

ОТЧЕТ О ПРОДЕЛАННОЙ РАБОТЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОБОРУДОВАНИЯ ИВЦ НГУ

1. Аннотация

В данной работе представлены результаты расчетов теории функционала плотности в рамках квазигармонического приближения, которые предсказывают образование и свойства нового соединения семейства гранатов $\text{La}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$ (LSAG). Показано, что LSAG образуется из $3\text{LaAlO}_3 + \text{Sc}_2\text{O}_3$ при атмосферном давлении и комнатной температуре. Область термодинамической устойчивости LSAG ограничена температурой 685 К, выше которой происходит его разложение на LaAlO_3 (LAP) и Sc_2O_3 . С ростом давления LSAG сохраняет свою устойчивость до 0.23 ГПа, при котором реакция разложения $\text{LSAG} \leftrightarrow 3\text{LAP} + \text{Sc}_2\text{O}_3$ становится термодинамически выгодной. В данной работе не только оценена термодинамическая устойчивость LSAG, но и рассчитаны его теплопроводность, упругие константы и ширина запрещенной зоны. При 300 К теплопроводность LSAG составляет $13.204 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$. LSAG имеет наименьшие упругие константы по сравнению с YSAG и YAG, что свидетельствует о более слабой связи атомов в LSAG, чем в YSAG и YAG. Ширина запрещенной зоны LSAG, рассчитанная с использованием гибридного функционала, равна 5.24 эВ. Кроме того, впервые рассчитана фазовая P - T диаграмма известного $\text{Y}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$ (YSAG). В отличие от LSAG, YSAG стабилен при довольно высоких температурах, достигая значений не менее 1500 К. С ростом температуры до 1500 К давление фазового перехода несколько увеличивается до 3.55 ГПа, а моновариантная кривая реакции $\text{YSAG} \leftrightarrow 3\text{YAP} + \text{Sc}_2\text{O}_3$ представляется практически прямой линией.

2. Тема работы

Расчеты методом теории функционала плотности устойчивости и свойств предсказанного лантан-скандий-алюминиевого граната $\text{La}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$ и фазовой P - T диаграммы $\text{Y}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$.

3. Состав коллектива

1. Литасов Константин Дмитриевич; Новосибирский Государственный Университет, в.н.с.
2. Гаврюшкин Павел Николаевич; Новосибирский Государственный Университет, Институт Геологии и Минералогии им. В.С. Соболева СО РАН; доцент, с.н.с.

3. Инербаев Талгат Муратович; Институт Геологии и Минералогии им. В.С. Соболева СО РАН; с.н.с.
4. Беккер Татьяна Борисовна, Новосибирский Государственный Университет, Институт Геологии и Минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, в.н.с.
5. Сагатов Нурсултан; Институт Геологии и Минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, н.с.
6. Сагатова Динара; Институт Геологии и Минералогии им. В.С. Соболева СО РАН; н.с.
7. Банаев Максим Валерьевич; Новосибирский Государственный Университет; аспирант, инженер.

4. Научное содержание работы

4.1. Постановка задачи

Исследовать стабильность и физико-химические свойства $\text{La}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$ и $\text{Y}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$

4.2. Современное состояние проблемы

Сегодня гранаты с общей формулой $A_3B_2C_3O_{12}$ (катионы A , B , C находятся в $24c$, $16a$ и $24d$ позициях Вайкоффа пространственной группы $I\bar{a}3d$ с додека-, окта- и тетраэдрической координацией соответственно, кислород находится в позиции $96h$), как природные, так и синтетические, представляют собой огромную группу соединений, насчитывающую более 1000 различных соединений, с широким спектром функциональных свойств и применений [1–14]. Среди многочисленных соединений граната наиболее широко используются соединения с одними и теми же катионами, занимающими как тетраэдрические, так и октаэдрические позиции, такие как редкоземельные алюминаты $RE_3Al_5O_{12}$, галлаты $RE_3Ga_5O_{12}$ и ферраты $RE_3Fe_5O_{12}$ ($RE=Ln$, Y). Иттрий-алюминиевый гранат (YAG) является наиболее известным функциональным гранатовым материалом в серии алюминатных гранатов $RE_3Al_5O_{12}$ ($RE=Gd-Lu$, Y), которые нашли различные оптические применения [15]. YAG, легированные редкоземельными элементами, являются наиболее известным типом оксидных кристаллов, широко используемых в качестве активной среды в твердотельных лазерах [3,15,16]. Благодаря высокой термической, химической и механической стабильности YAG и его легированные производные также рассматриваются как потенциальные керамические материалы для теплозащитных покрытий (ТЗП) [17,18], которые используются для защиты металлических деталей газовых турбин при высоких рабочих температурах. Общими требованиями к перспективным материалам ТЗП, помимо их высокотемпературной стабильности, являются низкая теплопроводность, высокий

