

Plan Overview

A Data Management Plan created using DMPTool

Title: Comportamento de fases de complexos eletrostáticos em sistemas contendo polímeros e surfactantes na presença de sais inorgânicos

Creator: Marcos Vinícius Aquino Queirós

Affiliation: State University of Campinas (unicamp.br)

Project Administrator: Watson Loh

Funder: São Paulo Research Foundation (fapesp.br)

Funding opportunity number: 2018/09099-3

Template: Digital Curation Centre (português)

Project abstract:

Este projeto propõe-se a preparar complexos de polímero (poli(acrilato)) e surfactante (dodeciltrimetilamônio) e polímero-polímero, (poli(acrilato)) e poli(dialildimetilamônio), e estudar o comportamento de fases desses complexos na presença de sais inorgânicos. Foi constatado que o sal induz duas importantes regiões de separação de fases. Em baixas concentrações de sal, ocorre a separação de fases associativa, mencionada anteriormente, e em altas concentrações de sal ocorre a separação de fases segregativa. Esta é caracterizada pela presença das espécies coloidais em fases distintas. Ao longo do trabalho, fizemos diversas caracterizações das fases, mostrando como os agregados de surfactante se comportam e também caracterizamos as fases segregadas nos sistemas contendo apenas polímeros em termos de sua composição química.

A fim de entender mais sobre as interações de polieletrólitos em meio salino, simulações computacionais foram feitas através do método de Monte Carlo. Aplicou-se o modelo do potencial coulômbico blindado, onde a presença do sal é parametrizada pelo comprimento de blindagem. Foi possível observar tanto os fenômenos de associação quanto de segregação, sendo

que este último não havia sido reportado na literatura para sistemas onde foi aplicado esse mesmo modelo.

Também investigamos experimentalmente como diferentes grupos presentes nos políons podem influenciar a força dos complexos. Verificamos que quando um políon é adicionado a uma mistura contendo outros dois políons de carga oposta, existe uma preferência de associação, dependendo do grupo. Mostramos que o grupo sulfonato tem maior preferência do que o carboxilato e que o grupo amônio quaternário tem maior preferência à amina primária. Além disso, quando se misturam quantidades de políon(s) e poliânion(s) suficientes para que todos se associem, os diferentes grupos desses polímeros tendem a formar complexos multifásicos.

Start date: 03-01-2018

End date: 02-28-2022

Last modified: 01-28-2022

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

Comportamento de fases de complexos eletrostáticos em sistemas contendo polímeros e surfactantes na presença de sais inorgânicos

Coleta de Dados

Que dados serão coletados ou criados?

Arquivos nos formatos .itc, .dat., .txt, .spc, .wrl, .jpg, .png, .xls, .xlsx e .opj.

Como os dados serão coletados ou criados?

- .itc – dados brutos resultantes de análises de titulação calorimétrica isotérmica (ITC). Os dados trazem a variação de potência aplicada na célula de amostra em função do tempo, e também os valores de DH em função da concentração do injetante.
- .dat – dados brutos gerados por medidas de espalhamento de raios-X em baixo ângulo (SAXS).
- .txt – dados brutos gerados a partir de titulações potenciométricas e das simulações computacionais usando o método de Monte Carlo.
- .spc – dados brutos gerados a partir de medidas de espectroscopia de absorção no infravermelho com transformada de Fourier (FTIR);
- .wrl – dados brutos referentes às simulações computacionais usando o método de Monte Carlo.
- .jpg – imagens obtidas a partir de fotos das amostras.
- .png – imagens obtidas a partir do processamento de arquivos .wrl.
- .xls – dados brutos obtidos a partir de análises termogravimétricas.
- .xlsx – planilhas criadas para armazenamento, planejamento e processamento de dados
- .opj – gráficos e figuras gerados a partir de arquivos .itc, .dat, .spc e .txt.

Documentação e Metadados

Que documentação e metadados acompanharão os dados?

Todos os dados são gerados em arquivos que são posteriormente convertidos no formatos .docx e .pdf.

Ética e Conformidade Legal

Como você administrará qualquer questão ética?

De acordo com as normas estabelecidas pela Unicamp.

Como você vai gerenciar os direitos autorais e os direitos de propriedade intelectual (IP / IPR)?

De acordo com as normas estabelecidas pela Unicamp.

Armazenamento e Backup

Como os dados serão armazenados e terão backup durante a pesquisa?

Os dados foram coletados e armazenados pelo bolsista. O mesmo também foi responsável pelo tratamento dos dados resultando na geração gráficos, figuras, tabelas e outros arquivos. A realização do trabalho foi feita com acompanhamento do pesquisador responsável. Os arquivos coletados e gerados pelo bolsista foram armazenados em nuvem (OneDrive) e HD externo, o qual pode ser acessado pelo pesquisador e outras pessoas autorizadas. O caderno de laboratório, por sua vez, sempre fica no laboratório, estando disponível em caso ao de uma futura auditoria.

Como você vai gerenciar o acesso e a segurança?

Os dados disponíveis no HD externo só podem ser acessados pelo pesquisador responsável ou por pessoas com autorização direta do pesquisador.

Seleção e Preservação

Quais dados são de valor a longo prazo e devem ser mantidos, compartilhados e / ou preservados?

Todos dados serão compartilhados a longo prazo por meio de publicações em artigos científicos e na tese.

Qual é o plano de preservação a longo prazo do conjunto de dados?

Armazenamento em nuvem (OneDrive) e HD externo.

Compartilhamento de Dados

Como você vai compartilhar os dados?

Através de publicações em artigos científicos e na tese.

Existem restrições ao compartilhamento de dados requeridos?

Sim. Os dados só podem ser compartilhados depois que forem publicados.

Responsabilidades e Recursos

Quem será responsável pelo gerenciamento de dados?

O bolsista juntamente com o pesquisador responsável.

Quais recursos você precisará para entregar seu plano?

Os recursos para o desenvolvimento do projeto foram financiados pela FAPESP.
