiocianato ([M(SCN)n]) apresentaram geometrias distintas, com Fe^{3+} demonstrando maior preferência devido à transferência de carga significativa.

A solvatação em fases menos polares, ricas em PEO, foi identificada como um fator essencial para facilitar a partição dos metais, especialmente para complexos neutros ou levemente carregados. A conformação flexível do PEO em solução aquosa facilita a interação com complexos metálicos, estabilizando-os por ligações de hidrogênio. Essas interações específicas e eletrostáticas, associadas à polaridade do meio, foram determinantes para a seletividade do processo de extração.

A pesquisa destaca a importância dos ATPS como sistemas versáteis e ambientalmente amigáveis, capazes de proporcionar seletividade e eficiência na extração de metais críticos como cobalto e níquel, essenciais para aplicações em baterias e

tecnologias de energia limpa. Além disso, o uso de ferramentas computacionais se mostrou indispensável para otimizar esses sistemas, que atendam às necessidades específicas da indústria.

Como perspectiva futura deste trabalho de conclusão de curso, planeja-se fazer o uso da modelagem molecular para investigar ATPS com diferentes composições, incluindo o surfactante comercial Triton X-100, visando à extração de elementos de terras-raras (La, Pr, Nd). O objetivo é ampliar o entendimento e aprimorar a seletividade na extração desses elementos em lixiviados gerados durante o processamento de materiais secundários, como baterias, utilizando um sistema mais sustentável. Dessa forma, o estudo busca contribuir para a reciclagem e reutilização, pilares fundamentais da economia circular.

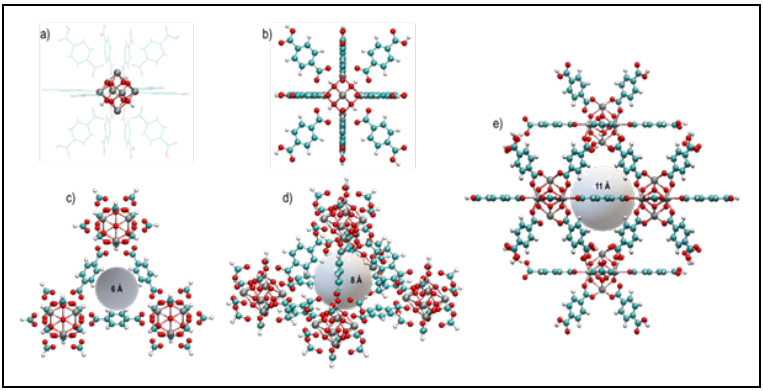
Em outro estudo do LABMOL, destacou-se o trabalho de Prates e Guedes (2024) que representa uma contribuição significativa para a interface entre modelagem molecular (MM) e economia circular (EC) no contexto da extração sustentável de lítio. Esta pesquisa utiliza técnicas computacionais avançadas para investigar a seletividade da MOF UiO-66 na separação de cátions, com foco particular no lítio, um elemento crítico para a transição energética global. A relevância desta investigação se evidencia pelo aumento exponencial na demanda mundial por lítio, que cresceu de 30.000 para 180.000 toneladas entre 2013-2023 (USGS, 2023), e pela previsão de escassez do metal no final do século XXI, tornando urgente o desenvolvimento de métodos mais sustentáveis de extração e reciclagem.

A investigação empregou métodos computacionais avançados baseados em cálculos de mecânica quântica utilizando o método GFN2-xTB para otimização de geometria e cálculos DFT com o

funcional compósito B97-3c para determinação das energias de interação. O estudo utilizou softwares especializados como xTB, ORCA 6, Multiwfn (LU; CHEN, 2012) e dinâmica molecular de curta duração (1 ns) para análise temporal dos sistemas. Para compreender os mecanismos de separação, é fundamental primeiro examinar a arquitetura estrutural da MOF UiO-66, conforme ilustrado na Figura 9.

A MOF UiO-66, estrutura cristalina desenvolvida por Cavka et al. (2008), é construída a partir de unidades de coordenação metálica $Zr_6O_4(OH)_4$ (Figura 9a), que funcionam como nódulos de conexão estáveis. Estes clusters metálicos se interconectam através de 12 ligantes orgânicos de ácido 1,4-benzodicarboxílico para formar a arquitetura molecular tridimensional completa (Figura 9b), resultando em uma rede porosa altamente organizada com estabilidade excepcional em meio aquoso, característica fundamental para aplicações em separação de íons.

