

## Прогнозирование пространственной группы перовскитоподобных соединений состава $A^{II}_2B^{III}B^VO_6$

Н. Н. Киселева, В. А. Дударев, А. В. Столяренко,  
А. А. Докукин, О. В. Сенько, В. В. Рязанов, М. А. Витушко,  
В. С. Переверзев-Орлов, Е. А. Ващенко

Проведено прогнозирование новых соединений состава  $A^{II}_2B^{III}B^VO_6$ , предсказан тип искажения их перовскитоподобной ячейки, пространственная группа и проведена оценка параметров кристаллической решетки прогнозируемых соединений. При прогнозировании использовали только значения свойств химических элементов. Программы, основанные на алгоритмах обучения различных вариантов нейронных сетей, линейной машины, формировании логических закономерностей, k-ближайших соседей, методе опорных векторов, показали лучшие результаты при прогнозировании типа искажения перовскитоподобной ячейки. При оценке параметров решетки наиболее точными были программы, основанные на алгоритмах ортогонального согласованного преследования и регрессии автоматического определения релевантности. Точность прогнозов типа искажения перовскитоподобной ячейки была не ниже 74 %. Точность оценки линейных параметров решетки была в пределах  $\pm 0,0120 - 0,8264 \text{ \AA}$ , а точность для углов  $\beta$  при моноклинном искажении решетки —  $\pm 0,08 - 0,74$  град. Расчеты проведены с применением систем, основанных на методах машинного обучения. Для оценки точности прогнозирования использовали экзаменационное распознавание в режиме скользящего контроля для соединений, включенных в выборку для машинного обучения. Прогнозируемые соединения перспективны для поиска новых магнитных, термоэлектрических и диэлектрических материалов.

**Ключевые слова:** перовскит, параметр кристаллической решетки, прогнозирование, обучение ЭВМ.

DOI: 10.30791/1028-978X-2021-9-5-23

### Введение

Перовскитоподобные соединения относятся к числу наиболее изученных неорганических веществ. Это связано с их разнообразными физическими и химическими свойствами: магнитными [1 – 4], термоэлектрическими [4 – 6], диэлектрическими [7, 8], каталитическими [8, 9] и т.д. Их можно использовать и как электродные материалы для топливных элементов [10, 11]. Некоторые перовскиты одновременно сочетают разные свойства [12, 13], что расширяет области их применения.

Кристаллическая структура двойных перовскитов — соединений состава  $A_2BB'O_6$  — во многих случаях отличается от идеальной кубической структуры перовскита. Проблема предсказания кристаллической структуры двойных перовскитов в значительной мере связана с определением типа искажений структуры при заданных внешних условиях. Большинство критериев, разработанных для решения этой проблемы, учитывают размеры ионов. Рассмотрим наиболее популярные из таких критериев.

Классическим критерием определения вида искажения перовскитной структуры является фак-

тор толерантности  $t$ . В случае двойных перовскитов  $A_2BB'O_6$  он имеет вид [14]:

$$t = \frac{r_A + r_O}{\sqrt{2}(r_B + r_{B'}) + r_O},$$

где  $r_A$  — ионный радиус для координационного числа 12,  $r_B$ ,  $r_{B'}$  и  $r_O$  — ионные радиусы для координационного числа 6. В соответствии с этим критерием для идеальной кубической структуры значение  $t$  близко к 1. При  $t < 0,77$  образуются другие структуры (типа ильменита, корунда и т.д.). Если  $0,77 < t < 1$ , то возможно ромбическое, тетрагональное, моноклинное или ромбоэдрическое искажения. При  $t > 1$  наблюдается гексагональное искажение идеальной перовскитной структуры. Все указанные выше значения фактора толерантности весьма приблизительные и в разных публикациях указаны различные интервалы для разных типов искажений, которые нередко пересекаются. Таким образом, фактор толерантности вряд ли можно рассматривать в качестве надежного правила для предсказания возможных искажений кристаллической решетки двойных перовскитов.

Следует отметить, что наиболее частыми причинами понижения симметрии могут быть поворот (наклон) цепочек октаэдров  $BO_6$  и  $B'O_6$  или искажение этих октаэдров, а также смещение катионов из идеальных позиций. При этом в большинстве случаев понижение симметрии связано с совокупностью нескольких причин. Поворот и наклон цепочек октаэдров обуславливают наиболее часто встречающийся тип искажений в двойных перовскитах. В работе [15] было показано, что в структуре перовскита возможны 23 различные системы наклонов октаэдров. Позже в [16] на основе теоретико-группового анализа было показано, что только 15 таких систем наклонов являются неэквивалентными, и выведены возможные пространственные группы в зависимости от той или иной системы наклонов октаэдрического каркаса. Основываясь на вышеуказанных работах [15, 16], в работе [17] разработана программная система SPuDS (Structure Prediction Diagnostic Software) [17], предназначенная для прогноза типа искажения перовскитной структуры и оценки параметров кристаллической структуры перовскитов состава  $ABX_3$ . Для расчетов использовали значение катион-анионного взаимодействия, в свою очередь, в уравнение для вычисления которого входит расстояние катион-анион, а также эмпирически подбираемые константа и переменная. Следует отметить,