коэффициент термического расширения (КТР) и хорошая вязкость разрушения [18,19]. Однако высокая теплопроводность и относительно низкий КТР объемных YAG и других алюминатных гранатов [9,18,19] являются существенными недостатками для их использования в ТЗП.

Согласно Liu et al. [19], высокотемпературная стабильность материалов ТЗП связана с прочными (ковалентными) связями кислорода с небольшими и высокозаряженными катионами (Al^{3+} , Zr^{4+} , Ta^{5+} и т. д.), тогда как остальные три свойства определяются более слабыми ионными связями с крупными катионами, такими как щелочноземельные и редкоземельные ионы. Для снижения теплопроводности можно использовать введение структурного/химического беспорядка путем легирования, увеличения атомных чисел, сложности структуры и анизотропии [20, 21]. Поэтому относительно простым способом снижения теплопроводности и повышения КТР YAG может быть изоморфное замещение или замена Al^{3+} и Y^{3+} более крупными и тяжелыми ионами.

В связи с этим возникает естественный вопрос: насколько крупные трехвалентные ионы могут разместиться в додекаэдрических $24c$ и октаэдрических $16a$ позициях структуры граната, при условии, что тетраэдрические $24d$ позиции полностью заняты алюминием? Этот вопрос был детально изучен экспериментально, и было установлено, что наиболее крупными трехвалентными ионами в алюминатных гранатах являются Eu^{3+} в позиции $24c$ и Sc^{3+} в позиции $16a$ [22]. Более крупные ионы лантаноидов могут входить в позицию $24c$ только вместе с более мелкими ионами, как это происходит для $Y_{2.5}Nd_{0.5}Al_5O_{12}$ [9] и $Ca_2LaHf_2Al_3O_{12}$ [23].

В этом свете представляется интересным оценить для ряда $RE_3Sc_2Al_3O_{12}$ ($RE=Eu-Lu, Y$) [11,12,22] возможное существование его членов с $RE=La-Sm$, которые могли бы быть образованы при относительно низких температурах и повышенных давлениях. В этом исследовании мы впервые оцениваем термодинамическую стабильность лантан-скандий-алюминиевого граната $La_3Sc_2Al_3O_{12}$ (LSAG) и некоторые его физические свойства. Существует только одно упоминание о возможном синтезе этого граната. Жеральдин Дантель в своей докторской диссертации [24] указала, что она планировала синтезировать LSAG, легированный ионами Se^{3+} . Однако результаты этого эксперимента, насколько нам известно, никогда не были представлены.

4.3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы

Все расчеты выполнены в рамках теории функционала плотности (DFT), реализованной в программном пакете VASP. Обменно-корреляционное взаимодействие учитывалось в

приближении обобщенного градиента в виде функционала Пердью-Берка-Эрнзергофа (PBE) (Perdew et al., 1996). Электроны атомного остова были аппроксимированы с использованием псевдопотенциалов проектора дополненной волны (PAW), а валентные электроны были представлены с помощью базиса плоских волн с энергией отсечки 800 эВ. Использованы псевдопотенциалы La_sv, Y_sv, Sc, Al и O. Зона Бриллюэна была отобрана с помощью Г-центрированной сетки Монкхорста-Пака (Monkhorst and Pack, 1976) с шагом k-точек 0.3 \AA^{-1} .

Для учета температурного эффекта и расчета свободных энергий Гиббса использовался метод динамики решетки в рамках квазигармонического приближения. Расчеты дисперсии фононов и свободной энергии проводились с использованием программы PHONOPY [30]. Полный путь фонона определялся с использованием программы VASPKIT [31]. Силовые константы реального пространства рассчитывались с использованием подходов суперячеек и конечных смещений, с суперячейкой $1 \times 1 \times 1$ для LSAG, YSAG, YAG, Sc₂O₃-Ia $\bar{3}$, Y₂O₃-Ia $\bar{3}$, суперячейкой $2 \times 1 \times 2$ для LaAlO₃-R $\bar{3}c$ (LAP), суперячейкой $2 \times 1 \times 2$ для YAlO₃-Pnma (YAP), суперячейкой $2 \times 1 \times 1$ для Al₂O₃-R $\bar{3}c$.