A estrutura porosa da UiO-66 apresenta uma hierarquia de cavidades e canais com dimensões específicas que governam o processo de permeação dos cátions. A abertura triangular (Figura 9c) constitui o gargalo limitante para a passagem dos íons, apresentando diâmetro experimental de aproximadamente 6,0 Å. Esta abertura estratégica conecta as cavidades tetraédricas menores (~8 Å, Figura 9d) às cavidades octaédricas maiores (~11 Å, Figura 9e), criando um sistema de canais interconectados que determina fundamentalmente a seletividade do material.



Fonte: PRATES; GUEDES, (2024).

Figura 9. Representação estrutural da MOF UiO-66: (a) Unidade de coordenação metálica $Zr_6O_4(OH)_4$ e (b) arquitetura molecular completa; Dimensões dos canais porosos da MOF UiO-66: (c) Abertura triangular, (d) cavidade tetraédrica e (e) cavidade octaédrica. Código de cores para identificação atômica: Zr – cinza, O – vermelho, C – azul claro, H – branco

Os resultados da modelagem molecular revelaram que o mecanismo de permeação dos cátions (Li^+, Na^+, K^+, Mg^{2+}, Ca^{2+}) através desta arquitetura porosa hierárquica envolve uma reorganização significativa da camada de solvatação. Durante a passagem crítica pela abertura triangular limitante (Figura 9c), foi observada uma dessolvação parcial dos cátions, onde o número de moléculas de água dentro de seus respectivos diâmetros de hidratação experimentais diminui drasticamente: de 12 para 4 (Li^+), 7 para 2 (Na^+), 7 para 3 (K^+), 20 para 11 (Mg^{2+}) e 19 para 11 (Ca^{2+}). Esta redução controlada na camada de solvatação é o fenômeno-chave que permite aos cátions hidratados, que normalmente possuem diâmetros superiores a 6,0 Å, atravessarem com sucesso a abertura triangular e acessarem as cavidades

internas de maior volume (Figuras 9d e 9e), onde podem recuperar parcialmente sua esfera de coordenação aquosa.

As energias de interação calculadas através da metodologia ONIOM DFT/GFN2-xTB revelaram aspectos determinantes sobre a seletividade do material. A interação dos cátions com os nódulos metálicos $Zr_6O_4(OH)_4$ (Figura 9a) e com os sítios de coordenação disponíveis nas paredes dos poros mostrou-se consistentemente mais forte que com a água [$E_{int(M\text{-}MOF)}$ > Eint(M-w)] para todos os cátions investigados, com incrementos mais pronunciados para K^+, Mg^{2+} e Ca^{2+}. O mapeamento de potencial eletrostático da estrutura revelou que as regiões mais negativas se concentram nos átomos de oxigênio dos grupos hidróxido (-OH) e nos oxigênios carboxílicos, enquanto as regiões mais positivas localizam-se nos átomos de zircônio. Esta distribuição eletrônica específica, combinada com os fatores geométricos relacionados às dimensões das aberturas triangulares (Figura 9c), estabelece o mecanismo de seletividade observado entre cátions mono- e divalentes.

Os resultados demonstraram que a seletividade preferencial para cátions monovalentes é determinada pela convergência de três fatores fundamentais: geométricos (compatibilidade dimensional com a abertura triangular), energéticos (força de interação otimizada com os centros metálicos) e eletrônicos (densidade de carga apropriada nos sítios de coordenação). Contudo, entre os próprios cátions monovalentes (Li^+, Na^+, K^+), a seletividade permanece relativamente baixa devido à similaridade de seus diâmetros de hidratação, corroborando observações experimentais anteriores (ZHANG et al., 2018; LIU et al., 2015). Esta limitação indica que, embora a UiO-66 apresente características promissoras para separação monovalente e divalente, a extração seletiva

específica de lítio requer modificações estruturais adicionais, como funcionalização dos ligantes orgânicos ou engenharia dos poros, direcionando futuras estratégias de design para aplicações em economia circular e recuperação sustentável de recursos críticos.

No contexto da economia circular e inovação tecnológica, este trabalho destaca-se por vários aspectos. Primeiramente, o uso de técnicas computacionais avançadas permite uma redução significativa no tempo e custos de desenvolvimento de novos materiais, alinhando-se com princípios de eficiência e sustentabilidade. A compreensão detalhada dos mecanismos de interação em nível molecular possibilita o design racional de modificações na estrutura da MOF para melhorar sua seletividade, representando um avanço significativo na área de materiais funcionais para separação iônica.

