Plan Overview

A Data Management Plan created using DMP Tool

DMP ID: https://doi.org/10.48321/D1890J

Title: SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO E AVALIAÇÃO TOXICOLÓGICA DE PARTÍCULAS DO COMPÓSITO Ag3VO4\Ag

Creator: Guilherme henrique Cruvinel - **ORCID:** 0000-0002-5948-2150

Affiliation: Universidade Federal de São Carlos (ufscar.br)

Principal Investigator: Guilherme Henrique Cruvinel

Data Manager: Guilherme Henrique Cruvinel

Project Administrator: Elson Longo da Silva, Marcela Bianchessi da Cunha Santino, Silvia Maria Casassa

Contributor: Rafael de Queiroz Garcia, Leonardo de Boni, Regiane Cristina de Oliveira

Funder: São Paulo Research Foundation (fapesp.br)

Funding opportunity number: 2020/11232-3

Grant: https://bv.fapesp.br/pt/pesquisador/682850/guilherme-henrique-cruvinel

Template: Digital Curation Centre

Project abstract:

Historicamente, o desenvolvimento de novos métodos de síntese de materiais esteve atrelado com o desenvolvimento das sociedades, sobretudo pela capacidade de promover mudanças nos materiais e possibilitar novos tipos de aplicações tecnológicas. Embora exista um conteúdo bastante sofisticado sobre laser pulsado em femtosegundos, há, ainda, necessidade de se entender os mecanismos de formação e de transformação de materiais semicondutores, assim como verificar as alterações proporcionadas, de forma mais apropriada, quando sintetizados por esta técnica. Contudo, tal desenvolvimento deve sempre se aliar com a necessidade de se minimizar e verificar os efeitos ambientais. Esse estudo teve como objetivos principais sintetizar Ag3VO4 via método hidrotérmico assistido por micro-ondas, em tempos de síntese distintos (t: 2, 4, 8, 16, 32, 64 min); irradiar as amostras de Ag3VO4 por meio de laser pulsado em femtosegundos para formação do compósito; caracterizar compósitos particulados; assim como avaliar a ecotoxicidade do compósito na espécie de macrófita aquática flutuante *Ricciocarpus natans*. Os pós obtidos dos compósitos foram caracterizados estruturalmente pelas técnicas de difratometria de raios X, espectroscopia de espalhamento Raman e espectroscopia eletrônica na região do ultravioleta-visível, e possuem a superfície

caracterizada pelas técnicas de microscopia eletrônica de varredura e de transmissão permitindo identificação de alterações estruturais e de superfície. Cálculos teóricos foram utilizados para a compreensão ao nível atômico das estruturas geométricas, vibracional, eletrônica e de distribuição de carga, assim como a natureza das interações químicas presentes nas estruturas dos semicondutores. Além disso, bioensaios de toxicidade foram realizados até o 42° dia a fim de se obter uma análise dos efeitos ecotoxicológicos, com auxílio de modelagem matemática, destas partículas sobre o bioindicador *Ricciocarpus natans*. Os resultados apontaram que o tempo de síntese não realizou alterações a curto, médio e longo alcance no Ag3VO4. A irradiação do Ag3VO4 por laser pulsado em femtosegundo promove a decomposição deste em AgVO3 e Ag metálico, o que possibilitou a formação de compósito nanoestruturado. Os resultados indicaram que todas as ligações químicas podem ser classificadas como tipo transitória; interações químicas entre os átomos de Ag e O podem ser mais fracas do que entre os átomos V e O; interações químicas inesperadas entre ânions e entre cátions podem ocorrer em ambos os semicondutores. Os bioensaios indicaram que adicionar o dobro da concentração de referência e inibir a penetração de radiação eletromagnética no sistema deste trabalho contribuíram para provocar alterações na área media ocupada pelas plantas aquáticas.

O projeto teve financiamento das seguintes agencias de fomento: Fundacao de Amparo a Pesquisa do Estado de Sao Paulo e Coordenacao de Aperfeicoamento de Pessoal de Nivel Superior.

Start date: 04-01-2020

End date: 02-28-2023

Last modified: 07-08-2024

Copyright information:

The above plan creator(s) have agreed that others may use as much of the text of this plan as they would like in their own plans, and customize it as necessary. You do not need to credit the creator(s) as the source of the language used, but using any of the plan's text does not imply that the creator(s) endorse, or have any relationship to, your project or proposal

SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO E AVALIAÇÃO TOXICOLÓGICA DE PARTÍCULAS DO COMPÓSITO Ag3VO4\Ag

Data Collection

What data will you collect or create?

Este projeto de pesquisa obteve os seguintes dados brutos ***qualitativos e quantitativos:***

a) da estrutura interna do Ag3VO4, AgVO3 e do compósito nanoestruturado, que serão produzidos no formato de tabela (.xlsx), imagens (.jpg, .bmp, .tif), arquivos nas mais diversas extensoes (.txt, .d3, .d12, .f9, .f25, .f24, .out, .outp, .Qout, .Qsub, .lista, .sbatch, .BAND, .DOSS, .DAT, .d12, .born, .f20, .f34, .out2, .gpx, .lst, .f98, .optinfo, .xyz, .DSW);

b) da estrutura externa do Ag3VO4 e do compósito nanoestruturado, que serão obtidos e apresentados no formato de imagem (.bmp, .tif, .txt, .ser, .emi);

c) sobre a possível interferência do compósito Ag3VO4|Ag no crescimento de area ocupada pelas plantas aquaticas flutuantes Ricciocarpus natans, que serao registradas fotografias de todos os indivíduos de um mesmo bioensaio sobre papel milimetrado, à cada 7 dias. A partir das imagens obtidas, sera possível avaliar a alteração de área das macrófitas durante o período de experimento por meio do software ImageJ.

