

Фононный ангармонизм и решеточная теплопроводность удвоенных полугейслеровых сплавов $\text{Hf}_2\text{FeNiSb}_2$ и $\text{Ti}_2\text{FeNiSb}_2$: исследование с использованием теории функционала плотности и машинного обучения

Филанович А.Н.^{1,2,*}, Лукоянов А.В.^{1,2} и Повзнер А.А.¹

¹ Уральский федеральный университет, просп. Ленина, 51, Екатеринбург, 620000, Россия

² Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук, Софья Ковалевская ул. 18, Екатеринбург, 620219, Россия

* a.n.filanovich@urfu.ru

Удвоенные полугейслеровы сплавы представляют собой новый класс материалов с низкой решеточной теплопроводностью, перспективных для термоэлектрических применений [1, 2]. В данной работе фононные спектры, параметры Грюнайзена и решеточная теплопроводность удвоенных полугейслеровых сплавов $\text{Hf}_2\text{FeNiSb}_2$ и $\text{Ti}_2\text{FeNiSb}_2$ исследуются с использованием *ab initio* методов и недавно разработанного универсального потенциала межатомного взаимодействия [3] MACE. Мы сравниваем результаты, полученные различными методами расчета решеточной теплопроводности, включая решение линейаризованного транспортного уравнения Больцмана, метод Дебая–Каллауэя и формулу Слэка. Результаты получены в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации для ИФМ УрО РАН и контракта FEUZ-2026-0013.

[1] Anand S *et al.* 2019 *Joule* **3** 1226–1238

[2] Filanovich A N, Povzner A A and Lukoyanov A V 2023 *Mater. Chem. Phys.* **306** 128030

[3] Wines D and Choudhary K 2025 *ACS Materials Lett.* **7** 2105–2114