O investimento em inovação neste campo é particularmente relevante considerando o papel estratégico do lítio na transição energética global. O desenvolvimento de tecnologias mais eficientes e sustentáveis para sua extração e recuperação não apenas atende a demandas ambientais, mas também possui importante valor econômico e estratégico. A abordagem computacional apresentada fornece uma base sólida para o desenvolvimento de processos mais sustentáveis, que podem reduzir significativamente o consumo de reagentes e água, além de minimizar impactos ambientais.

Nesse caso, a integração entre MM e EC no setor mineral representa um avanço significativo na busca por processos mais sustentáveis e eficientes de recuperação de metais críticos. A aplicação de técnicas computacionais avançadas, como demonstrado nos estudos do LABMOL, não apenas otimiza os processos existentes, mas também permite o desenvolvimento de

novas metodologias mais alinhadas com os princípios da EC. A modelagem de sistemas ATPS, por exemplo, ilustra como a compreensão molecular detalhada pode levar a melhorias significativas em processos de extração, reduzindo o uso de solventes orgânicos e aumentando a seletividade na recuperação de metais. Esta abordagem é particularmente relevante no contexto atual, onde a demanda por metais críticos para tecnologias verdes, como baterias de íon-lítio, ímãs permanentes e células solares, continua crescendo exponencialmente. A capacidade de simular e otimizar processos de extração em escala molecular não apenas reduz o tempo e custos de desenvolvimento, mas também minimiza o impacto ambiental associado à experimentação tradicional. Além disso, a combinação de diferentes técnicas computacionais (dinâmica molecular e DFT) oferece uma visão mais completa dos mecanismos de extração, permitindo o design racional de sistemas mais eficientes. Esta sinergia entre MM e EC está transformando o setor mineral, promovendo uma transição de práticas lineares tradicionais para um modelo circular mais sustentável, onde a recuperação e reutilização de materiais são otimizadas através de ferramentas computacionais avançadas.

8 | CONCLUSÃO

O presente estudo realizado através de uma revisão bibliográfica sistemática demonstrou que a integração entre Economia Circular (EC) e Modelagem Molecular (MM) constitui uma abordagem inovadora e promissora para enfrentar os desafios ambientais contemporâneos. Esta sinergia tem contribuído significativamente para o alcance dos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS), proporcionando otimização de processos industriais, redução significativa de resíduos, desenvolvimento de materiais mais sustentáveis e diminuição de custos operacionais e ambientais.

No contexto específico do setor mineral, a Modelagem Molecular tem se consolidado como ferramenta fundamental para a compreensão e otimização de processos de extração e separação de metais críticos. Os sistemas aquosos bifásicos (ATPS) emergiram como alternativas sustentáveis aos métodos tradicionais, permitindo simulações computacionais precisas que preveem comportamentos e interações moleculares. Complementarmente, o estudo de Prates e Guedes (2024) sobre a MOF UiO-66 demonstrou o potencial das estruturas metal-orgânicas na separação seletiva de cátions, particularmente para a recuperação de lítio a partir de fontes secundárias. A compreensão detalhada dos mecanismos de permeação iônica através da arquitetura porosa hierárquica das MOFs, obtida por meio de técnicas computacionais avançadas (DFT e dinâmica molecular), exemplifica como a MM pode direcionar o design racional de materiais funcionais para aplicações em economia circular. Essas abordagens reduzem significativamente a necessidade de experimentos físicos e, consequentemente, o impacto ambiental associado ao desenvolvimento de novos processos de recuperação mineral.

A análise realizada evidenciou contribuições diretas para múltiplos ODS, incluindo Saúde e Bem-Estar (ODS 3), Água Potável e Saneamento (ODS 6), Energia Limpa e Acessível (ODS 7), Indústria, Inovação e Infraestrutura (ODS 9), Consumo e Produção Responsáveis (ODS 12) e Ação Contra a Mudança Global do Clima (ODS 13). Essa abrangência demonstra o potencial transformador da integração entre EC e MM no desenvolvimento sustentável global, especialmente considerando o papel estratégico de metais críticos como lítio, cobalto e níquel na transição energética.

