

## MODELAGEM BIBLIOMÉTRICA SOBRE TEORIA DO FUNCIONAL DE DENSIDADE APLICADA EM ESTUDOS DE PAHs EM GALÁXIAS

MATEUS B. PAIÃO<sup>1</sup>; DINALVA A. SALES<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Universidade Federal do Rio Grande – mateuspaiao159@gmail.com*<sup>1</sup>

<sup>2</sup>*Universidade Federal do Rio Grande – dinalvaires@gmail.com*<sup>2</sup>

### 1. INTRODUÇÃO

Partindo da importância e da necessidade de obter referências bibliográficas, esta modelagem pode colaborar para essa situação que muitas vezes é tão frustrada e árdua para alguns. Para obter e analisar as referências bibliográficas, é utilizado um método que aplica o Bibliometrix (ARIA; CUCCURULLO, 2017) que está disponível na linguagem R, pode-se realizar análises profundas e interativas dos dados da bibliografia. Scopus e Web of Science (WoS), são as plataformas utilizadas para obter os dados, estas ainda permitem fazer análises métricas, pois possuem informações necessárias sobre os artigos e pesquisas que se desejam. Com o Bibliometrix, pode fazer comparações de agrupamentos e ranquear por citação e assim fornecer informações capazes de definir quais referências e a relevância a se utilizar para a escrita e pesquisa. Nesse caso utiliza o Bibliometrix para analisar os arquivos-bases adquiridos nas plataformas Scopus e WoS que se referem a aplicação da Teoria do Funcional de Densidade (DFT) aplicada em estudos de Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos (PAHs) em galáxias. Inicialmente essa ferramenta ajuda a analisar referências, podem colaborar com qualquer linha e tema de pesquisa, inclusive para a que é abordada nesse caso, se aplicada corretamente e compreendida a aplicabilidade. Após a utilização do método da bibliometria, onde se usou o Bibliometrix para analisar os dados de diversas formas, com o R para tratar os dados encontrados nas bases Scopus e WoS, e a revisão sistemática, foram encontrados diversos artigos que podem colaborar na investigação do tema. Entre eles, dez foram selecionados para serem estudados por serem os mais citados globalmente

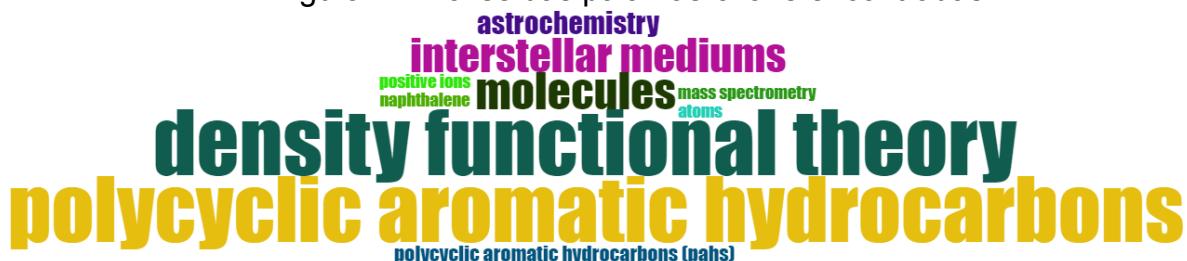
### 2. METODOLOGIA

Para identificar artigos que se referem ao tema específico, sobre DFT aplicada em estudos de PAHs em galáxias, a aplicação das ferramentas pode ser divididas em três etapas: coleta de dados na Scopus e WoS, tratamento de dados em R e também a análise com o Bibliometrix. Partindo disso, será usado essas etapas para buscar as obras sobre DFT aplicada em estudos de PAHs em galáxias, com o critério de busca em inglês, pois se tem maior efetividade na busca, com as palavras-chave: PAH, DFT e ISM. Artigos em periódicos e artigos em conferências foram os tipos de publicação pesquisados. Para coletar os dados na Scopus e Wos se dá por meio do portal de periódicos da CAPES, onde para cada um tem um modo de pesquisar as palavras-chave e o período, e assim se faz para ambos. Para um melhor resultado na pesquisa foram inseridas as palavras-chave: "Polycyclic and Aromatic and Hydrocarbons", "Density and functional and theory" e "Interstellar and Medium". Após encontrar os trabalhos pesquisados se faz o Download. Com isso obteve um total de dois arquivos a serem analisados e adicionados no Script, um da Scopus e outro da WOS. Nessa

coleta de dados foi definido desde 1960, pois era o máximo para uma das pesquisadas.