Теплопроводность решетки рассчитывалась с помощью модифицированной модели Дебая-Каллауэя, как реализовано в AICON [32]. Этот метод использует в качестве входных данных температуру Дебая, групповую скорость фононов и разрешенный по моде параметр Грюнайзена, и он особенно подходит для объемных кристаллических материалов.

Для исследования упругих свойств был рассчитан статический тензор упругой жесткости (C_{ij}) из зависимости напряжение (σ)-деформация (ϵ) $\sigma_i = C_{ij}\epsilon_j$. На основе полученных данных C_{ij} были рассчитаны коэффициент Пуассона (ν), объемный (B), сдвиговой (G) и модуль Юнга (E) [33] с использованием схемы Фойгта-Рейсса-Хилла [34,35].

4.4. Полученные результаты

Надежность расчетных методов

Термодинамическая устойчивость. Расчеты свободной энергии Гиббса YSAG относительно возможного распада на 3YAP + Sc₂O₃ и 3/5YAG + 3/5Y₂O₃ + Sc₂O₃ показывают, что при давлении окружающей среды YSAG стабилен во всем диапазоне температур (рис. 1). Этот результат согласуется с имеющимися экспериментальными данными [49]. *Теплопроводность.* На рис. 2 показаны результаты расчета теплопроводности YAG и YSAG в сравнении с экспериментальными данными. Полученные нами значения хорошо согласуются с предыдущими экспериментальными

данными. При низких температурах наблюдается небольшое расхождение в результатах, что удовлетворяет погрешности измерений. Однако с ростом температуры можно видеть, что результаты сходятся.

Зонная структура. Поскольку использование функционала PBE имеет тенденцию к занижению ширины запрещенной зоны, для расчета зонной структуры рассматриваемых гранатов использовался функционал HSE06. Рассчитанная ширина запрещенной зоны YAG составляет 6.24 эВ (рис. 3), что хорошо согласуется с предыдущими теоретическими (~6.2 эВ [55]) и экспериментальными данными (6,73 эВ [56]). Стоит отметить, что нам не удалось найти ни одного экспериментального исследования значения ширины запрещенной зоны YAG.

Механические свойства. YAG является довольно широко используемым гранатом, для которого имеются обширные данные как по теоретическим, так и по экспериментальным исследованиям механических свойств. В таблице 1 показано сравнение рассчитанных механических свойств с предыдущими. Наши расчетные значения C_{ij} , B , G , ν и E хорошо согласуются с экспериментальными данными. Экспериментальные данные по твердости и вязкости разрушения YAG различаются, а измеренные значения варьируются в диапазоне 12–22 ГПа и 1,48–2,23 МПа м^{1/2}. Наши расчетные значения H_V и K_{IC} (13,41 ГПа и 2,07 МПа м^{1/2}) лежат в этих диапазонах и близки к значениям 15,5 ГПа и 1,90 МПа м^{1/2}, которые являются средними значениями экспериментальных измерений.

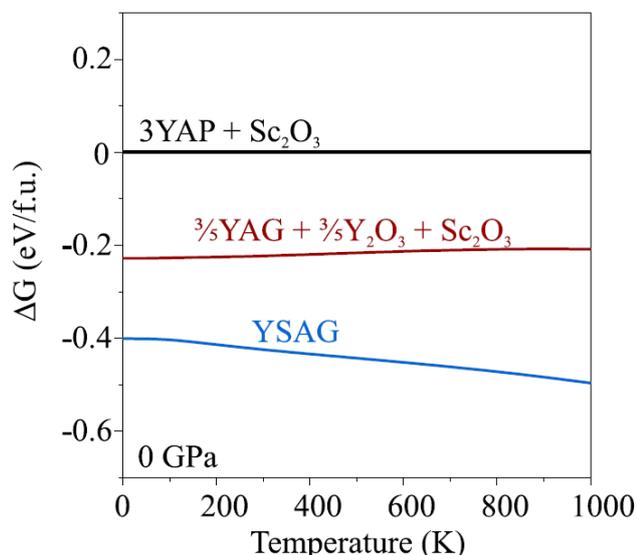


Рисунок 1. Относительные свободные энергии Гиббса как функция температуры для реакций $3\text{YAP} + \text{Sc}_2\text{O}_3 = \text{YSAG}$ и $\text{YSAG} = \frac{3}{5}\text{YAG} + \frac{3}{5}\text{Y}_2\text{O}_3 + \text{Sc}_2\text{O}_3$ при атмосферном давлении и диапазоне температур 0–1000 К.