O crescimento projetado do mercado global de Modelagem Molecular, com taxa anual de 8,6% até 2030, reforça a importância estratégica dessa ferramenta para o desenvolvimento industrial sustentável. As perspectivas futuras apontam para a expansão do uso de ATPS na extração de metais terras-raras, o aprimoramento de MOFs funcionalizadas para aumentar a seletividade na separação de íons específicos, o desenvolvimento de sistemas mais sustentáveis para processamento de materiais secundários como baterias e lixo eletrônico, e o refinamento contínuo das técnicas de modelagem molecular para otimização de processos de recuperação mineral. A convergência entre diferentes abordagens computacionais (dinâmica molecular, DFT, métodos semi-empíricos) representa um caminho promissor para acelerar a inovação no setor mineral, alinhando eficiência econômica com responsabilidade ambiental.

Por fim, conclui-se que a convergência entre Economia Circular e Modelagem Molecular representa um caminho promissor para a construção de um futuro mais sustentável, onde inovação

tecnológica e responsabilidade ambiental se complementam. Esta integração não apenas otimiza processos industriais e reduz impactos ambientais, mas também contribui significativamente para o alcance das metas estabelecidas nos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável, demonstrando ser uma estratégia fundamental para enfrentar os desafios ambientais do século XXI.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABRAHAM, M. et al. GROMACS 2024 Manual. Versão 2024.4. BioExcel-3 – BioExcel Centre of Excellence for Computational Biomolecular Research, 2024. Disponível em: https://zenodo.org/records/14016613. Acesso em: 16 nov. 2024.

ALVES, I. et al. Crescimento e impacto da Modelagem Molecular na Economia Circular: uma análise bibliométrica. Rio de Janeiro: CETEM/MCTI, 2024. Disponível em: http://mineralis.cetem.gov.br/handle/cetem/2840. Acesso em: 16 out. 2024.

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

ATKINS, P.; PAULA, J. de. Físico-Química - Volume 1. 10. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2017. E-book.

BANNWARTH, C. et al. Extended tight-binding quantum chemistry methods. Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, v. 11, e01493, 2020. DOI: https://doi.org/10.1002/wcms.1493.

BARCA, G.M.J. et al. Recent developments in the general atomic and molecular electronic structure system. The Journal of Chemical Physics, v. 152, n. 15, p. 154102, 2020. DOI: https://doi.org/10.1063/5.0005188.

BARROS, L.A. Estudos de Modelagem Molecular Visando a Síntese de um Polímero de Impressão Molecular para a Determinação de Fenitrotiona em Tomate. 2010. Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2010.

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

BECKE, A.D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. The Journal of Chemical Physics, v. 98, n. 7, p. 5648-5652, 1993.

BENATTI, G. Economia circular: desafios e oportunidades para a indústria brasileira. Como a economia circular pode ganhar escala protegendo o meio ambiente e realizando todo o seu potencial socioeconômico. Agência Gov, 31 ago. 2024. Disponível em: https://www.agenciagov.com.br. Acesso em: 25 nov. 2024.

BRASIL. Brasil e ONU apresentam Balanço Ético Global, um chamado mundial à ação climática rumo à COP30. Ministério do Meio Ambiente e Mudança do Clima, 2024. Disponível em: https://www.gov.br/mma/pt-br/noticias/brasil-e-onu-apresentam-balanco-etico-global-chamado-mundial-a-acao-climatica-rumo-a-cop30. Acesso em: 22 ago. 2025.

CAVALCANTE, L.T.C.; OLIVEIRA, A.A.S. de. Métodos de revisão bibliográfica nos estudos científicos. Psicologia em Revista, Belo Horizonte, v. 26, n. 1, p. 83-102, abr. 2020. Disponível em: https://doi.org/10.5752/P.1678-9563.2020v26n1p82-100. Acesso em: 22 nov. 2024.

CECCI, R.R.R. et al. Banana pseudostem fibers characterization and comparison with reported data on jute and sisal fibers. SN Applied Sciences, v. 2, n. 1, p. 20, 2019. Disponível em: https://doi.org/10.1007/s42452-019-1790-8. Acesso em: 1 out. 2024.

CENTRE INTERNATIONAL DE RÉFÉRENCE SUR LE CYCLE DE VIE DES PRODUITS, PROCÉDÉS ET SERVICES (CIRAIG). Circular economy: A critical literature review of concepts. Montreal: CIRAIG, 2015. Disponível em: https://www.ciraig.org/. Acesso em: 2 out. 2024.

