Plan Overview

A Data Management Plan created using DMP Tool

DMP ID: https://doi.org/10.48321/D1FW2Q

Title: VALORIZAÇÃO TERMOQUÍMICA DE HUMINAS INSOLÚVEIS DERIVADAS DA PLATAFORMA DE CONVERSÃO DE AÇÚCARES C5 E C6

Creator: Laura Plazas Tovar - **ORCID:** 0000-0003-1001-9250

Affiliation: Universidade Federal de São Paulo (unifesp.br)

Principal Investigator: Marina Gontijo Souza Macedo, Julio César de Jesus Gariboti

Project Administrator: Laura Plazas Tovar

Funder: São Paulo Research Foundation (fapesp.br)

Funding opportunity number: 2020/11347-5

Grant: https://bv.fapesp.br/en/bolsas/194409/thermochemical-valorisation-of-insoluble-humins-derived-from-the-c5-and-c6-sugars-conversion-platfor/

Template: Digital Curation Centre

Project abstract:

Subprodutos à base de huminas, de reações de hidrólise/desidratação, catalisadas por ácidos, de açúcares (pentoses – C5 e hexoses – C6), chegam a ser os principais responsáveis da quebra da circularidade do processo de produção de ácido levulínico (AL) e furfural (FUR) e contraria o conceito *triple bottom line*, pilar na economia circular. Visando a manutenção da química circular e os avanços tecnológicos para o desenvolvimento sustentável é requerido integrar estes subprodutos em uma cadeia valiosa como fonte potencial de carbono para produtos químicos, biomateriais e aditivos. Neste projeto de iniciação científica serão valorizadas as huminas derivados da plataforma de produção de AL e FUR a partir do bagaço de cana-de-açúcar pela rota termoquímica

via pirólise. Três cenários principais de formação de huminas serão investigados: ***Cenário i***: durante a produção de AL catalisada com ácido combinados três etapas; ***Cenário ii:*** durante a conversão do bagaço de cana-de-açúcar catalisada com ácido para produzir AL investigado em uma única etapa; e ***Cenário iii:*** durante a conversão catalisada com ácido de açúcares hemicelulósicos do bagaço de cana-de-açúcar para produzir FUR. Caracterizações dos materiais serão realizadas para conhecer e investigar a composição dos elementos C, H e O e seu potencial energético. O comportamento da pirólise das huminas será investigado pelos perfis termogravimétricos em atmosfera inerte. Será proposto um modelo cinético de reações paralelas descrevendo a formação de frações de gás, óleo e sólido (residual) a partir dos dados experimentais contribuindo ao desenvolvimento tecnológico de biorrefinarias à base de carbono sendo uma alternativa para reduzir e eventualmente substituir produtos químicos à base de petróleo.

Start date: 12-01-2020

End date: 11-30-2021

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

VALORIZAÇÃO TERMOQUÍMICA DE HUMINAS INSOLÚVEIS DERIVADAS DA PLATAFORMA DE CONVERSÃO DE AÇÚCARES C5 E C6

Data Collection

What data will you collect or create?

Os dados coletados estão relacionados aos desafios:

- **Desafio 1**: Purificar as huminas obtidas da plataforma de conversão de açúcares C5 e C6 nos ***Cenários (i) – (iii)*** utilizando sistema de extração soxlhet combinado com lavagens em soluções aquosas e orgânicas. [Atividades: A.1.1; A.1.2 e A.1.3]
- **Desafio 2**: Determinar e avaliar a composição imediata e elementar, poder calorífico, estrutura molecular e morfológica das huminas obtidas durante a produção de AL e FUR a partir de bagaço de cana-de-açúcar segundo os ***Cenários (i) – (iii)***. [Atividades: A.2.1 e A.2.2]
- **Desafio 3**: Estudar os padrões de decomposição térmica das huminas a partir de análises termogravimétricas sobre uma corrente de gás inerte (N2). [Atividades: A.3.1 e A.32.2]
- **Desafio 4**: Propor um modelo cinético de reações paralelas descrevendo a formação de frações de gás, óleo e sólido (residual) a partir dos dados termogravimétricos experimentais obtidos no Desafio 3. [Atividades: A.4.1; A.4.2 e A.4.3]

Atividades	
Código	**Descrição**
A.1.1	Formação de huminas pelo Cenário iii: conversão de açúcares hemicelulósicos do bagaço de cana-de-açúcar catalisada com ácido.
A.1.2	Purificação das huminas por extração de Soxhlet com solventes a fim de remover os açúcares, a lignina e ácidos orgânicos residuais.
A.1.3	Cálculo do rendimento de huminas após purificação: gramas de material carbonáceo por 100 g de peso seco de sólido residual após biorrefino do bagaço de cana-de-açúcar.
A.2.1	Realizar análises sobre a estrutura molecular (caracterização imediata e caracterização elementar) e morfológica das huminas para revelar a natureza nos processos termoquímicos.
A.2.2	Determinação do potencial energético das huminas.
A.3.1	Obtenção e identificação dos padrões de degradação térmica das HUs a partir de análises termogravimétricas (atmosfera inerte).
A.3.2	Estimativas da conversão e a taxa de conversão termogravimétrica baseado nos dados experimentais da atividade A.3.1.
A.4.1	Determinar os parâmetros cinéticos da pirólise das huminas aplicando o método isoconversional diferencial de Friedman (Eq. 11).
A.4.2	Calcular a taxa de conversão teórica (Eq. 9) para o sistema de reações paralelas.
A.4.3	Estimar (Eq. 12) comparando as taxas de conversão teóricas e experimentais.

