

## Plan de Gestión de Datos

### INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

#### 1. – Título del Proyecto

##### - Título del Proyecto (en castellano)

Modelado computacional, caracterización electrónica y óptica de materiales bidimensionales interactuando con átomos metálicos. 85320240100023LI

##### - Título del Proyecto (en inglés)

Computational modeling, electronic and optical characterization of two-dimensional materials interacting with metal atoms.

#### -Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen

El grafeno, un material bidimensional (2D) formado por una sola capa de átomos de carbono, ha despertado gran interés debido a sus excepcionales propiedades físicas y químicas, incluyendo alta conductividad eléctrica, térmica y mecánica, transparencia óptica y flexibilidad. Sin embargo, su aplicación en dispositivos electrónicos y otros campos aún se encuentra en sus primeras etapas debido a su baja reactividad química.

El grafino, un material similar al grafeno, presenta una estructura tridimensional con una disposición ondulada de los átomos de carbono. Esta estructura ondulada le confiere mayor rigidez y estabilidad que el grafeno, y también posee potenciales aplicaciones tecnológicas en diferentes áreas.

#### Objetivos:

Este proyecto de investigación propone utilizar técnicas de modelado computacional para estudiar la interacción entre grafino y átomos metálicos, con el objetivo de comprender cómo esta interacción afecta las propiedades del grafino y explorar nuevas aplicaciones potenciales.

- **Objetivo General:**

Implementar técnicas de modelado computacional avanzadas basadas en DFT para calcular con alta precisión la estructura electrónica, propiedades ópticas y mecánicas del grafino interactuando con átomos metálicos.

- **Objetivos Específicos:**

- Estudiar la estructura electrónica y las propiedades ópticas del Grafino interactuando con átomos metálicos mediante simulaciones computacionales.
- Identificar los factores que influyen en la interacción entre el grafino y átomos metálicos.
- Utilizar nuevos métodos de cálculo aplicables al estudio de sistemas bidimensionales en interacción con átomos metálicos.
- Explorar de manera detallada y sistemática las aplicaciones del grafino interactuando con átomos metálicos en las áreas de electrónica, baterías y catalizadores, con el objetivo de desarrollar prototipos funcionales de dispositivos o materiales que tengan un impacto significativo en la eficiencia energética, la sostenibilidad y la salud.



### **-Descripción del Proyecto (en ingles) Resumen**

Graphene, a two-dimensional (2D) material made up of a single layer of carbon atoms, has attracted great interest due to its exceptional physical and chemical properties, including high electrical, thermal and mechanical conductivity, optical transparency and flexibility. However, its application in electronic devices and other fields is still in its early stages due to its low chemical reactivity. Graphyne, a material similar to graphene, has a three-dimensional structure with a wavy arrangement of carbon atoms. This wavy structure gives it greater rigidity and stability than graphene, and also has potential technological applications in different areas.

#### **Objectives:**

This research project proposes to use computational modeling techniques to study the interaction between graphyne and metal atoms, with the aim of understanding how this interaction affects the properties of graphyne and exploring new potential applications.

- **General objective:**  
Implement advanced computational modeling techniques based on DFT to calculate with high precision the electronic structure, optical and mechanical properties of graphyne interacting with metal atoms.
- **Specific objectives:**
  - Study the electronic structure and optical properties of graphyne interacting with metal atoms through computational simulations.
  - Identify the factors that influence the interaction between graphyne and metal atoms. ◦ Use new calculation methods applicable to the study of two-dimensional systems in interaction with metal atoms.
  - Explore in detail and systematically the applications of graphyne interacting with metal atoms in the areas of electronics, batteries and catalysts, with the aim of developing functional prototypes of devices or materials that have a significant impact on energy efficiency, sustainability and health.

### **-Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en castellano)**

Grafino.  
Modelado computacional.  
Almacenamiento de energía (Baterías)

### **- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en ingles)**

Graphyne.  
Computational modeling.  
Energy storage (Batteries).

## **2 – Datos del Director/ar del Proyecto**

### **- Nombre y Apellido**

Jorge Luis Navarro Sánchez

### **- Unidad Académica**

Facultad de Ingeniería Química

### **- Teléfono oficial de contacto**

+54 3435232890

### **-Teléfono movil de contacto**

+54 3435232890

### **-E-mail del Director/a del Proyecto**

**Dependencia:** Secretaría de  
Ciencia, Arte y Tecnología

Bv. Pellegrini 2750 S3000ADQ Santa Fe  
Tel: (0342) 457 1110 int.: 195  
Email: [cienciaytecnica@unl.edu.ar](mailto:cienciaytecnica@unl.edu.ar)



geor9e@gmail.com

## DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

### -Describa la toma de muestras / datos a realizar

Los datos que se obtendrán a partir de la realización del proyecto son datos originados a partir del desarrollo de cálculos computacionales, los cuales serán procesados en software adecuado para la obtención de los gráficos necesarios para realizar un análisis de las propiedades físicas de interés.

### - 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)

X	<b>NO</b>
	<b>SI. Elija una de las opciones:</b>
a)	se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes no se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible existe un contrato con un tercero que impide la divulgación.
b)	Otro. Justifique.
<p><b>- 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.</b></p> <p><b>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".</b></p>	
X	<b>1 (UN) año</b>
	<b>2 (DOS) años</b>
	<b>3 (TRES) años</b>
	<b>4 (CUATRO) año</b>
	<b>5 (CINCO) años</b>
	<b>Otro.</b>
	<b>Motivos:</b>



## INSTRUCTIVO PARA LLENADO DEL PLAN DE GESTIÓN DE DATOS

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- 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 Clave descriptivas del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar tres palabras clave descriptivas del Proyecto, en castellano.
- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar tres palabras clave 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 UA 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 la Santa Fe: + 54 9 342 4999-9999).
- Teléfono móvil de contacto: Número de t
- 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 resultaran en datos / conjuntos de datos. La descripción deberá incluir información de contexto (lugar de toman 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 solo 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.