

**Научно-учебная группа
24-00-007**

Атомистическое моделирование динамики
фотовозбуждённых состояний
в новых материалах для солнечной энергетики

Пашковская Валерия Дмитриевна

Общая информация о проекте

Цель исследования: Динамика фотовозбужденных состояний в материалах для солнечной энергетики, исследование проводила Валерия Дмитриевна Пашковская.

Цели проекта

Задачи

- 1) Организационная деятельность по проекту НУГ.
- 2) Ведение сайта НУГ.
- 3) Подготовка презентаций докладов на семинарах.
- 4) Обработка данных компьютерных вычислений и их визуализация.

Фокус исследования

Атомистическое моделирование структуры CsPbBr₃: Исследование характеристик перовскита CsPbBr₃ для солнечной энергетики. CsPbBr₃ изучается для понимания фотодинамики и движения атомов, особенно в условиях фотовозбуждения.

Используемые инструменты визуализации

OVITO: Используется для визуализации атомных структур, что позволяет эффективно анализировать положение и движение атомов в модели.

Origin Pro: Применяется для визуализации данных и анализа графиков, особенно для больших массивов данных, где требуется точная аппроксимация и создание наглядных графиков.

Основные результаты вычислений

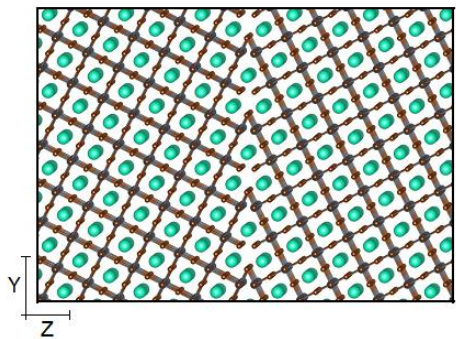
Среднеквадратичное смещение (MSD): Были рассчитаны значения MSD, что позволило выявить закономерности движения атомов Br, Cs, и Pb.

Проблемы с объемом данных: Origin Pro помог преодолеть ограничения других программ при обработке 10000 точек на графике для каждой кривой. Это обеспечило высокую точность обработки и визуализации данных.

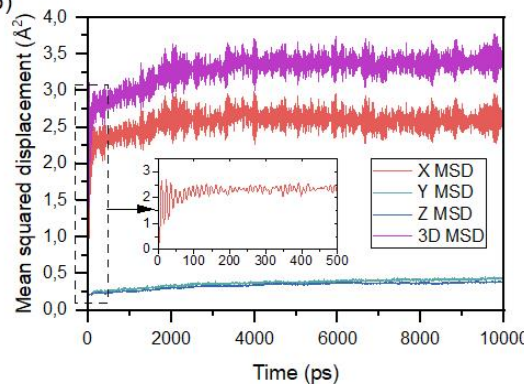
Анализ данных

Линейная корреляция MSD: Выявленная линейная зависимость MSD указывает на постоянную миграцию атомов Br и фиксированное положение атомов Cs и Pb, что важно для понимания стабильности структуры.

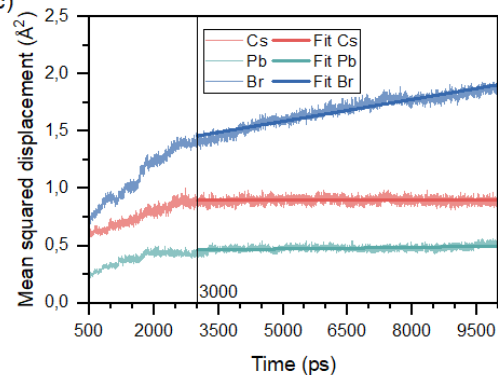
(a)



(b)