COHEN-TANUGI, D.; GROSSMAN, J.C. Water desalination across nanoporous graphene. Nano Letters, v. 12, n. 7, p. 3602-3608, 2012. Disponível em: https://pubs.acs.org/doi/10.1021/nl3012853. Acesso em: 24 nov. 2024.

CORRÊA, R. do S. da S. et al. Sustentabilidade global: a contribuição da pegada ecológica para a nova consciência ambiental das nações. Revista Contemporânea, v. 4, n. 6, e4671, 2024. DOI: https://doi.org/10.56083/RCV4N6-079. Acesso em: 4 nov. 2024.

CORREIA, J.C.G. et al. Modelagem Molecular e termodinâmica da interação entre biocidas e o mineral talco. In: ENCONTRO NACIONAL DE TRATAMENTO DE MINÉRIOS E METALURGIA EXTRATIVA, 29., 2022, Armação dos Búzios. Anais [...]. Armação dos Búzios: [s. n.], 2022. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/364122756. Acesso em: 19 nov. 2024.

DERECSKEI, B.; DERECSKEI-KOVACS, A. Molecular modelling simulations to predict density and solubility parameters of ionic liquids. Molecular Simulation, v. 34, n. 10-15, p. 1167-1175, 2008. DOI: https://doi.org/10.1080/08927020802412362.

DEWAR, M.J.S.; THIEL, W. Ground States of Molecules, 38. The MNDO Method. Approximations and Parameters. Journal of the American Chemical Society, v. 99, p. 4899-4907, 1977.

DEWAR, M.J.S. et al. AM1: A New General Purpose Quantum Mechanical Model. Journal of the American Chemical Society, v. 107, p. 3902-3909, 1985.

ELLEN MACARTHUR FOUNDATION. Towards the circular economy: Economic and business rationale for an accelerated transition. 2016. Disponível em: https://ellenmacarthurfoundation.org/. Acesso em: 2 out. 2024.

ELLEN MACARTHUR FOUNDATION. What is Circular Economy? 2019. Disponível em: https://ellenmacarthurfoundation.org/topics/circular-economy-introduction/overview. Acesso em: 2 out. 2024.

ELSEVIER. Scopus. 2024. Disponível em: https://www.scopus.com. Acesso em: 22 nov. 2024.

EUROPEAN PARLIAMENT. Circular economy: definition, importance and benefits. 2015. Disponível em: https://www.europarl.europa.eu/topics/en/article/20151201STO05603. Acesso em: [data não informada].

FISCHER, C.F. General Hartree-Fock program. Computer Physics Communications, v. 43, n. 3, p. 355-365, 1987.

FRISCH, M. J. et al. Gaussian 16, Revision C.01. Wallingford: Gaussian, Inc., 2016.

FROIMOWITZ, M. HyperChem: a software package for computational chemistry and molecular modeling. Biotechniques, v. 14, n. 6, p. 1010-1013, jun. 1993. Disponível em: https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/8333944/. Acesso em: 8 set. 2025.

FUNARI, V. et al. Urban mining of municipal solid waste incineration (MSWI) residues with emphasis on bioleaching technologies: a critical review. Environmental Science and Pollution Research, v. 30, p. 59128-59150, 12 abr. 2023.

GLÄNZEL, W. Bibliometrics as a research field: a course on theory and application of bibliometric indicators. Course Handouts, 2003. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/242406991_Bibliometrics_as_a_research_field_A_course_on_theory_and_application_of_bibliometric_indicators. Acesso em: [data não informada].

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: 21 out. 2024.

GLEISER, I.; HUGUES, M. Massively-scaling quantum chemistry to support a circular economy. AWS HPC Blog, 2023. Disponível em: https://aws.amazon.com/blogs/hpc/massively-scaling-quantum-chemistry-to-support-a-circular-economy/. Acesso em: 21 out. 2024.

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

GOLDBECK, G.; COURT, C. The economic impact of materials modelling. Goldbeck Consulting, 2016.

GUARNIERI, P.; SILVA, L.P. DE O.; RODRIGUES, V.D.V. ECONOMIA CIRCULAR: conceitos, dimensões e abordagens. Editora Universidade de Brasília, Brasília. 275 p., 2026. DOI: https://livros.unb.br/index.php/portal/catalog/book/691.

