

PANORAMA CIENTÍFICO DA MODELAGEM QSAR: ANÁLISE DE PUBLICAÇÕES NAS ÚLTIMAS DUAS DÉCADAS.

Sheila Maria Gomes Santos¹, Maria Clara Silva Ferreira², Francisco Alixandre Ávila Rodrigues³, Ligia Claudia Castro de Oliveira⁴

A modelagem QSAR, abordagem crucial na concepção de fármacos, busca entender a correlação entre a estrutura química de um composto e sua atividade biológica. A cientometria, ramo da ciência que analisa e mede resultados, é útil para monitorar o progresso das produções científicas nessa área e para a elaboração de políticas de pesquisa. Esse trabalho teve como objetivo obter padrões de dados referentes à taxa de publicações, países e afiliações mais ativas sobre o tema da modelagem QSAR. Foi utilizada a base de dados PubMed, e como estratégia de busca, utilizamos os descritores "QSAR" e "Quantitative Structure- Activity Relationship". Como critérios de inclusão, foram consideradas pesquisas experimentais em língua inglesa e portuguesa, enquanto artigos de revisão foram excluídos. O estudo resultou em um total de 4.284 resultados, representando os últimos 20 anos de trabalhos publicados, no período de 2000 a 2025. Dessa forma, foi possível identificar que houve um aumento a partir do ano de 2010, alcançando então, um total de 175 artigos, e um pico máximo de publicações em 2021, com 362 artigos publicados. Os anos com menos publicações foram 2000, 2001, 2002, 2003, e 2004, com um total de 101 publicações ao todo. Em relação ao ranking de países e o número de publicações, destacam-se os Estados Unidos, liderando a pesquisa com 785 publicações, seguido pela China com 701 e Japão com 612. Logo após, vem a Alemanha com 547, Reino Unido com 498, França com 416, Canadá com 385 e Coreia do Sul com 324 publicações. Países como Itália, Espanha, Austrália, Suíça, Índia, Rússia, Holanda, Suécia, Bélgica, Israel, Singapura, Polônia, México, África do Sul, Turquia, Arábia Saudita, Brasil e Emirados Árabes Unidos apresentaram números menores, cada um entre 5 a 10 publicações. Dessa forma, os dados mostram que as regiões mais ativas incluem países

¹ Universidade Regional do Cariri, email: Sheila.maria@urca.br

² Universidade Regional do Cariri, email: Clara.ferreira@urca.br

³ Universidade Federal do Cariri, email: alixandre.avila@ufca.edu.br

⁴ Universidade Federal do Cariri, email: ligia.castro@urca.br

X SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA
XXVIII SEMANA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA URCA
10 a 14 de NOVENBRO de 2025

Tema: “UNIVERSIDADE E SOCIEDADE NA AGENDA 2030”



desenvolvidos e líderes mundiais em inovação, como os Estados Unidos, China, Japão e Alemanha, seguidos por potências europeias e asiáticas com forte investimento em ciência e tecnologia. Concluimos que há um considerável número de pesquisas voltadas ao referido tema, mostrando assim, que a modelagem QSAR possui alta eficiência em reduzir custos e tempo no processo de descoberta e desenvolvimento de novos medicamentos e agroquímicos, já que nenhum composto precisa ser sintetizado ou testado antes da avaliação computacional.

Palavras-chave: QSAR. Cientometria. Fármacos.

Agradecimentos:

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro concedido.

¹ Universidade Regional do Cariri, email: Sheila.maria@urca.br

² Universidade Regional do Cariri, email: Clara.ferreira@urca.br

³ Universidade Federal do Cariri, email: alixandre.avila@ufca.edu.br

⁴ Universidade Federal do Cariri, email: ligia.castro@urca.br