

## Plan de Gestión de Datos

<b>INFORMACION SOBRE EL PROYECTO</b>
<b>1. – Título del Proyecto</b>
<b>- Título del Proyecto (en castellano)</b>
Tecnologías cuánticas aplicadas a la Electrocatalisis
<b>- Título del Proyecto (en ingles)</b>
Quantum technologies applied to Electrocatalysis
<b>-Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen</b>
<p>En el presente proyecto se abordarán estudios teóricos relacionados con nanomateriales electrocatalíticos y el análisis cinético de reacciones involucradas en las celdas de combustible de bajas temperaturas. Se pretende contribuir al entendimiento de los principios fundamentales que rigen la Electrocatalisis a través del desarrollo de modelos teóricos que permitan la evaluación de la actividad electrocatalítica de las reacciones de hidrógeno y de reducción de oxígeno sobre quantum dots de grafeno y grafino modificados con metales, y su correlación con las propiedades del material (naturaleza química, geometrías, propiedades adsorptivas). Una meta importante es disponer de evidencias que permitan el diseño inteligente de nanomateriales que sean más eficientes para una dada reacción. Se aplicarán métodos químico-cuánticos para construir dichos electrodos, se estudiarán los procesos asociados con las reacciones mencionadas así como también la influencia de propiedades electrónicas y magnéticas de los nuevos diseños sobre las propiedades catalíticas.</p> <p>Mediante la aplicación de la Teoría de la Electrocatalisis, se evaluará el efecto del entorno electroquímico durante el proceso de transferencia electrónica y la actividad electrocatalítica de los nanomateriales. Finalmente se investigará y discutirá sobre los cambios en el efecto del confinamiento cuántico existente en los quantum dots de grafeno debido a la modificación metálica.</p>
<b>-Descripción del Proyecto (en ingles) Resumen</b>
<p>In the present project, theoretical studies related to electrocatalytic nanomaterials and the kinetic analysis of reactions involved in low-temperature fuel cells will be addressed. The aim is to contribute to the understanding of the fundamental principles governing Electrocatalysis through the development of theoretical models that allow the evaluation of the electrocatalytic activity of hydrogen and oxygen reactions on metal-modified graphene quantum dots and metal-modified graphyne, and their correlation with material properties (chemical nature, geometries, adsorptive properties). An important goal is to provide evidence for the intelligent design of nanomaterials that are more efficient for a given reaction. Chemical-quantum methods will be applied to construct such electrodes, studying the processes associated with the mentioned reactions as well as the influence of electronic and magnetic properties of the new designs on catalytic properties. By applying the Theory of Electrocatalysis, the effect of the electrochemical environment during the electron transfer process and the electrocatalytic activity of the nanomaterials will be evaluated. Finally, the changes in the quantum confinement effect existing in graphene quantum dots due to metal modification will be investigated and discussed.</p>
<b>-Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en castellano)</b>
DFT   Electrocatalisis   Puntos cuánticos



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

DFT | Electrocatalysis | Quantum dots

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

**- Nombre y Apellido**

Paola Quaino

**- Unidad Académica**

Instituto de Química Aplicada del Litoral (CONICET-UNL), Facultad de Ingeniería Química - UNL

**- Teléfono oficial de contacto**

+54-342-4571164 interno 2611

**-Teléfono movil 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**

Origen de datos: simulaciones computacionales

Tipo de datos: datos computacionales

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)**

NO (X)

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 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**



<b>considera necesarios. Marque su opción con "X".</b>	
	<b>1 (UN) año</b>
	<b>2 (DOS) años</b>
	<b>3 (TRES) años</b>
	<b>4 (CUATRO) año</b>
	<b>5 (CINCO) años (X)</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.