Продemonстрированное согласие расчетных результатов с предыдущими экспериментальными данными свидетельствует о надежности и устойчивости методов и моделей, использованных в этом исследовании.

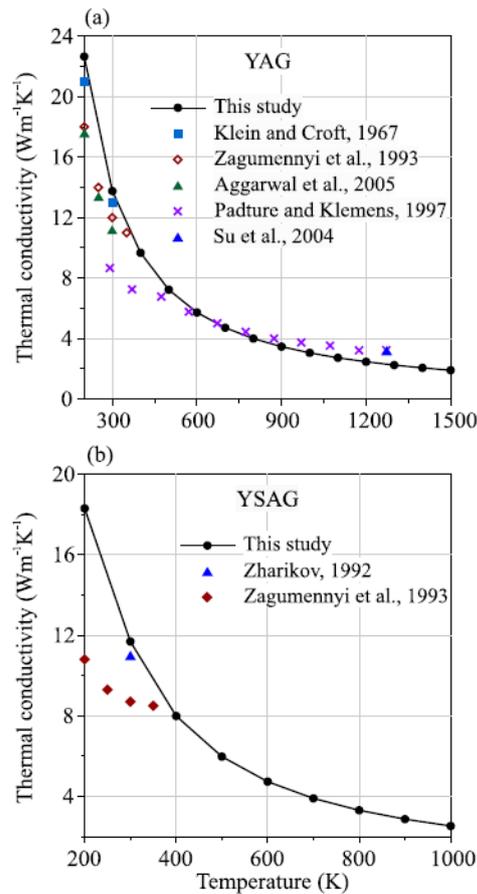


Рисунок 2. Расчетная решеточная теплопроводность YAG (а) и YSAG (б) при различных температурах и давлении окружающей среды в сравнении с имеющимися экспериментальными данными [17, 50–54].

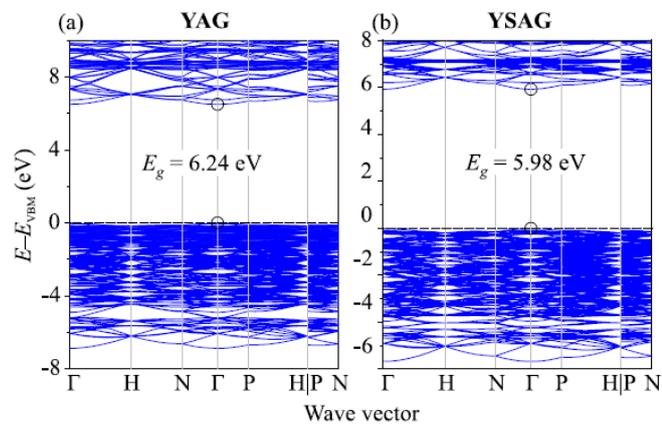


Рисунок 3. Рассчитанные зонные структуры YAG (а) и YSAG (б).

Новый лантан-скандий-алюминиевый гранат

Перейдем теперь к представлению полученных результатов по новому соединению семейства гранатов LSAG. Структура LSAG была смоделирована путем замены всех атомов иттрия в структуре YSAG на атомы лантана.

Термодинамическая устойчивость

Сначала для оценки термодинамической устойчивости LSAG мы рассмотрели реакцию образования $3\text{LaP} + \text{Sc}_2\text{O}_3 = \text{LSAG}$. Для этого были рассчитаны энтальпии всех компонентов этой реакции. Энтальпия образования этой реакции составляет $-0,070$ эВ, что говорит о возможности образования LSAG при атмосферном давлении. По аналогии с YSAG (рис. 1) еще одной возможной реакцией образования LSAG может быть результат взаимодействия $\text{La}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (LAG) с оксидами лантана и скандия ($3/5\text{LAG} + 3/5\text{La}_2\text{O}_3 + \text{Sc}_2\text{O}_3 = \text{LSAG}$). Однако, согласно нашим расчетам, LAG не устойчив относительно LAP и Al_2O_3 . А энтальпия образования реакции $\text{LAG} = 3\text{LAP} + \text{Al}_2\text{O}_3$ составляет $0,664$ эВ.