How will the data be collected or created?

Código	Descrição	Formas de obtenção dos dados
A.1.1	Formação de huminas pelo Cenário iii: conversão de açúcares hemicelulósicos do bagaço de cana-de-açúcar catalisada com ácido.	Experimentalmente / Laboratório LabCQV
A.1.2	Purificação das huminas por extração de Soxhlet com solventes a fim de remover os açúcares, a lignina e ácidos orgânicos residuais.	Experimentalmente / Laboratório LabCQV
A.1.3	Cálculo do rendimento de huminas após purificação: gramas de material carbonáceo por 100 g de peso seco de sólido residual após biorrefino do bagaço de cana-de-açúcar.	Cálculo / planilha de cálculo
A.2.1	Realizar análises sobre a estrutura molecular (caracterização imediata e caracterização elementar) e morfológica das huminas para revelar a natureza nos processos termoquímicos.	Equipamentos analíticos
A.2.2	Determinação do potencial energético das huminas.	Equipamentos analíticos
A.3.1	Obtenção e identificação dos padrões de degradação térmica das HUs a partir de análises termogravimétricas (atmosfera inerte).	Equipamentos analíticos
A.3.2	Estimativas da conversão e a taxa de conversão termogravimétrica baseado nos dados experimentais da atividade A.3.1.	Cálculo / planilha de cálculo
A.4.1	Determinar os parâmetros cinéticos da pirólise das huminas aplicando o método isoconversional diferencial de Friedman (Eq. 11).	Cálculo / planilha de cálculo
A.4.2	Calcular a taxa de conversão teórica (Eq. 9) para o sistema de reações paralelas.	Cálculo / planilha de cálculo
A.4.3	Estimar (Eq. 12) comparando as taxas de conversão teóricas e experimentais.	Cálculo / planilha de cálculo

Documentation and Metadata

What documentation and metadata will accompany the data?

Código	Descrição	Metadado
A.1.1	Formação de huminas pelo Cenário iii: conversão de açúcares hemicelulósicos do bagaço de cana-de-açúcar catalisada com ácido.	-
A.1.2	Purificação das huminas por extração de Soxhlet com solventes a fim de remover os açúcares, a lignina e ácidos orgânicos residuais.	Massa inicial, massa final, rendimento da purificação
A.1.3	Cálculo do rendimento de huminas após purificação: gramas de material carbonáceo por 100 g de peso seco de sólido residual após biorrefino do bagaço de cana-de-açúcar.	Concentração de ácido levulínico e rendimento de huminas
A.2.1	Realizar análises sobre a estrutura molecular (caracterização imediata e caracterização elementar) e morfológica das huminas para revelar a natureza nos processos termoquímicos.	Imagens MEV, dados FTIR, resultados da análise imediada (planilha de cálculo)
A.2.2	Determinação do potencial energético das huminas.	Valor do potencial calorífico
A.3.1	Obtenção e identificação dos padrões de degradação térmica das HUs a partir de análises termogravimétricas (atmosfera inerte).	Dados de TGA em planilha de cálculo e tratamento de dados
A.3.2	Estimativas da conversão e a taxa de conversão termogravimétrica baseado nos dados experimentais da atividade A.3.1.	Dados das planilhas de cálculo
A.4.1	Determinar os parâmetros cinéticos da pirólise das huminas aplicando o método isoconversional diferencial de Friedman (Eq. 11).	Dados das planilhas de cálculo
A.4.2	Calcular a taxa de conversão teórica (Eq. 9) para o sistema de reações paralelas.	Dados das planilhas de cálculo
A.4.3	Estimar (Eq. 12) comparando as taxas de conversão teóricas e experimentais.	Dados das planilhas de cálculo

Ethics and Legal Compliance

How will you manage any ethical issues?

Pelo registro no comitê de ética da UNIFESP (CEP N 2804210420)

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

Durante a etapa de execução do projeto os dados serão protegidos pelos pesquisadores envolvidos. No momento dos dados serem reportados em publicações, os mesmos ficarão sob as política de copyright das revistas.

Storage and Backup

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

Armazenamento: Repositório de Dados de Pesquisa UNIFESP Dataverse

Os metadados serão preservados de acordo com a política do repositório

Backup: (onedrive de Laura Plazas Tovar)

How will you manage access and security?

Armazenamento:

Os metadados serão preservados de acordo com a política do repositório

Backup: password

Selection and Preservation

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

Não aplica

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

5 anos

Data Sharing

How will you share the data?

Serão compartilhados através do Repositório de Dados de Pesquisa UNIFESP Dataverse

Are any restrictions on data sharing required?

Os dados s[o serão compartilhados com terceiros após a publicação dos artigos.

Responsibilities and Resources

Who will be responsible for data management?

Laura Plazas Tovar (laura.tovar@unifesp.br)

Marina Gontijo Souza Macedo (gontijo.marina@unifesp.br)

Julio César de Jesus Gariboti (julio.gariboti@unifesp.br)

What resources will you require to deliver your plan?

Nenhum recurso necessário para entregar o plano