La prestigiosa revista "Chemistry of materials" publica en portada los resultados de un trabajo científico de investigadores de la Universidad de Sevilla obtenidos con la infraestructura de supercomputación de CénitS

- Thu, 31/03/2022



Investigadores del grupo de Química teórica de la Universidad de Sevilla han publicado un artículo científico titulado "*Charting the Lattice Thermal Conductivities of I–III–VI2 Chalcopyrite Semiconductors*", que protagoniza la portada del último número de la revista internacional Chemistry of Materials, la más importante de la American Chemical Society en el área de la Química y propiedades de materiales, con factor de impacto 9,811. El trabajo, que analiza las propiedades termodinámicas de una veintena de materiales de la familia de las calcopiritas, ha sido desarrollado haciendo uso de los recursos computacionales de LUSITANIA II.

Los materiales termoeléctricos permiten convertir directamente el calor en energía eléctrica. Por ello, su diseño es clave para obtener un uso energético más eficiente. En su trabajo, los autores calculan y analizan de forma detallada las propiedades termoeléctricas de veinte materiales, evaluando teóricamente sus propiedades de transporte de calor mediante una novedosa metodología que consigue acelerar hasta 100 veces el método clásico, gracias a la aplicación de algoritmos de inteligencia artificial.

Más información:

- Jose J. Plata, Victor Posligua, Antonio M. Márquez, Javier Fernandez Sanz, and Ricardo Grau-Crespo. Charting the Lattice Thermal Conductivities of I–III–VI2 Chalcopyrite Semiconductors. *Chemistry of Materials* 2022 34 (6), 2833-2841.
  DOI: 10.1021/acs.chemmater.2c00336

Source URL:https://www.cenits.es/en/noticias/31032022-prestigiosa-revista-chemistry-materials-publica-portada-resultados-trabajo