GUEDES, V.L.S.; BORSCHIVER, S. Bibliometria: uma ferramenta estatística para a gestão da informação e do conhecimento, em sistemas de informação, de comunicação e de avaliação científica e tecnológica. Encontro Nacional de Ciência da Informação, v. 6, n. 1, p. 18, jun. 2005. Disponível em: https://www.academia.edu. Acesso em: 24 nov. 2024.

HARA, T. et al. Unveiling the nature of chemical bonds in real space. Journal of the American Chemical Society, v. 146, n. 34, p. 23825-23830, 2024. DOI: https://doi.org/10.1021/jacs.4c05673.

HØST, S. et al. The augmented Roothaan–Hall method for optimizing Hartree–Fock and Kohn–Sham density matrices. The Journal of Chemical Physics, v. 129, n. 12, p. 124106, 28 set. 2008. DOI: https://doi.org/10.1063/1.2974099.

INSTITUTO BRASILEIRO DE MINERAÇÃO (IBRAM). Laboratório de Modelagem Molecular do CETEM diminuirá custos de produção do setor. 2014. Disponível em: https://ibram.org.br/noticia/laboratorio-de-modelagem-molecular-do-cetem-diminuira-custos-de-producao-do-setor/. Acesso em: 24 nov. 2024.

KAYA, U. A superfície de energia potencial pode ser calculada usando mecânica quântica. LIBRETEXTS. Química Física, [s.d.]. Disponível em: https://espanol.libretexts.org/Quimica/Química_Física_y_Teórica/Química_Física_%28LibreTexts%29/30%3A_Dinámica_de_reacción_en_fase_gaseosa/30.10%3A_La_superficie_de_energía_potencial_se_puede_calcular_usando_mecánica_cuántica. Acesso em: 21 nov. 2024.

KORHONEN, J. et al. Circular Economy: The Concept and its Limitations. Ecological Economics, v. 143, p. 37-46, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.ecolecon.2017.06.041. Acesso em: 1 out. 2024.

LEE, C.; YANG, W.; PARR, R.G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. Physical Review B, v. 37, n. 2, p. 785-789, 1988.

LU, T. A comprehensive electron wavefunction analysis toolbox for chemists, Multiwfn. The Journal of Chemical Physics, v. 161, p. 082503, 2024.

LU, T.; CHEN, F. Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer. Journal of Computational Chemistry, v. 33, p. 580-592, 2012.

MAGALHÃES, D.R.B. Cálculos quânticos, modelo SAR e modelo estatístico aplicados à investigação de relações entre fragrância almiscarada e frequências vibracionais no infravermelho. 2014. Tese (Doutorado em Química) – Universidade de Brasília, Brasília, 2014.

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.

MIRANDA, V.S. da S. et al. Predição de energia livre de hidratação de cátions metálicos por química quântica computacional. Rio de Janeiro: CETEM/MCTI, 2024. Disponível em: http://mineralis.cetem.gov.br/handle/cetem/2839. Acesso em: 19 nov. 2024.

MOCHIUTTI, E. et al. Implementação do campo de força ClayFF no GROMACS: uma aplicação em estrutura de caulinita. Química Nova, v. 43, n. 6, p. 804-812, 2020. Disponível em: https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170517. Acesso em: 17 nov. 2024.

MORGON, N.H.; COUTINHO, K. Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular. São Paulo: Livraria da Física, 2007.

MORGON, N.H.; CUSTÓDIO, R. Teoria do Funcional de Densidade. Química Nova, São Paulo, v. 18, n. 1, p. 44-55, 1995.

NAMBA, A.M.; SILVA, V.B. da; SILVA, C.H.T.P. da. Dinâmica molecular: Teoria e aplicações em planejamento de fármacos. Eclética Química, v. 33, n. 4, p. 13-24, 2008. Disponível em: https://doi.org/10.1590/S0100-46702008000400002. Acesso em: 20 nov. 2024.

NEESE, F. Software update: the ORCA program system, version 6.0. Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, v. 15, n. 2, e70019, 2025. Disponível em: https://doi.org/10.1002/wcms.70019. Acesso em: 8 set. 2025.

OLIVEIRA, A.M. Introdução à modelagem molecular para química, engenharia e biomédicas: Fundamentos e exercícios. Curitiba: Appris, 2018.

