

Plan Overview

A Data Management Plan created using DMPTool

Title: FROM SINGLE ATOM TO SUPPORTED NANOPARTICLES CATALYSTS: THE USE OF METAL COMPLEXES TO PRODUCE A NEW CLASS OF CATALYSTS FOR METHANE AND CO₂

Creator: Renan Guerra

Affiliation: State University of Campinas (unicamp.br)

Principal Investigator: Renan Barrach Guerra

Data Manager: Renan Barrach Guerra

Project Administrator: Daniela Zanchet

Funder: São Paulo Research Foundation (fapesp.br)

Funding opportunity number: 2020/00691-7

Grant: <https://bv.fapesp.br/en/bolsas/192901/from-single-atom-to-supported-nanoparticles-catalysts-the-use-of-metal-complexes-to-produce-a-new-c/>

Template: UNICAMP-GENERICICO: Aplicável a todas as áreas

Project abstract:

This post-doctorate project aims to produce a new class of catalysts by using metal complexes of interest for methane and CO₂ conversion. In the first part of this project, we will use metal complexes of Ni, Fe, Cu and Au that are commercially available or that can be synthesized by well-established routes, such as (cyclohexadiene) iron tricarbonyl. This will allow us to focus on the parameters that determine the successful anchoring and dispersion of the metal complexes on

different supports, depending on the target reaction (zeolite; MgAl₂O₄, SiO₂, Al₂O₃, ZrO₂ and CeO₂). Characterization techniques such as DRIFTS, XPS and state of art HAADF-STEM with aberration corrector will be used. The catalysts will be submitted to heating treatments, to decompose the metal complexes, and we will study the parameters that determine the metal species that are formed, targeting to tune from single atom to homogenous nanoparticles (<3 nm in diameter). Besides parameters such as nature of the support, pre-treatments (reducing/oxidizing), heating protocol and atmosphere during to promote the metal complex decomposition, we expect that the nature of the ligands will also contribute to the species that are formed since they will tune the overall interaction with the support. The most promising materials will be tested in the reactions involving CO₂ and CH₄ conversion, in collaboration with other members of this thematic project, and their performance will be correlated to their structural and electronic properties. One important aspect will be the stability of the catalysts under reaction conditions and we will perform a detail characterization of the catalysts post-reaction. According to the results, the second part of this project will involve the synthesis of new bimetallic complexes, specially targeting to produce bimetallic supported catalysts

Start date: 08-01-2020

End date: 07-31-2022

Last modified: 10-09-2022

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

FROM SINGLE ATOM TO SUPPORTED NANOPARTICLES CATALYSTS: THE USE OF METAL COMPLEXES TO PRODUCE A NEW CLASS OF CATALYSTS FOR METHANE AND CO₂

Descrição dos Dados e Metadados

Quais serão os dados coletados?

DADOS DE CARACTERIZAÇÃO E ATIVIDADE CATALÍTICA DE MATERIAIS CONTANDO NANOPARTÍCULAS OU ÁTOMOS ISOLADOS PREPARADOS A PARTIR DA HETEROGENEIZAÇÃO E DECOMPOSIÇÃO TÉRMICA DE COMPLEXOS METÁLICOS CONTENDO DERIVADOS DE LIGANTES SALEN.

Que metadados serão anotados e qual padrão será seguido?

DUBLIN CORE - TÍTULO, AUTOR, COLABORADORES, PALAVRAS-CHAVE, RESUMO, FORMATO, LÍNGUA, AGÊNCIA FINANCIADORA, NÚMERO DO PROJETO, LOCALIZAÇÃO.

Aspectos Legais e Facilidade de Acesso aos Dados

Quais são as questões legais e éticas associadas aos dados e relevantes a este projeto?

OS DADOS NÃO ESTÃO SUJEITOS À NENHUMA RESTRIÇÃO ÉTICAS OU LEGAIS.

Quais são as políticas a serem utilizadas para o compartilhamento de dados?

OS DADOS ESTARÃO SOB LICENÇA CC_BY.

Gestão de Dados e Armazenamento

Em que formatos serão armazenados os arquivos resultantes da pesquisa em questão? Que software poderá ser utilizado para a manipulação de cada um dos formatos listados?

TEXTUAIS (.DOC), DADOS DE CARACTERIZAÇÃO (RMN, FTIR, DRX, TEM, XAS, ETC) SERÃO CONVERTIDOS EM .TXT OU IMAGENS .TIFF. EM CASOS ESPECÍFICOS DE DADOS COM SOFTWARE EXCLUSIVO, SERÁ FEITA A INDICAÇÃO DO MESMO.

Como e onde estes arquivos serão mantidos? Por quanto tempo ocorrerá esta preservação?

Como será realizado o backup destes dados?

DURANTE A VIGÊNCIA, OS DADOS SERÃO MANTIDOS NO GOOGLE DRIVE DO PESQUISADOR.

AO TÉRMINO DA VIGÊNCIA, OS DADOS CONTINUARÃO NO GOOGLE DRIVE DO PESQUISADOR POR TEMPO NÃO INFERIOR À 10 ANOS, E SERÃO TAMBÉM DEPOSITADOS NO REPOSITÓRIO DA UNICAMP, SEGUINDO AS POLÍTICAS DE PRESERVAÇÃO, BACK-UP E ARQUIVAMENTO.