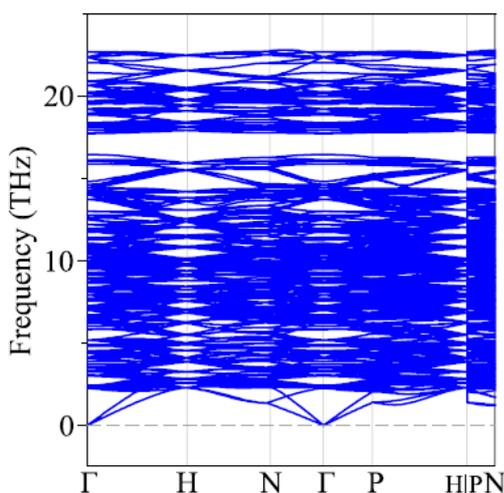


Рисунок 4. Фононные спектры LSAG при 0 ГПа.

Затем мы оценили динамическую устойчивость LSAG, рассчитав дисперсионные кривые. Отсутствие мнимых мод в фононном спектре свидетельствует о динамической устойчивости LSAG (рис. 4). Другими словами, LSAG можно наблюдать в реальных экспериментах после его декомпрессии. Также отсутствие мнимых мод позволяет использовать квазигармоническое приближение для оценки влияния температуры на устойчивость LSAG. На рис. 5 представлена зависимость ΔG от температуры для реакции $3\text{LAP} + \text{Sc}_2\text{O}_3 = \text{LSAG}$. Расчеты с учетом влияния температуры также показали устойчивость LSAG при атмосферном давлении в диапазоне температур от 0 до 685 К.

Выше 685 К LSAG не стабилен и наблюдается его распад на LAP и Sc₂O₃. Помимо влияния температуры мы также оценили устойчивость нового граната с ростом давления при 0 К (без энергии нулевой точки). Согласно полученным результатам, LSAG стабилен при давлении окружающей среды вплоть до давления 0,3 ГПа (30 кбар), при котором он разлагается на LAP и Sc₂O₃ (рис. 6).

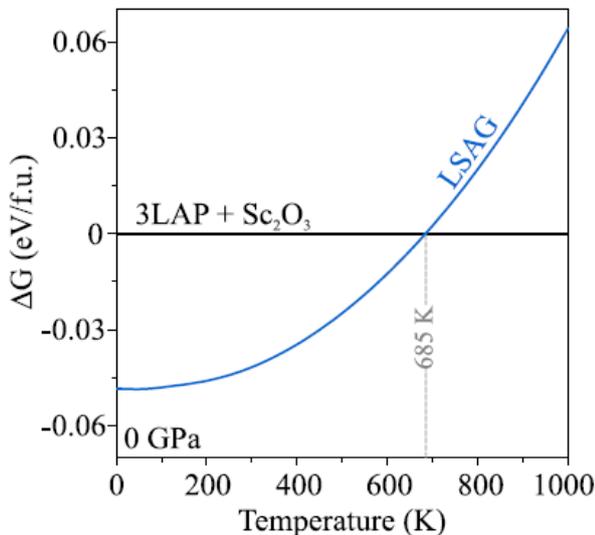


Рисунок 5. Относительная свободная энергия Гиббса как функция температуры для реакции $3\text{LAP} + \text{Sc}_2\text{O}_3 = \text{LSAG}$ при давлении окружающей среды и диапазоне температур 0–1000 К.

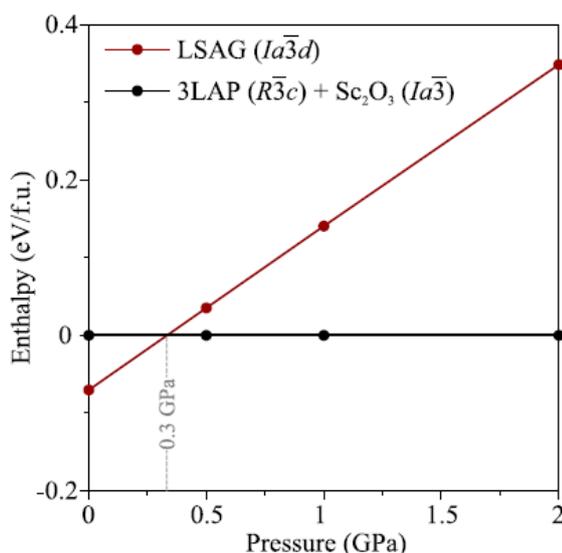


Рисунок 6. Зависимость энтальпии от давления реакции $3\text{LAP} + \text{Sc}_2\text{O}_3 = \text{LSAG}$ при 0 К.

