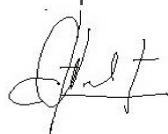




Plan de Gestión de Datos

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO	
1. – Datos del Proyecto	
- Título del Proyecto (en castellano)	
Modelado de materiales moleculares magnéticos y de perovskitas híbridas para celdas solares mediante métodos de primeros principios 50620190100068LI	
- Título del Proyecto (en inglés)	
First-principles study of magnetic molecular materials and hybrid perovskites for solar cells	
- Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen	
<p>El proyecto tiene como objetivo aportar información original que contribuya el entendimiento a nivel microscópico de materiales de interés tecnológico como (A) materiales moleculares magnéticos y (B) perovskitas híbridas orgánica – inorgánicas, mediante cálculos computacionales basados en métodos de primeros principios y de campos de fuerza clásico.</p> <p>(A) Nos interesan entender los mecanismos cuánticos que determinan los caminos de intercambio magnético y su relación con la deslocalización electrónica, cambios estructurales debidos a temperatura, presión o por aplicación de campo eléctrico en complejos metalo-orgánicos (M = Cu y Co) mediado por moléculas como H₂O y COO⁻, y en metales como Fe y Co adsorbidos o en forma sustitucional sobre superficies de materiales a base de carbono como penta-grafeno o en su variantes 3D como T6-carbono o T12-carbono, y en grafeno.</p> <p>(B) Se busca esclarecer el efecto de la mezcla de cationes orgánicos metilamina (CH₃NH₃⁺=MA⁺) y formamidina (CH(NH₂)₂⁺ = FA⁺) en la aleación binaria MA_{1-x}FA_xPbI₃ con estructura de perovskita, a través de la determinación de las distorsiones estructurales, y su efecto sobre las propiedades electrónicas (gap de energía) y ópticas (borde de absorción, constante dieléctrica, índice de refracción) mediante cálculos de primeros principios.</p> <p>Otro objetivo es investigar desde un punto de vista microscópico la migración de defectos puntuales como vacancias e intersticios en MA_{1-x}FA_xPbI₃ para sugerir vías que puedan disminuirla o bloquearla. Se propone modelar en bulk y en nanoestructuras en función de la temperatura y de campos eléctricos, mediante el uso de potenciales interatómicos en simulaciones de Dinámica Molecular clásica. La investigación teórica propuesta además de su interés básico, tiene la motivación adicional de complementar la caracterización experimental que se está realizando en los laboratorios del IFIS-Litoral dentro del Proyecto Institucional.</p>	
- Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen	
<p>The project aims to provide original information that contributes to the understanding at a microscopic level of materials of technological interest such as (A) magnetic molecular materials and (B) hybrid organic-inorganic perovskites, through computational calculations based on first-principles methods and classical force fields.</p> <p>(A) We are interested in understanding the quantum mechanisms that determine the paths of magnetic exchange and their relationship with electronic delocalization, structural changes due to temperature, pressure or by application of an electric field in</p>	



metal-organic complexes (M = Cu and Co) mediated by molecules like H₂O and COO⁻ and in metals like Fe and Co adsorbed or in a substitutional form on surfaces of carbon-based materials such as penta-graphene or its 3D variants such as T6-carbon or T12-carbon, and graphene.

(B) The aim is to clarify the effect of the mixture of the organic cations: methylammonium (CH₃NH₃⁺ = MA⁺) and formamidinium (CH(NH₂)₂⁺ = FA⁺) in the binary alloy MA_{1-x}FA_xPbI₃ with perovskite structure, by determining the structural distortions, and their effect on the electronic (band gap energy) and optical (absorption edge, dielectric constant, refractive index) properties using first-principles calculations. Another objective is to investigate from a microscopic point of view the migration of point defects such as vacancies and interstices in MA_{1-x}FA_xPbI₃ to find ways to decrease or block it. We propose to model the ionic diffusion in bulk and also in nanostructures as a function of temperature and electric field, by using interatomic potentials through classical Molecular Dynamics simulations. This theoretical project besides its basic interest has the additional motivation of complementing the experimental characterization which is being carried out at the IFIS-Litoral laboratories as part of the Institutional Project.