Após conseguir os dados a ser trabalhado é necessário fazer um tratamento para analisar e conseguir utilizar o Bibliometrix, com esse objetivo se utiliza o R, para criar um script que fará esse tratamento de dados e no fim abrir o Bibliometrix assim partindo para parte final da análise. Esse script inicia com o comando de instalar o pacote do Bibliometrix. Se faz o carregamento e conversão dos arquivos baixados para o formato Bibliometrix, depois unifica os dois arquivos em apenas um, gerando outro arquivo em "csv". Após ter o documento que unifica os dois originais é possível gerar uma sumarização dos dados no R e ainda definir a quantidade que será apresentado neste sumário, e com isso gerado é possível gerar um gráfico da quantidade de citações em função dos anos. Ao fim do script é dado o comando para abrir o Bibloshiny , que é uma ferramenta já incluída no Bibliometrix que vai ser utilizada para geração e visualização de diferentes análises bibliométricas. Quando passa para análise no Bibloshiny temos que adicionar o arquivo gerado pelo script. Após inserido o arquivo, consegue uma gama de análises, basta abrir o Bibloshiny com o arquivo unificado, e selecionar a opção que deseja visualizar. Outro exemplo da capacidade do Bibliometrix é a geração da análise, veja as palavras-chave dos artigos, figura 1.

Figura 1: Análise das palavras-chave encontradas



Fonte: O autor.

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Após encontrado os dados por meio dos Periódicos da Capes, Scopus e Wos, e o tratamento necessário pelo R, consegue-se partir para a análise. Com utilização do Bibliometrix se analisou toda a bibliometria dos artigos encontrados, seguindo o método proposto, consegue ter uma visão precisa do que a comunidade científica já mencionaram em relação a uma linha de pesquisa, as principais fontes sobre as publicações, autores com mais citações, a colaboração dos países comparando visualmente com o mapa mundial, além gerar diversos gráficos e possuir a opção de salvar os dados de diferentes formas. Além disso, tem como selecionar as informações, gráficos e entre outras coisas e marcar para ser salvo em único relatório. É necessário se atentar a mudar os filtros antes de tentar plotar, pois vem com alguns valores padrões que podem deduzir que está com erro, mas alterando a quantidade se soluciona o problema. Tem como observar as palavras-chave encontradas a partir dos dados obtidos. É gerado resumos das informações dos dados gerados pelo Bibliometrix, apesar de no momento da pesquisa na Scopus e WOS ser colocado a partir da década de 60, foram encontrados artigos no intervalo de tempo de 2004 a 2022 que satisfazia as condições da pesquisa. Com esta modelagem foi identificado os dez principais

artigos que se referem a DFT aplicado em estudos de PAHs em galáxias, pois os mesmos são os mais citados globalmente, veja a tabela 1, e por incluírem as três principais palavras-chave determinadas no início da pesquisa: PAH, DFT e ISM.

**Tabela 1:** Citações globais dos artigos obtidos

Artigo	Citações totais
1º(OOMENS et al., 2006)	452
2º(THROWER et al., 2012)	70
3º(Castellanos, P. et al., 2018)	46
4º(REITSMA et al., 2014)	44
5º(Malloci, G. et al., 2008)	43
6º(SZCZEPANSKI et al., 2006)	41
7º(SIMON, 2007)	38
8º(STEGLICH et al., 2013)	35
9º(VALA et al., 2009)	30
10º(PATHAK; RASTOGI, 2007)	29

A etapa que pode impactar de forma atípica na pesquisa e resultados é a definição das palavras-chave usadas. Foram obtidos resultados e informações satisfatórias e as dificuldades encontradas foram apresentadas aqui, desde a introdução que encontra parte dos resultados. Com o alcançado neste trabalho, o método e os resultados se mostram satisfatórios e também replicáveis, se seguida a metodologia e as observações aqui apresentadas, a outras temáticas além dessa utilizada.