Для получения полной картины устойчивости нового граната в P – T координатах была рассчитана фазовая диаграмма. Полученные результаты свидетельствуют о том, что LSAG

стабилен ниже температуры 685 К в узком диапазоне давлений 0–0,23 ГПа (рис. 7а). Вероятно, столь узкое P – T поле устойчивости нового граната и стало причиной полного отсутствия каких-либо экспериментальных данных по синтезу LSAG.

Также интересно сравнить полученную фазовую P – T диаграмму LSAG с диаграммой известного иттриевого аналога, а именно YSAG. Насколько нам известно, термодинамическая устойчивость в P – T координатах YSAG ранее не проверялась, и, таким образом, отсутствуют доступные экспериментальные и теоретические данные для сравнения. Наши результаты показывают, что это соединение сохраняет свою устойчивость вплоть до давлений 3,1 ГПа при низкой температуре (рис. 7б), что на порядок выше значения для LSAG. При 0 К и давлениях выше 3,1 ГПа происходит разложение YSAG на YAP и Sc₂O₃. В отличие от LSAG, YSAG стабилен при довольно высоких температурах, достигая значений не менее 1500 К. С ростом температуры до 1500 К давление фазового перехода несколько увеличивается до 3,55 ГПа, а фазовая кривая реакции $YSAG \leftrightarrow 3YAP + Sc_2O_3$ представляется почти прямой линией.

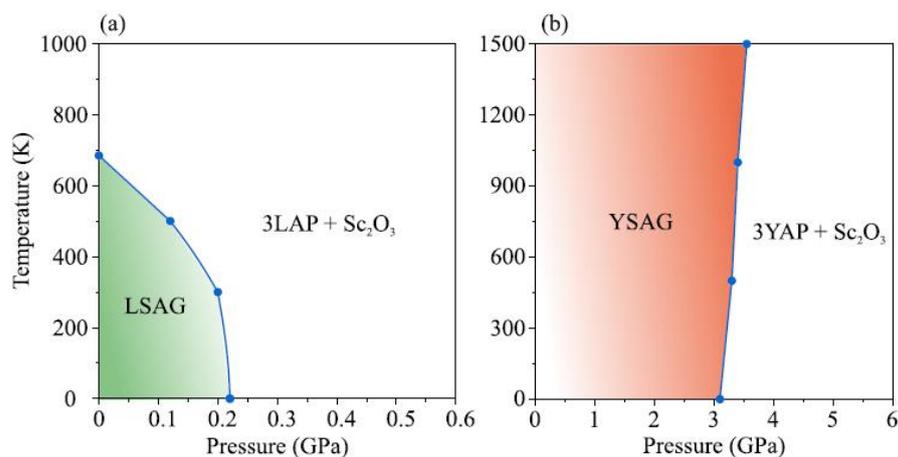


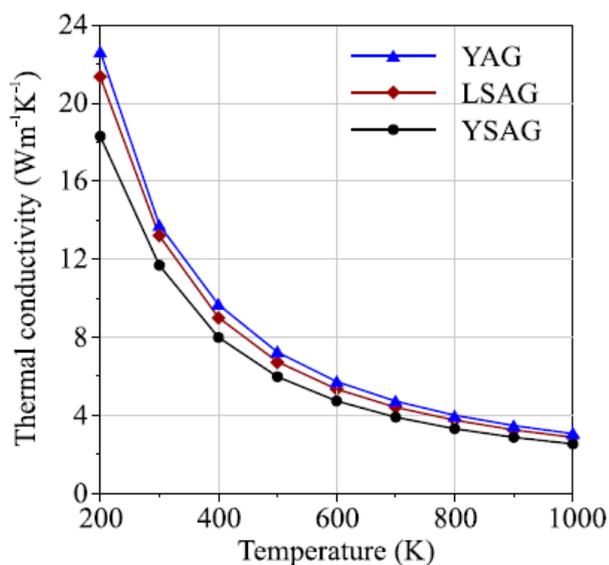
Рисунок 7. Фазовая P – T диаграмма LSAG (а) и YSAG (б).

