Plan Overview

A Data Management Plan created using DMP Tool

Title: Dependência da temperatura no band gap de perovskitas híbridas: um estudo de primeiros princípios

Creator: Alexandre Rocha

Affiliation: São Paulo State University (unesp.br)

Principal Investigator: Alexandre Reily Rocha, Enesio Marinho da Silva Jr

Data Manager: Enesio Marinho da Silva Jr

Funder: São Paulo Research Foundation (fapesp.br)

Funding opportunity number: 59386

Template: Digital Curation Centre

Project abstract:

Células solares baseadas em perovskitas (PSC) de haletos organometálicos híbridos são atualmente as tecnologias mais promissoras para fotovoltáicos, principalmente devido ao crescimento sem precedentes na eficiência de conversão energética. Estes materiais apresentam excelente absorção da luz, boa mobilidade e tempo de vida dos portadores de carga. Entretanto, a produção em escala industrial destas PSC encontra limitações importantes, como a instabilidade das perovskitas em contato com a umidade ambiente e altas temperaturas. O presente projeto de pós-doutorado busca estudar a dependência da temperatura nas propriedades eletrônicas e ópticas das principais perovskitas híbridas aplicadas na fabricação das PSCs. As análises serão realizadas por cálculos ab initio baseados na DFT, e na teoria da perturação em problemas de muitos corpo (MBPT). Propriedades como acoplamento elétron-fônon, efeitos excitônicos, e acoplamento spin-órbita serão analisados para a compreensão de resultados experimentais que sugerem um crescimento monotônico do band gap com o aumento da temperatura, fenômeno anômalo ao verificado em semicondutores tradicionais. Os resultados obtidos serão de grande relevância à comunidade científica, podendo contribuir para o avanço no desenvolvimento de fotovoltaicos baseados em perovskitas híbridas tanto do ponto de vista fundamental quanto aplicado auxiliando grupos experimentais com informações quantitativas.

Start date: 01-01-2021

End date: 12-31-2023

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

Dependência da temperatura no band gap de perovskitas híbridas: um estudo de primeiros princípios

Data Collection

What data will you collect or create?

O projeto proposto é teórico-computacional. Serão produzidos os seguintes dados:

1. Arquivos de estruturas cristalinas dos diferentes materiais (formato .cif, .xyz, .vasp) que podem ser utilizados tanto para visualização, quanto para a realização dos cálculos propriamente ditos
2. Arquivos de *input* dos códigos utilizados (Quantum ESPRESSO, Yambo, entre outros). A partir dos arquivos de output os resultados obtidos no projeto são 100% reprodutíveis. Os códigos utilizados são de domínio público e são gratuitos (*freeware*) para a comunidade acadêmica.
3. Arquivos de output que incluem informações sobre auto-estados e auto-valores de Kohn-Sham de diferentes materiais, bem como informações sobre distribuição eletrônica e dos modos de vibração. Os arquivos são do tipo texto (human readable) e binários (que podem ser processados utilizando ferramentas utilitárias dos códigos utilizados e que também são distribuídos de forma gratuita).
4. Os resultados serão descritos em figuras, gráficos, planilhas e/ou arquivos de texto.
5. Serão gerados scripts (shell ou python).
6. Os manuscritos de artigos para publicação dos resultados serão escritos em LaTeX (formato .tex) ou em word (.doc).

How will the data be collected or created?

Conforme descrito acima, os dados serão gerados a partir de informações sobre estruturas cristalinas de materiais e utilizando códigos freeware de cálculos de primeiros princípios.

Documentation and Metadata

What documentation and metadata will accompany the data?

Será criado um banco de dados *searchable* contendo os diferentes parâmetros utilizados no cálculos que permitirá realizar buscas por material, tipo de estrutura (simetria), temperatura, e diferentes parâmetros de convergência dos cálculos.

Ethics and Legal Compliance

How will you manage any ethical issues?

Como o trabalho é teórico e não envolve organismos vivos, não há questões éticas associadas.

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

Não há previsão para que dados produzidos neste projeto tenham restrições para compartilhamento dos dados produzidos. Em particular, não se prevê questões associadas à propriedade intelectual

Storage and Backup

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

1. Todos os dados produzidos serão armazenados nos clusters de computadores do grupo e também na nuvem.
2. Os dados serão preservados por um período que levará em consideração o espaço de armazenamento. Em particular, arquivos de entrada e arquivos de saída em formato texto serão armazenados indefinidamente, de modo que os cálculos possam ser recuperados por outros usuários em qualquer momento. Arquivos binários, que tipicamente, necessitam de grande espaço de armazenamento serão mantidos por um período de 5 anos, e podem ser novamente obtidos a partir dos dados de entrada.
3. Os dados produzidos e efetivamente utilizados na produção dos artigos serão compartilhados após aceitação da publicação associada, e serão preservados e disponibilizados por tempo indeterminado nas plataformas descritas abaixo.

How will you manage access and security?

Os dados armazenados no drive compartilhado (do Google Drive) só podem ser acessados por pesquisadores com quem eles foram compartilhados explicitamente. Além disso, dada a estrutura desta parte do sistema, apenas usuários com um e-amil @unesp.br tem acesso ao drive para edição.

Selection and Preservation

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

O armazenamento de longo prazo dos dados produzidos será realizado em um drive compartilhado no Google (a Unesp dispõe de Shared Drives no Google Acadêmico). O Drive permite acesso a todos os membros do grupo TransSim do IFT-UNESP.

Os arquivos associados às publicações (gráficos e texto) serão armazenados na nuvem no site Overleaf (www.overleaf.com) que permite a escrita de textos em LaTeX de forma colaborativa.

Os dados brutos utilizados especificamente em cada publicação serão depositados em um repositório do grupo no github (https://github.com/reilya/TransSimPapers) bem como arquivos de *input* e *output* e *scripts* utilizados no processamento dos dados. No github é possível disponibilizar os dados de maneira pública para que possam ser acessados por todos que tenham interesse.

Os dados disponibilizados aos membros do grupo e/ou a terceiros serão suficientes para reproduzir todos os dados resultados obtidos no projeto.

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

Conforme descrito acima, arquivos de entrada e saída, que permitem a reprodutibilidade dos resultados serão armazenados de maneira indefinida, uma vez que ocupam espaço relativamente pequeno.

Data Sharing

How will you share the data?

Os dados brutos utilizados especificamente em cada publicação serão depositados em um repositório do grupo no github (https://github.com/reilya/TransSimPapers) bem como arquivos de *input* e *output* e *scripts* utilizados no processamento dos dados. No github é possível disponibilizar os dados de maneira pública para que possam ser acessados por todos que tenham interesse.

Are any restrictions on data sharing required?

Não há restrições no compartilhamento dos dados.

Responsibilities and Resources

Who will be responsible for data management?

O pós-doutorando que receberá a bolsa será responsável pelos dados gerados, sua manutenção e armazenamento.

What resources will you require to deliver your plan?

Todos os requisitos para que o plano seja corretamente executados já estão disponíveis por meio de ferramentas gratuítas ou fornecidas pela própria Unesp.