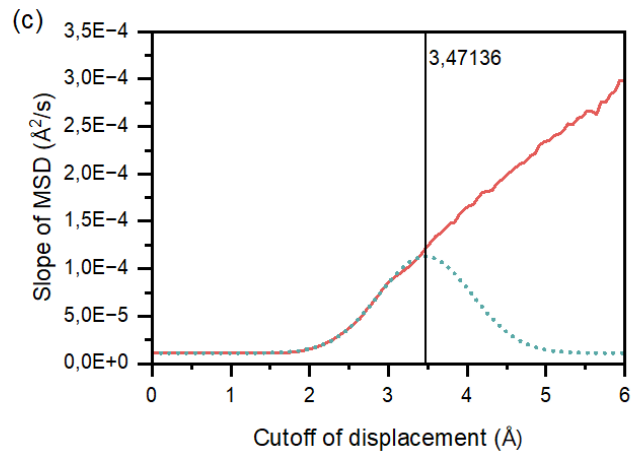
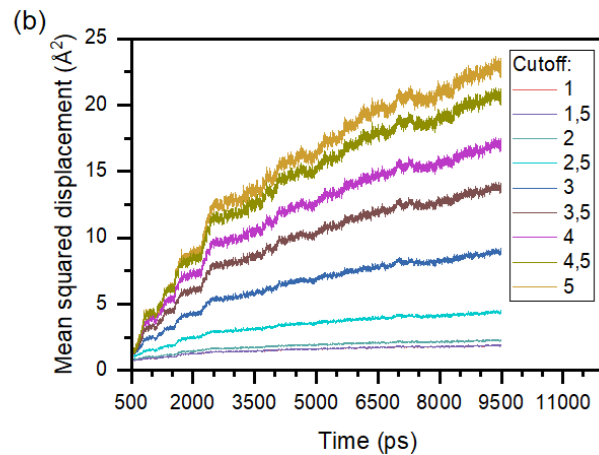
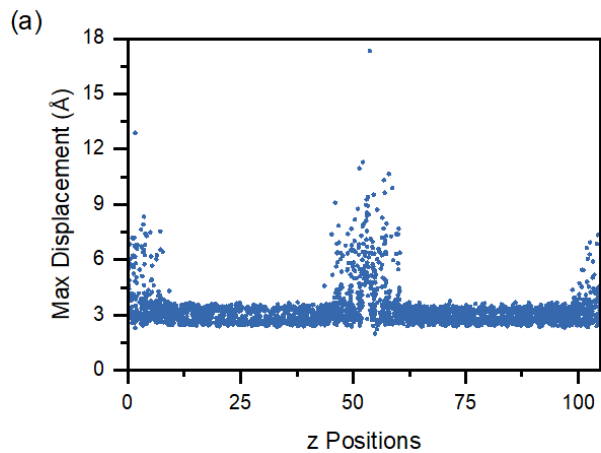
(c)



Продвинутая визуализация данных

Слои данных в Origin Pro: Возможность комбинировать слои данных улучшает восприятие графиков, особенно при большом объеме информации.

Аппроксимация функцией Гаусса: Дает возможность различать неподвижные и подвижные атомы, что позволяет более детально анализировать динамическое поведение системы.



Конкретные анализы

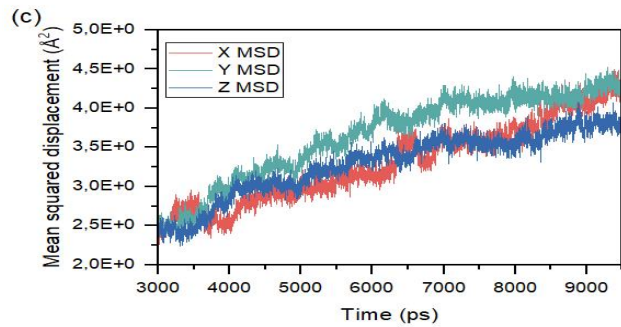
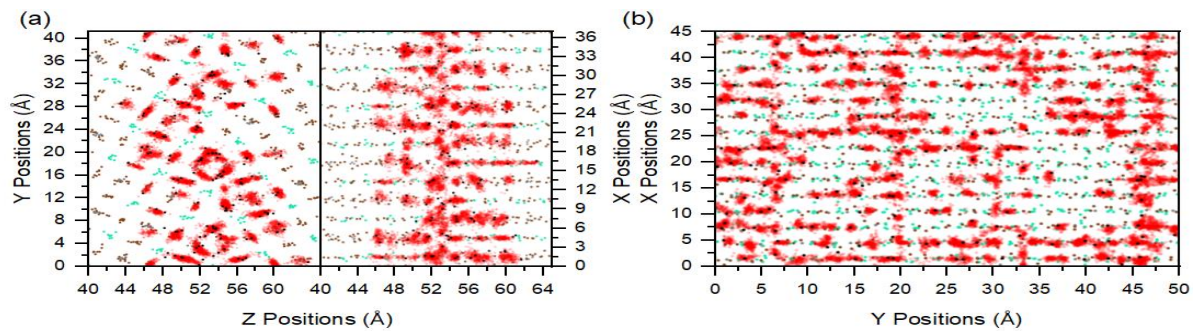
Вычисление наклона MSD: Это помогает оценить скорость миграции атомов Br при различных параметрах.

Распределение смещения атомов Br: Анализ распределения смещений атомов по оси Z позволяет лучше понять структуру и её стабильность.

Обработка данных симуляции

Конвертация данных в .xyz формат: Подготовка данных для последующих вычислений с помощью Python для более глубокого анализа.

Визуализация положения атомов: Наблюдение за изменениями в положении атомов с течением времени помогает выявить динамические процессы в модели CsPbBr₃.



Трудности и решения

Обработка больших объемов данных: При обработке массивных данных были использованы мощные инструменты визуализации для повышения точности и минимизации ошибок.

Пользовательские функции в Origin Pro: Реализация специальных функций позволила добиться точных расчетов и визуализаций, включая аппроксимацию данных с помощью функций, подходящих для сложных систем.

Заключение

Итоги работы: Завершена обработка и визуализация данных расчетов, что позволило получить более глубокое понимание динамики атомов.

Дальнейшие исследования: Планируется продолжение работы по улучшению методов визуализации и анализа, а также исследования других материалов для солнечной энергетики.