Теплопроводность

Структуры граната рассматривались как привлекательные кандидаты для применения в качестве теплозащитных покрытий [17,72,73]. Поэтому, несмотря на низкую термическую стабильность LSAG, мы рассчитали теплопроводность и сравнили ее с теплопроводностью YSAG и YAG. Рассчитанная теплопроводность нового граната LSAG близка по значению к YAG (рис. 8). При 300 К теплопроводность LSAG составляет 13,204 Вт·м⁻¹·К⁻¹. При повышении температуры до 1000 К теплопроводность LSAG снижается до 2,869 Вт·м⁻¹·К⁻¹ (таблица 1).

Таблица 1. Рассчитанная теплопроводность κ LSAG, YSAG и YAG.

Compound	κ ($\text{Wm}^{-1} \text{K}^{-1}$)			
	300 K	500 K	700 K	1000K
LSAG	13.204	7.743	4.412	2.869
YSAG	11.689	5.976	3.903	2.532
YAG	13.758	7.234	4.720	3.058

**Рисунок 8.** Рассчитана теплопроводность решетки LSAG, YSAG и YAG при различных температурах в диапазоне от 200 до 1000 К при атмосферном давлении.

Электронная зонная структура и плотность состояний

Для дальнейшего изучения взаимосвязи структуры и свойств были рассчитаны электронная зонная структура и плотность состояний (DOS) LSAG (рис. 9). Для LSAG максимум валентной зоны и минимум зоны проводимости расположены в точке Γ , что приводит к прямой энергетической щели. Ширина запрещенной зоны, рассчитанная с использованием гибридного функционала, равна 5,24 эВ. Ширина запрещенной зоны в целом уменьшается с увеличением атомного номера катиона [74]. Наши результаты подтверждают эту тенденцию для гранатов. Ширина запрещенной зоны LSAG меньше, чем у YSAG и YAG на 0,74 эВ и 1 эВ соответственно.

Как видно из общего графика DOS, валентные зоны обеих структур существуют примерно от -6 до 0 эВ и состоят из орбиталей O $2p$, Al $3s$ и $3p$ и Sc $3d$. Дно валентных зон от -6 до $-4,5$ эВ в основном образовано состояниями O $2p$, гибридными состояниями с Al $3s$ и Sc $3d$. От $-4,5$ эВ до вершины валентных зон зоны в основном заняты состояниями O $2p$ с небольшим вкладом La $5d$, Sc $3d$ и Al $3p$, в то время как доминирующий вклад в дно зон проводимости возникает от d -орбиталей атомов La. Верх зон проводимости (от 6,5 эВ)

в основном состоит из незанятых d -орбиталей атомов Sc и f -орбиталей атомов La. Полученные результаты свидетельствуют о том, что основные оптические переходы в LSAG, согласно правилу Лапорта, должны происходить с занятых орбиталей O $2p$ на незанятые орбитали La $5d$ с изменением орбитального углового момента $\Delta l = 1$.

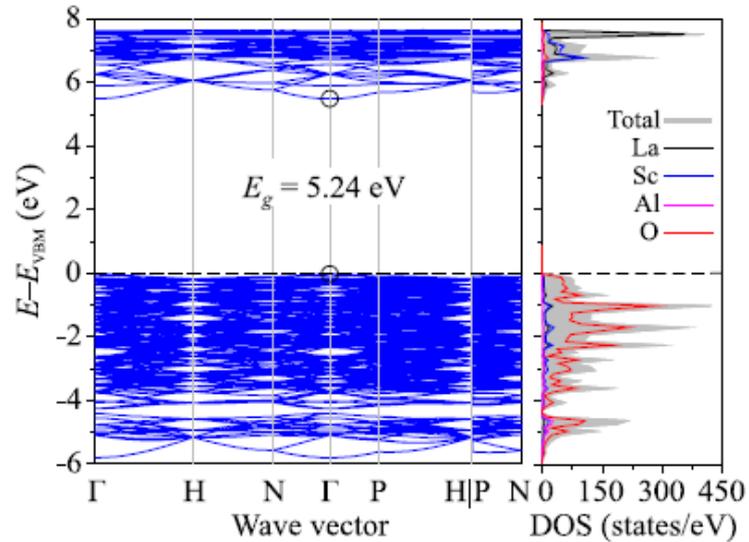


Рисунок 9. Рассчитана зонная структура и плотность состояний LSAG.