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano)

Materiales bidimensionales	Moléculas magnéticas	Perovskitas híbridas
----------------------------	----------------------	----------------------

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés)

2D materials	Molecular magnets	Hybrid perovskites
--------------	-------------------	--------------------

2 – Datos del Director/ar del Proyecto

- Nombre y Apellido

Sergio Daniel DALOSTO

- Unidad Académica

Instituto de Física del Litoral – UNL – CONICET

- Teléfono oficial de contacto

+ 54 342 4559174 int 2194

-Teléfono móvil de contacto

+ 54 9 342 5415577

-E-mail del Director/a del Proyecto

sergio.dalosto@santafe-conicet.gov.ar

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describe la toma de muestras / datos a realizar

Los sistemas propuestos de estudio se modelan a nivel atómico usando programas computacionales, algunos de acceso libre (SIESTA, QE, NAMD, DL-Poly y LAMMPS) y dos (Gaussian-g09 y VASP) con licencias pagas adquiridas por el grupo responsable. Los programas se ejecutan en forma remota en clusters de computadoras de alto rendimiento a los que el grupo de trabajo tiene acceso como son el cluster Pirayú (<https://cimec.org.ar/c3/pirayu/equipos.php>) y otro propio del grupo responsable, ambos ubicados en el Parque Tecnológico. La preparación de archivos de entrada, pruebas, y análisis de resultados se realizan principalmente en las PCs que los integrantes del grupo tienen en sus respectivos lugares de trabajo. El cluster Pirayú cuenta con 35 nodos con 720 cores interconectados con infiniband



de FDR 56 Gbps. El cluster propio del GR tiene 5 nodos con 72 cores.

<p>– Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? (marque X)</p>	
X	NO
<p>SI. Elija una de las opciones:</p>	
	<p>a) Se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes</p> <p>b) No se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible</p> <p>c) Existe un contrato con un tercero que impide la divulgación</p> <p>d) Otro. Justifique.</p>
<p>– Período de Confidencialidad: Es el período durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El período máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público.</p> <p>Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con "X".</p>	
	1 (UN) año
	2 (DOS) años
	3 (TRES) años
	4 (CUATRO) año
	5 (CINCO) años
	Otro.
	Motivos:



INSTRUCTIVO PARA COMPLETAR EL PLAN DE GESTIÓN (PGD)

El PGD no es un documento definitivo, sino que se desarrollará a lo largo del ciclo de vida del proyecto.

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

1 – Datos del Proyecto

Título del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar el título completo del proyecto (en castellano), indicando además el código asignado por la SCAyT.

Título del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar el título completo del proyecto en inglés.

Descripción del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar la descripción del Proyecto en castellano.

Descripción del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar la descripción del Proyecto en inglés.

Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano): Deberá ingresar tres palabras claves descriptivas del Proyecto, en castellano.

Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar tres palabras claves descriptivas del Proyecto, en inglés.

2- Datos del Director/a del Proyecto

Nombre y Apellido del Titular del Proyecto: Nombre completo y apellido del Titular del Proyecto.

Unidad Académica: Nombre de la Unidad Académica a la que pertenece el/la directora/a del Proyecto.

Teléfono oficial de contacto: Número de teléfono de la oficina/laboratorio/Institución del Director/a del Proyecto, donde pueda ser contactado, incluyendo número de área/país (ej: Para Santa Fe: + 54 9 342 4999-9999).

Teléfono móvil de contacto: Número de teléfono móvil del director/ar del Proyecto, donde pueda ser contactado, incluyendo número de área/país.

E-mail del Director/a del Proyecto: Correo electrónico de contacto del Director/a del Proyecto.

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO



Describa la toma de muestras/datos a realizar: Información descriptiva sobre la toma de muestras que resultarán en datos/conjuntos de datos. La descripción deberá incluir información de contexto (lugar de toma de los datos; instrumentos, etc.)

Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? Deberá marcar con una “X” la opción correcta. En caso de responder afirmativamente, deberá justificar debidamente, comprendiendo que sólo en casos de extrema excepcionalidad esta restricción de acceso a los datos resulta practicable/aceptable.

Período de Confidencialidad: Es el periodo durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El periodo máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público.

Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios.

Deberá indicar los años que considera necesario prorrogar el período de confidencialidad y explicar los motivos.