How will the data be collected or created?

Os dados brutos foram criados e obtidos a partir dos seguintes métodos:

a) da estrutura interna do Ag3VO4, do AgVO3 e do compósito nanoestruturado: difratometria de raios X (DRX) e refinamento Rietveld, espectroscopia de espalhamento Raman (Raman), espectroscopia eletrônica na região do ultravioleta-visível (UV-Vis) e simulacao computacional utilizando o software CRYSTAL17;

b) da estrutura externa do Ag3VO4 e do compósito nanoestruturado: microscopia eletrônica de varredura (MEV) e microscopia eletrônicade transmissão (MET) com detectores que permitem obtencao de imagens convencionais, realizacao de espectroscopia de perda de energia de eletrons, de alta resolucao e energia dispersiva de raios X;

c) sobre a possível interferência do compósito Ag3VO4|Ag no crescimento das plantas em função do tempo: bioensaios realizado na macrófita aquática flutuante Ricciocarpus natans. e suas fotografias, que sao submetidas ao software de analise de imagens ImageJ.

Documentation and Metadata

What documentation and metadata will accompany the data?

Documentação e metadados dos dados brutos:

a) da estrutura interna do Ag3VO4|Ag e do compósito Ag3VO4|Ag, que foram coletados no formato de tabela e imagens;

b) da estrutura externa do Ag3VO4|Ag e do compósito Ag3VO4|Ag, que foram obtidos e apresentados no formato de imagens;

c) sobre a possível interferência do compósito Ag3VO4|Ag no crescimento das plantas, que foram obtidos na forma de imagens e tabela.

Ethics and Legal Compliance

How will you manage any ethical issues?

Os dados não estão sujeitos a nenhuma restrição ética ou legal, pois parte dos estudos foi realizado em planta aquática Ricciocarpus natans. Além disso, a investigação não é parte de segredos industriais, comerciais ou desenvolvimento de patentes.

How will you manage copyright and Intellectual Property Rights (IP/IPR) issues?

Inicialmente, os dados ficarão embargados até a publicação dos resultados da pesquisa em formato de artigo e dissertação. Após a publicação desses resultados, os dados ficarao disponíveis sob uma licença creative commons em repositório de acesso aberto (Zenodo).

Storage and Backup

How will the data be stored and backed up during the research?

Durante a pesquisa, os dados foram armazenados no google drive e no notebook do pesquisador. Após a pesquisa, os dados estarão disponíveis em repositório de acesso aberto e seguirão as políticas de preservação, backup e arquivamento do repositório.

How will you manage access and security?

Para obter acesso aos dados por parte de um colaborador durante a pesquisa, há a necessidade de autorização do pesquisador, pois somente este possui a senha e login, tanto do notebook, quanto do google drive.

Selection and Preservation

Which data are of long-term value and should be retained, shared, and/or preserved?

Todos os dados devem ser preservados no longo prazo e serão compartilhados em repositório de acesso aberto e divulgados a partir da publicação dos resultados da pesquisa em artigos e dissertações.

What is the long-term preservation plan for the dataset?

Todos os dados serão preservados.

Data Sharing

How will you share the data?

Os dados serão compartilhados em repositório de acesso aberto.

Are any restrictions on data sharing required?

Os dados ficarão embargados até a publicação dos resultados das pesquisas no formato de artigo e dissertação.

Responsibilities and Resources

Who will be responsible for data management?

Durante a pesquisa, o pesquisador principal será o responsável principal pelo gerenciamento dos dados.

What resources will you require to deliver your plan?

Os equipamentos e softwares sao descritos detalhadamente na dissertacao do pesquisa Guilherme Henrique Cruvinel, que ficara disponiveis no Repositorio Instittucional da Universidade Federal de Sao Carlos (https://repositorio.ufscar.br/).

Planned Research Outputs

Image - "Fotografias"

Imagens relacionadas a estrutura externa e associadas a avaliacao ecotoxicologica

Text - "Parte de arquivos da estrutura interna do Ag3VO4, AgVO3 e do composito nanoestruturado"

Dados brutos de tecnicas utilizadas para caracterizacao dos materiais.

Computational simulations - "Parte de arquivos da estrutura interna do Ag3VO4, AgVO3 e do composito nanoestruturado relacionados a simulacao computacional"

Dados gerados a partir do codigo CRYSTAL17, que podera ser acessado utilizando este mesmo codigo

Image and datas - "Parte de arquivos da estrutura externa e de interferencia ambiental"

Parte de arquivos da estrutura externa do Ag3VO4, AgVO3 e do composito nanoestruturado e da possivel interferencia do composito no crescimento de area da macrofita aquatica flutuante

---

Planned research output details

Title	Type	Anticipated release date	Initial access level	Intended repository(ies)	Anticipated file size	License	Metadata standard(s)	May contain sensitive data?	May contain PII?
Fotografias	Image	2024-07-31	Closed	Zenodo	1 GB	Creative Commons Attribution 4.0 International	None specified	No	No
Parte de arquivos da estrutura interna do Ag3VO4, ...	Text	2024-07-31	Closed	Zenodo	100 MB	Creative Commons Attribution 4.0 International	None specified	No	No
Parte de arquivos da estrutura interna do Ag3VO4, ...	Computational simulations	2024-07-31	Closed	Zenodo		Creative Commons Attribution 4.0 International	None specified	No	No
Parte de arquivos da estrutura externa e de interf ...	Image and datas	2024-07-31	Closed	Zenodo		Creative Commons Attribution 4.0 International	None specified	No	No