

РАЗВИТИЕ ИТ-ПОДДЕРЖКИ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Дроздов В.А.¹, Филанович А.Н.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: drovadim@mail.ru

DEVELOPMENT OF IT SUPPORT FOR NUMERICAL INVESTIGATION OF THE PROPERTIES OF THERMOELECTRIC MATERIALS

Droz dov V.A.¹, Filanovich A.N.¹

¹) Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

The need to study the properties of thermoelectric materials is due to the prospects for the development of this industry. This requires appropriate programs that can interact with each other.

Термоэлектрические материалы – это вещества, которые могут преобразовывать тепловую энергию в электрическую и наоборот. Они используются в различных устройствах, таких как термоэлектрические генераторы, термоэлектрические охладители и термопары. Среди термоэлектрических материалов можно выделить множество соединений, включая полупроводники, металлы и некоторые керамические материалы.

Перспективы развития отрасли показывают важность исследований свойств термоэлектрических материалов. Для этого требуется производить первопринципные (ab initio) расчеты электронной структуры и моделирование материалов, на основе которых возможно рассчитывать такие важные для термоэлектрических материалов свойства, как теплопроводность или термоэдс (коэффициент Зеебека).

Для первопринципных расчетов предпочтительно использование программы Quantum ESPRESSO, так как при прочих равных характеристиках среди аналогичных программ она распространяется на бесплатной основе, а также имеет открытый исходный код [1].

Для расчета теплопроводности и других важных свойств термоэлектрических материалов на основе первопринципных расчетов лучше всего использовать программу AICON 2 [2], так как только она имеет возможность такого важного свойства, как коэффициент Зеебека. Данная программа работает быстро, надежна и особенно подходит для высокопроизводительного скрининга термоэлектрических материалов, но она не функционирует на основе данных, рассчитанных в Quantum ESPRESSO.

В данной работе рассматривается круг задач, связанный с адаптацией работы программы AICON 2 на основе данных, рассчитанных в Quantum ESPRESSO.

Была подготовлена версия модуля EMC, входящего в состав AICON 2, в которой описанная ранее проблема была решена путем написания соответствующего метода, позволяющего считывать данные выходных файлов программы Quantum ESPRESSO, а также преобразования кода библиотеки rumatgen. Обновленная версия модуля EMC, как и исходная, реализована на языке программирования Python.

1. Quantum ESPRESSO [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://quantum-espresso.org>.
2. AICON2 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://uspeh-team.org/static/file/Fan2021.pdf>.