Механические свойства

Упругая жесткость твердого тела определяет его реакцию на приложенную упругую деформацию и может предоставить информацию о характеристиках связи. Для кубического кристалла существует три независимых упругих константы: C_{11} , C_{12} и C_{44} . Рассчитанные упругие константы LSAG в сравнении с YSAG и YAG суммированы в таблице 2. Рассчитанные упругие константы LSAG удовлетворяют критериям устойчивости Борна [75] ($C_{11} > 0$, $C_{44} > 0$, $C_{11} > |C_{12}|$, $(C_{11} + 2C_{12}) > 0$), что означает, что LSAG механически стабилен. По сравнению с C_{11} , C_{44} и C_{12} намного меньше, что говорит о том, что кристалл менее устойчив к приложенному сдвигу. Из полученных результатов (таблица 2) видно, что LSAG имеет наименьшие упругие константы по сравнению с YSAG и YAG, что свидетельствует о более слабой связи атомов в LSAG, чем в YSAG и YAG.

Таблица 2. Рассчитаны упругие константы C_{ij} LSAG, YSAG и YAG.

Compound	C_{11}	C_{12}	C_{44}
LSAG	272.1	86.6	70.8
YSAG	296.9	106.1	81.5
YAG	323.9	109.9	105.0

Таблица 3. Рассчитанные объемный модуль упругости (B), модуль сдвига (G), коэффициент Пуассона (ν), модуль Юнга (E), отношение B/G , твердость по Виккерсу (H_V) и вязкость разрушения (K_{IC}) LSAG, YSAG и YAG.

Compound	B (GPa)	G (GPa)	ν	E (GPa)	B/G	H_V (GPa)	K_{IC} (MPa m ^{1/2})
LSAG	148.4	78.9	0.274	201.1	1.881	9.59	1.66
YSAG	169.7	86.8	0.282	222.5	1.955	9.77	1.83
YAG	181.2	105.8	0.256	265.7	1.713	13.41	2.07

Модули упругости (объемный модуль, модуль сдвига, модуль Юнга и коэффициент Пуассона) — это числовые константы, которые описывают механические свойства материала, когда он подвергается приложенному напряжению. Рассчитанные модули упругости LSAG приведены в таблице 6 вместе с расчетными данными YSAG и YAG для сравнения. Объемный модуль, модуль сдвига и модуль Юнга LSAG ниже, чем у YSAG (на 13%, 9% и 10% ГПа соответственно) и YAG (на 18%, 25% и 24% соответственно). Когда материал растягивается или сжимается, коэффициент Пуассона представляет собой отношение боковой деформации к осевой деформации. Коэффициент Пуассона LSAG (0,274) меньше, чем у YSAG (0,282) на 3% и больше, чем у YAG (0,256) на 7%. Его можно использовать для определения хрупкой/пластичной природы, сжимаемости и характеристик силы связи соединения. Кроме того, отношение B/G [76] также представляет собой хороший критерий для определения пластичности/хрупкости материалов. Существует пороговое значение как коэффициента Пуассона (0,26), так и отношения B/G (1,75) для определения пластичности/хрупкости материала. Материал, имеющий значение коэффициента Пуассона и отношения B/G выше этих пороговых значений, должен быть пластичным и наоборот. Из наших результатов мы видим, что коэффициент Пуассона и отношение B/G LSAG (таблица 3) выше своих пороговых значений, что означает, что LSAG является пластичным. Рассчитанная твердость по Виккерсу LSAG (9,59 ГПа) ниже минимальных критериев твердых материалов ($H_V > 20$ ГПа) и почти такая же, как у YSAG (9,77 ГПа). Способность материала противостоять распространению трещин и изломов при воздействии внешних сил называется вязкостью разрушения (ВКР). Рассчитанная ВКР для LSAG (1,66 МПа м^{1/2}) ниже, чем для YSAG (1,83 МПа м^{1/2}) и YAG (2,07 МПа м^{1/2}). Этот результат показывает, что LSAG более склонен к трещинам, чем YSAG и YAG.

5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Кластер ИВЦ НГУ является основным кластером нашей группы, без использования ресурсов кластера достижение большинства результатов было бы технически невозможным.

6. Перечень публикаций

1. Sagatova, Dinara N., Nursultan E. Sagatov, Pavel N. Gavryushkin, and Sergey F. Solodovnikov. "DFT calculations of the stability field and properties of a predicted lanthanum–scandium–aluminum garnet $\text{La}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$ and P – T phase diagram of $\text{Y}_3\text{Sc}_2\text{Al}_3\text{O}_{12}$." *Computational Materials Science* 243 (2024): 113124.