

## Моделирование многокомпонентных твердых растворов замещения

Научный руководитель – Булинская Екатерина Владимировна

*Сусорова Марина Александровна*

*Студент (специалист)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
Механико-математический факультет, Кафедра математической статистики и  
случайных процессов, Москва, Россия

*E-mail: susorovama@gmail.com*

В работе [1] был предложен метод моделирования неупорядоченных твердых растворов замещения, основанный на сопоставлении атомных распределений в координационных сферах суперячейки с теоретической моделью идеально неупорядоченного состояния с применением критерия  $\chi^2$ . Реализованный на его основе программный пакет BINAR ориентирован главным образом на бинарные системы и оперирует лишь с одной изоморфной подрешеткой, что существенно ограничивает его применимость для исследования высокоэнтропийных соединений.

В настоящей работе представлены результаты работы нового программного кода, снимающего указанные ограничения. Ключевыми отличиями программы являются:

- поддержка многокомпонентных систем с произвольным количеством сортов атомов, замещающих друг друга в одной позиции;
- возможность моделирования нескольких подрешеток с независимым заданием составов;
- гибкий выбор статистической модели: для расчета теоретического распределения пар атомов в координационной сфере реализованы как классическая биномиальная модель, так и более строгая гипергеометрическая, учитывающая эффекты конечности размера суперячейки.

В качестве тестовой системы для верификации разработанного программного кода выбраны многокомпонентные гранаты  $TR_3Fe_5O_{12}$  ( $TR = Y, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu$ ), экспериментально изученные в [2]. Расчеты для суперячейки  $2 \times 2 \times 2$ , включающей 192 позиции редкоземельных элементов, демонстрируют, что модернизированный алгоритм стабильно генерирует конфигурации с  $\chi^2$  за конечное число итераций (рис.1).

### Источники и литература

- 1) Урусов В.С., Еремин Н.Н. Атомистическое компьютерное моделирование структуры и свойств неорганических кристаллов и минералов, их дефектов и твердых растворов. М.: ГЕОС, 2012.
- 2) Zhelunitsyn I. A. et al. Synthesis, properties, and ionic conductivity of ceramic solid electrolyte-multicomponent garnet  $(Y, Ln)_3Fe_5O_{12}$  ( $Ln = Gd, Er, Eu, Dy$ ). Ionics, 2024, Vol. 30, No. 7, pp. 3895-3913.

### Иллюстрации

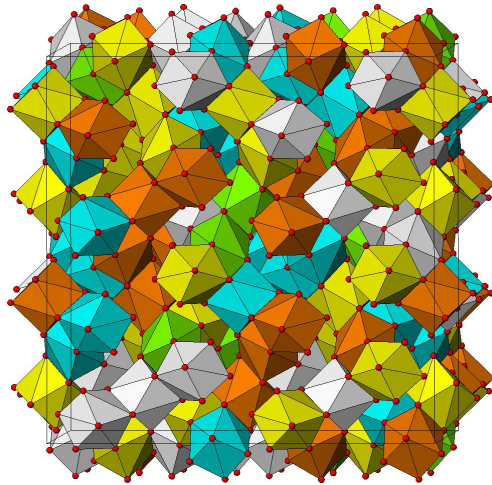


Рис. : Конфигурация для  $Y_{0.1}Eu_{0.225}Gd_{0.225}Dy_{0.225}Er_{0.225}$  (Y-зеленый, Eu-серый, Gd-желтый, Dy-оранжевый, Er-голубой), 69 итераций,  $\chi^2 = 1,82$