OLIVEIRA, Y.M. et al. Interaction between endocrine disruptors and polyethylene nanoplastic by molecular dynamics simulations. The Journal of Physical Chemistry B, v. 128, n. 8, p. 2045-2052, 2024. DOI: 10.1021/acs.jpcb.3c07966.

ORGANIZAÇÃO DAS NAÇÕES UNIDAS. Objetivos de Desenvolvimento Sustentável. Disponível em: https://brasil.un.org/pt-br/sdgs. Acesso em: 17 nov. 2024.

PEREIRA, A. et al. Molecular dynamics simulations of organic-aqueous interfaces under influence of organophosphorus extractants. 2023. Disponível em: https://doi.org/10.13140/RG.2.2.31254.11847. Acesso em: 17 nov. 2024.

PESSÔA, K.F. Estudo do efeito de blendas de solventes em aglomerados de asfaltenos por Modelagem Molecular. 2020. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2020.

PESSÔA, K.F. et al. Revisão de alguns principais métodos utilizados em Modelagem Molecular. Parte I - Mecânica Molecular. Rio de Janeiro: CETEM/MCTIC, 2018. (Série Tecnologia Mineral, 98). Disponível em: http://mineralis.cetem.gov.br/handle/cetem/2170. Acesso em: 10 nov. 2024.

PESSÔA, K.F. et al. Revisão de alguns principais métodos utilizados em Modelagem Molecular. Parte II – Métodos quânticos. Rio de Janeiro: CETEM/MCTIC, 2018. (Série Tecnologia Mineral, 99). Disponível em: http://mineralis.cetem.gov.br/handle/cetem/2171. Acesso em: 10 nov. 2024.

PRATES, L.M. Estudo teórico da interação metal−suporte em aglomerados de paládio depositados sobre as superfícies (110D) e (110C) da γ-alumina. 2021. Tese (Doutorado em Química) – Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2021. Disponível em: http://www.bdtd.uerj.br/handle/1/18973. Acesso em: 18 nov. 2024.

PRATES, L.M.; CORREIA, J.C. Estudo da interação de cátions com a MOF UiO-66 por modelagem molecular para aplicação em membranas seletivas para lítio. In: JORNADA DO PROGRAMA DE CAPACITAÇÃO INSTITUCIONAL, 13., 2024, Rio de Janeiro. Anais [...]. Rio de Janeiro: CETEM/MCTI, 2024.

QUIRKE, N. Molecular Simulation. Cancer Research, v. 13, n. 3, p. 250-254, 1953.

SANT'ANNA, C.M.R. Glossário de termos usados no planejamento de fármacos (recomendações da IUPAC para 1997). Química Nova, v. 25, n. 3, p. 27-33, 2002.

SANT'ANNA, C.M.R. Métodos de Modelagem Molecular para Estudo e Planejamento de Compostos Bioativos: Uma Introdução. Revista Virtual de Química, v. 1, n. 1, p. 49-57, 2009.

SILVA, L.A. et al. Computational investigation on the molecular driving forces for extraction of Co2+, Ni2+, and Fe3+ in poly(ethylene oxide)/thiocyanate salt aqueous two-phase systems. Hydrometallurgy, v. 223, p. 106220, jan. 2024.

SILVA, L.A. et al. Historical perspective and bibliometric analysis of molecular modeling applied in mineral flotation systems. Minerals Engineering, v. 170, p. 107062, 2021. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.mineng.2021.107062. Acesso em: 19 nov. 2024.

SINGH, M.B. et al. An understanding of coronavirus and exploring the molecular dynamics simulations to find promising candidates against the Mpro of nCoV to combat the COVID-19: A systematic review. Journal of Molecular Structure, v. 1267, 2022. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.133717. Acesso em: 24 nov. 2024.

STEPHENS, P.J. et al. Ab Initio calculation of vibrational absorption and circular dichroism spectra using density functional force fields. The Journal of Physical Chemistry, v. 98, n. 45, p. 11623-11627, 1994.

STEWART, J.J.P. MOPAC2016. Colorado Springs: Stewart Computational Chemistry, 2016. Disponível em: http://Open MOPAC.net. Acesso em: 20 set. 2025.

USGS. Mineral Commodity Summaries 2023. Reston, VA: U.S. Geological Survey, 2023. 210 p. Disponível em: https://doi.org/10.3133 /mcs2023. Acesso em: 15 out. 2025.

