



Plan de Gestión de Datos

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO	
1. – Datos del Proyecto	
- Título del Proyecto (en castellano)	
Modelado teórico de procesos fisicoquímicos para dispositivos electroquímicos Código: 50620190100063LI	
- Título del Proyecto (en inglés)	
Theoretical modeling of physicochemical processes for electrochemical devices	
- Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen	
<p>La investigación se orienta a la obtención de conocimientos para el mejoramiento de tecnologías de celdas de combustible, las cuales constituyen una forma alternativas y más atractiva de producción de energía eléctrica, debido entre otras razones a su impacto positivo en el medio ambiente. Se tiene como objetivo la generación de los conocimientos fundamentales para una gradual y progresiva sustitución de los procesos térmicos convencionales de producción de electricidad por tecnologías más limpias. En este sentido, la migración desde materiales de electrodo convencionales a nanoestructurados con gran área superficial presenta beneficios significativos para la tecnología, y más específicamente los nanotubos de carbono constituyen un material fascinante para la electroquímica, debido a su gran área superficial. Además, la capacidad de almacenar iones les confiere grandes expectativas en torno a las baterías, y más aún, nanotubos de carbono (CNTs) químicamente modificados han demostrado ser buenos catalizadores para la reacción de reducción de oxígeno (ORR) en las celdas combustibles. El presente plan propone abordar estudios teóricos que permitan comprender el comportamiento nanotubos de carbono de pared simple (CNTs) modificados en su interior con átomos de metales en diferentes configuraciones y/o sustituidos átomos de C de su pared por algún metal. Se busca entender cómo los cambios en propiedades luego de la modificación metálica influenciarán en la ORR. Específicamente, se pretende analizar el efecto que estos sistemas modificados tendrán sobre la adsorción y/o disociación de oxígeno molecular, ambos procesos elementales involucrados en el mecanismo de dicha reacción.</p>	
- Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen	
<p>This project is focused in the improvement of fuel cell technologies, an attractive alternative to produce electrical energy to diminish negative impact on the environment. The main goal is to achieve fundamental knowledge to substitute the conventional thermal processes of electrical energy production by cleaner technologies. In this sense, the migration from conventional electrode materials to nanostructured ones with a large surface area presents significant benefits for these technology, and specifically, carbon nanotubes are a fascinating material for electrochemistry, due to their large surface area. Furthermore, the ability to store ions gives them high expectations for batteries and chemically modified carbon nanotubes (CNTs) have proven to be good catalysts for the oxygen reduction reaction (ORR) in fuel cells. The present project proposes to undertake theoretical studies to understand the behavior of single-walled carbon nanotubes (CNTs) modified inside with metal atoms in different configurations and / or substituted in their wall by some metal. The aim is to understand how the changes in the CNT properties will influence the ORR (oxygen reduction reaction) after the metal modification. Specifically, it is intended to analyze the effect that these modified systems will have on the adsorption</p>	



and/or dissociation of molecular oxygen, both elementary processes involved in the mechanism of the reaction.		
- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano)		
DFT	Electroquímica	Nanotubos
- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés)		
DFT	Electrochemistry	Nanotubes
2 – Datos del Director/ar del Proyecto		
- Nombre y Apellido		
Paola Quaino		
- Unidad Académica		
Facultad de Ingeniería Química - UNL		
- Teléfono oficial de contacto		
+54-342-4571164 interno 2611		
-Teléfono móvil de contacto		
+54-342-5015876		
-E-mail del Director/a del Proyecto		
pquaino@fiq.unl.edu.ar		

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describa la toma de muestras / datos a realizar

- D Origen de datos: simulaciones computacionales
- T Tipo de datos: datos computacionales
- R Registro: registro en formato digital de datos generados por cálculos.
- Formato: formatos de archivos generados por VASP, LAMMPS, Gaussian.

- Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? (marque X)

<input checked="" type="checkbox"/>	NO (X)
<input type="checkbox"/>	SI. Elija una de las opciones:
a)	Se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes
b)	No se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible
c)	Existe un contrato con un tercero que impide la divulgación
d)	Otro. Justifique.



- Período de Confidencialidad: Es el período durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El período máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público.	
Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con "X".	
<input type="checkbox"/>	1 (UN) año
<input type="checkbox"/>	2 (DOS) años
<input type="checkbox"/>	3 (TRES) años
<input type="checkbox"/>	4 (CUATRO) año
<input checked="" type="checkbox"/>	5 (CINCO) años (X)
<input type="checkbox"/>	Otro.
Motivos:	

Paola Quaino



INSTRUCTIVO PARA COMPLETAR EL PLAN DE GESTIÓN (PGD)

El PGD no es un documento definitivo, sino que se desarrollará a lo largo del ciclo de vida del proyecto.

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

1 – Datos del Proyecto

Título del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar el título completo del proyecto (en castellano), indicando además el código asignado por la SCAyT.

Título del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar el título completo del proyecto en inglés.

Descripción del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar la descripción del Proyecto en castellano.

Descripción del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar la descripción del Proyecto en inglés.

Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar tres palabras claves descriptivas del Proyecto, en castellano.

Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar tres palabras claves descriptivas del Proyecto, en inglés.

2- Datos del Director/a del Proyecto

Nombre y Apellido del Titular del Proyecto: Nombre completo y apellido del Titular del Proyecto.

Unidad Académica: Nombre de la Unidad Académica a la que pertenece el/la directora/a del Proyecto.

Teléfono oficial de contacto: Número de teléfono de la oficina/laboratorio/Institución del Director/a del Proyecto, donde pueda ser contactado, incluyendo número de área/país (ej: Para Santa Fe: + 54 9 342 4999-9999).

Teléfono móvil de contacto: Número de teléfono móvil del director/ar del Proyecto, donde pueda ser contactado, incluyendo número de área/país.

E-mail del Director/a del Proyecto: Correo electrónico de contacto del Director/a del Proyecto.

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO



Describa la toma de muestras/datos a realizar: Información descriptiva sobre la toma de muestras que resultarán en datos/conjuntos de datos. La descripción deberá incluir información de contexto (lugar de toma de los datos; instrumentos, etc.)

Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? Deberá marcar con una "X" la opción correcta. En caso de responder afirmativamente, deberá justificar debidamente, comprendiendo que sólo en casos de extrema excepcionalidad esta restricción de acceso a los datos resulta practicable/aceptable.

Período de Confidencialidad: Es el periodo durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El periodo máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público.

Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios.

Deberá indicar los años que considera necesario prorrogar el período de confidencialidad y explicar los motivos.