#### **4. CONCLUSÕES**

A coleta de dados na Scopus e WoS conseguiu alcançar dados suficientes e intrinsecamente relacionados ao tema de pesquisa definido. No tratamento de dados em R se tem detalhes de como ocorreu. E na análise bibliométrica com Bibliometrix conseguiu uma análise geral e em certos momentos específicos dos dados encontrados. Como visto, a utilização do Bibliometrix colabora de forma significativa e prática para trabalhar com dados bibliométricos, ora vista que após determinar o método da pesquisa e assim realizada, conseguiu-se analisar as informações que podem orientar no sentido do que se tem sobre determinada linha de pesquisa, servindo como uma ferramenta útil como suporte no momento de procurar o que tem na comunidade científica. Nas conclusões o autor deve apresentar objetivamente qual a inovação obtida com o trabalho, evitando apresentar resultados neste espaço.



## 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ARIA, M.; CUCCURULLO, C. bibliometrix: An r-tool for comprehensive science mapping analysis. **Journal of Informetrics**, Elsevier, v. 11, n. 4, p. 959–975, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.joi.2017.08.007>>.
- Castellanos, P. et al. Photoinduced polycyclic aromatic hydrocarbon dehydrogenation the competition between h- and h<sub>2</sub>-loss. **A&A**, v. 616, p. A166, 2018.
- Mallochi, G. et al. Dehydrogenated polycyclic aromatic hydrocarbons and uv bump. **A&A**, v. 489, n. 3, p. 1183–1187, 2008.
- OOMENS, J. et al. Gas-phase infrared multiple photon dissociation spectroscopy of mass-selected molecular ions. **International Journal of Mass Spectrometry**, v. 254, n. 1, p. 1–19, 2006. ISSN 1387-3806. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1387380606002570>>.
- PATHAK, A.; RASTOGI, S. Theoretical infrared spectra of large polycyclic aromatic hydrocarbons. **Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy**, v. 67, n. 3, p. 898–909, 2007. ISSN 1386-1425. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386142506005270>>.
- REITSMA, G. et al. Deexcitation dynamics of superhydrogenated polycyclic aromatic hydrocarbon cations after soft-x-ray absorption. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 113, p. 053002, 7 2014.
- SIMON, A. Thermochemistry and infrared spectroscopy of neutral and cationic ironpolycyclic aromatic hydrocarbon complexes of astrophysical interest: fundamental density functional theory studies. **J. Phys. Chem. A**, v. 111, p. 9745–9755, 2007.
- STEGLICH, M. et al. The abundances of hydrocarbon functional groups in the interstellar medium inferred from laboratory spectra of hydrogenated and methylated polycyclic aromatic hydrocarbons. **The Astrophysical Journal Supplement Series**, **The American Astronomical Society**, v. 208, n. 2, p. 26, 9 2013.
- SZCZEPANSKI, J. et al. Infrared spectroscopy of gas-phase complexes of fe+ and polycyclic aromatic hydrocarbon molecules. **The Astrophysical Journal**, v. 646, n. 1, p. 666, 7 2006.
- THROWER, J. D. et al. Experimental evidence for the formation of highly superhydrogenated polycyclic aromatic hydrocarbons through h atom addition and their catalytic role in h<sub>2</sub> formation. **The Astrophysical Journal**, The American Astronomical Society, v. 752, n. 1, p. 3, 5 2012.
- VALA, M. et al. H<sub>2</sub> ejection from polycyclic aromatic hydrocarbons: Infrared multiphoton dissociation study of protonated 1,2-dihydronaphthalene. **J. Am. Chem., Soc.**, v. 131, p. 5784–5791, 2009