VALENTE, A. F. F. Circularidade do aço em veículos em final de vida útil. 2024. Disponível em: http://mineralis.cetem.gov.br/ handle/cetem/2871. Acesso em: 1 out. 2024.

VERLI, H. Dinâmica Molecular. In: [AUTOR PRINCIPAL]. Bioinformática: da biologia à flexibilidade molecular. [S. l.: s. n.], 2014. cap. 8, p. 173-187.

VICKERS, E. Economia Circular. Bloomberg, 27 ago. 2019. Disponível em: https://www.gbcbrasil.org.br/economia-circular/. Acesso em: 24 jul. 2024.

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

XAVIER, L.H.S.M.; OTTONI, M.S.O. Economia Circular e mineração urbana: resíduos de equipamentos eletroeletrônicos. Rio de Janeiro: CETEM/MCTIC, 2019. Disponível em: http://mineralis.cetem.gov.br/handle/cetem/2288. Acesso em: 1 out. 2024.

YAGHINI, N. et al. Computational study of the structural properties of recycled low-density polyethylene. Polymer, v. 241, p. 124525, 2022.

SÉRIES CETEM

As Séries Monográficas do CETEM são o principal material de divulgação da produção científica realizada no Centro. Até o final do ano de 2025, já foram publicados, eletronicamente e/ou impressos em papel, mais de 390 títulos, distribuídos entre as seis séries atualmente em circulação: Rochas e Minerais Industriais (SRMI), Tecnologia Mineral (STM), Tecnologia Ambiental (STA), Estudos e Documentos (SED). A Série Iniciação Científica consiste numa publicação eletrônica anual.

A lista das publicações poderá ser consultada em nossa homepage. As obras estão disponíveis em texto completo para download. Visite-nos em https://www.gov.br/cetem/pt-br/assuntos/repositorio-mineralis-e-biblioteca.

Últimos números da Série Estudos e Documentos

SED-112 – **Dinâmica de sistemas aplicada ao comportamento do consumidor de eletroeletrônicos no Brasil: modelagem e projeção de cenários (2025-2030)**. Emmanuelle Soares de Carvalho Freitas, Luciana Silva Contador e Lúcia Helena Xavier, 2026.

SED-111 – **Transição energética e dependência por minerais críticos: aspectos geopolíticos, socioambientais e a perspectiva brasileira**. Fernando Ferreira de Castro, Geraldo Sandoval Góes, Carlos Cesar Peiter, Guilherme Sandoval Góes, Fábio Giusti de Britto, Maria Pereira Lima Green e Felipe Soter de Mariz e Miranda, 2022.

SED-110 – **O setor mineral brasileiro e o impacto socioambiental causado pela exploração ilegal dos recursos minerais.** Ana Maria Botelho M. da Cunha e Márcia Viana Sá Earp, 2022.

INFORMAÇÕES GERAIS

CETEM – Centro de Tecnologia Mineral
Avenida Pedro Calmon, 900 – Cidade Universitária
21941-908 – Rio de Janeiro – RJ
E-mail: biblioteca@cetem.gov.br
Homepage: http://www.cetem.gov.br

NOVAS PUBLICAÇÕES

Se você se interessar por um número maior de exemplares ou outro título de uma das nossas publicações, entre em contato com a nossa biblioteca no endereço acima.

Solicita-se permuta.

We ask for interchange.



Missão Institucional

Desenvolver tecnologias inovadoras e sustentáveis, e mobilizar competências visando superar desafios nacionais do setor mineral.

O CETEM

O Centro de Tecnologia Mineral - CETEM é um instituto de pesquisas, vinculado ao Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovações - MCTI, dedicado ao desenvolvimento, à adaptação e à difusão de tecnologias nas áreas minerometalúrgica, de materiais e de meio ambiente.

Criado em 1978, o Centro está localizado no campus da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, na Cidade Universitária, no Rio de Janeiro e ocupa 20.000m² de área construída, que inclui 25 laboratórios, 4 plantas-piloto, biblioteca especializada e outras facilidades.

Durante seus 48 anos de atividade, o CETEM desenvolveu mais de 800 projetos tecnológicos e prestou centenas de serviços para empresas atuantes nos setores minerometalúrgico, químico e de materiais.

CETEM
CENTRO DE TECNOLOGIA MINERAL

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO