

## Plan Overview

---

*A Data Management Plan created using DMPTool*

**DMP ID:** <https://doi.org/10.48321/D1103D>

**Title:** Funcionalização da superfície de catalisadores zeolíticos para eliminação do uso de solventes e aumento de estabilidade em reações em fase líquida

**Creator:** Iara De lacerda pataca - **ORCID:** [0000-0003-4965-9650](https://orcid.org/0000-0003-4965-9650)

**Affiliation:** São Paulo State University (unesp.br)

**Funder:** São Paulo Research Foundation (fapesp.br)

**Template:** Digital Curation Centre (português)

### Project abstract:

No contexto atual, em que se buscam alternativas para combater, ou pelo menos refrear o desequilíbrio ambiental, a química sintética está sujeita a uma grande demanda de técnicas que substituam a utilização de catalisadores homogêneos e principalmente solventes orgânicos. Visando suprir essas necessidades, a utilização de catalisadores heterogêneos ácidos vem tendo cada vez mais relevância em processos químicos, tais como no craqueamento e refinamento de petróleo. Mesmo apresentando grande potencial, catalisadores heterogêneos básicos ainda não têm tantas aplicações como os ácidos, por esse motivo, esse projeto propõe o desenvolvimento de catalisadores básicos para avaliação de sua atividade catalítica na reação de condensação de Knoevenagel. Essa reação é muito utilizada para a produção de intermediários químicos durante a produção de cosméticos, e normalmente se processa com a utilização de solventes orgânicos a altas temperaturas para melhorar o rendimento da reação. Dessa forma, planejamos produzir zeólitas de estrutura faujasita (FAU), funcionalizadas com organosilanos para aumentar a hidrofobicidade da estrutura e aproximar as fases líquidas reativas do sítio ativo, eliminando a utilização de solventes. A partir disso, pretendemos analisar também a estabilidade da zeólita funcionalizada em altas temperaturas, pois em condições normais, zeólitas do tipo FAU apresentam degradação de sua estrutura e decréscimo da atividade catalítica quando em contato com

solventes

quentes, efeito esse, que pode ser atenuado com o aumento da hidrofobicidade resultante da funcionalização.

**Start date:** 03-01-2022

**End date:** 11-30-2022

**Last modified:** 11-27-2022

**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

---

# Funcionalização da superfície de catalisadores zeolíticos para eliminação do uso de solventes e aumento de estabilidade em reações em fase líquida

## Coleta de Dados

---

### Que dados serão coletados ou criados?

Dados de parâmetros após alterações químicas em zeólitas faujasitas (FAU) comerciais e testes catalíticos com as mesmas:

- Volumes de soluções para trocas iônicas de Na<sup>+</sup> por NH<sub>4</sub><sup>+</sup>;
- Eficiência de funcionalização com organosilanos C8 e C12;
- Conversões em reações de Knoevenagel a partir de áreas em CG;
- Basicidade, estrutura e estabilidade térmica da FAU;
- Cálculos para análises;

Amostras de catalisadores zeolíticos.

### Como os dados serão coletados ou criados?

Através de análises de caracterização como:

- TGA
- XPS
- DRX
- Ângulo de contato
- CHN(O)S

Picos fornecidos pelo equipamento de cromatografia gasosa para coleta de conversões na reação de Knoevenagel.

Coletados e criados via softwares como: Origin, Excel, Word e Power Point.

## Documentação e Metadados

---

### Que documentação e metadados acompanharão os dados?

Metadados - título do arquivo, orcid do pesquisador, resumo do conteúdo do arquivo, data de coleta, palavras-chave, agencias financiadoras e números dos projetos (se houver).

Metadados - Dublin core.

## Ética e Conformidade Legal

---

### Como você administrará qualquer questão ética?

Dados serão disponibilizados após revisão para lidar com quaisquer perdas e alterações, sempre mantendo sua integridade e transparência.

Acesso aos dados é público e autorizado, sem necessidade de licenças.

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

Acesso aos dados é livre, mas devem ser citados de acordo com licença CC-BY.

IP/IPR de qualquer dado do projeto pertencem ao autor (Iara de Lacerda Pataca) e orientador (Leandro Martins).

## Armazenamento e Backup

---

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

Dados serão armazenados via planilhas do EXCEL no computador do autor do projeto e compartilhados via Google Drive, com uma conta do proprietário e orientador do projeto.

Os dados serão preservados/armazenados por um período de 10 anos após final do projeto.

As amostras produzidas serão armazenadas no laboratório de pesquisa, localizado no Instituto de Química da Unesp de Araraquara, com acesso restrito aos membros do grupo de pesquisa GPCat.

### Como você vai gerenciar o acesso e a segurança?

**Segurança:** As amostras produzidas serão armazenadas de forma segura no laboratório do grupo de pesquisa, seguindo as normas NBR 14725 de armazenagem e segurança de produtos químicos. Seu acesso é apenas para pessoas autorizadas do laboratório.

**Acesso:** Para os dados armazenados em computador, seu acesso é restrito a membros do Google Drive do projeto e protegido via senha do computador onde os dados foram criados. Dados podem ser compartilhado com terceiros após autorização do orientador ou autor do projeto e citação com licença CC-BY.

## Seleção e Preservação

---

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

Todos os dados são de igual valor a longo prazo.

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

Dados serão preservados em Google Drive por dez anos após a finalização do projeto, ou possíveis publicações futuras. Não há necessidade de utilização de nenhum recurso adicional para preservação.

## Compartilhamento de Dados

---

**Como você vai compartilhar os dados?**

Todos os dados são liberados para utilização de terceiros sob licença CC-BY e estarão disponíveis após término do projeto (11/2022).

**Existem restrições ao compartilhamento de dados requeridos?**

Nenhuma restrição quanto ao compartilhamento de dados.

## Responsabilidades e Recursos

---

**Quem será responsável pelo gerenciamento de dados?**

O gerenciamento de dados é responsabilidade do autor do projeto (Iara de Lacerda Pataca) e do orientador (Leandro Martins).

**Quais recursos você precisará para entregar seu plano?**

Não será necessário o emprego de nenhum recurso extra para entrega do plano.

---