что необходимость подбора последних двух компонент уравнения в значительной степени снижает эффективность предложенного метода. Далее с использованием полученного значения катион-анионного взаимодействия рассчитывали глобальный индекс неустойчивости. Последний минимизировался путем изменения наклона октаэдров (и положения катиона А). Затем проводили поиск той кристаллической структуры, которая соответствует минимальному значению этого полумпирического индекса неустойчивости. Если рассчитанный индекс не превышал 0,1, то структура считалась стабильной. При значениях выше 0,2 структуру относили к неустойчивой. Параметры решетки могли быть рассчитаны на основе данных о расстоянии В – О и угле наклона октаэдров. В [18] система SPuDS была применена для соединений состава  $A_2BB'O_6$ . Следует отметить, что наклон и искажение октаэдров, а также смещение катионов из идеальных позиций кубического перовскита не исчерпывают всех причин искажения идеальной кубической структуры перовскита. Возможны и другие факторы, например, эффект Яна – Тейлора, изменение валентности, наличие вакансий и т.д. Понятно, что ни фактор толерантности, ни методика, положенная в основу SPuDS, не могут полностью учесть все эти факторы, поэтому в последние годы исследователи обратили внимание на методы обучения ЭВМ, позволяющие на основе анализа информации об уже известных соединениях состава  $A_2BB'O_6$  найти сложные закономерности, связывающие свойства перовскитов с параметрами химических элементов, входящих в состав соединения [19 – 25]. Именно методы обучения ЭВМ позволили не только предсказать новые двойные перовскиты, но и оценить некоторые их свойства, например, энергию образования [19] и термодинамическую стабильность [21], параметры кристаллической решетки [20, 22], ширину запрещенной зоны [23], наклон октаэдров [24]. Особенностью подхода к прогнозированию новых неорганических соединений, основанного на методах обучения ЭВМ, является включение в искомые зависимости широкого набора свойств химических элементов, а не только размерных параметров и данных о распределении зарядов. В большинстве применений методов обучения ЭВМ за счет этого возрастает точность прогнозов. Так как количество известных двойных перовскитов достаточно велико, то снимается и существенное ограничение при использовании этих методов — представительность выборки для обучения ЭВМ. Следует отметить, что при прогнозировании новых неорганических

соединений используются только свойства химических элементов.

## Методы расчета

Первые прогнозы еще не синтезированных перовскитов состава  $ABO_3$  с использованием методов обучения ЭВМ были получены нами в середине 70-х годов [26]. Сравнение наших результатов с новыми экспериментальными данными показало, что точность прогноза образования соединений этого состава составляла 90 %, а структуры кубического перовскита — 85% [27].

Цель настоящей работы — повысить точность прогнозов типа кристаллической структуры соединений состава  $A^{II}_2B^{III}V^{VO}_6$  за счет использования коллективов алгоритмов обучения ЭВМ [28].

Дело в том, что ранее при прогнозировании использовали только один из таких методов, например, в [19, 21] это были различные варианты обучения случайного “леса”. Даже в тех работах, авторы которых применяли различные алгоритмы [24, 25], окончательное решение по результатам прогнозирования принималось на основе простого голосования по большинству прогнозов с использованием разных методов. В настоящей работе применяли коллективные методы принятия решений о результате прогнозирования, основанные на специальных эвристиках [28], программы которых включены в разработанную нами информационно-аналитическую систему (ИАС) для конструирования неорганических соединений [29]. Сначала независимо применяли различные алгоритмы обучения ЭВМ, включенные в ИАС. Далее автоматически находилось оптимальное коллективное решение с помощью специальных методов-“корректоров” [28]. Создание такого подхода было обусловлено невозможностью предсказать заранее, какой алгоритм обучения ЭВМ будет наиболее эффективен при решении конкретной химической задачи. Применение коллективов алгоритмов позволяет компенсировать возможные недостатки использования одного алгоритма преимуществами других. Как показывает наш многолетний опыт, коллективы алгоритмов обучения ЭВМ в большинстве случаев повышают точность прогнозирования при решении химических задач [30, 31].

Процедура обучения ЭВМ и прогнозирования включает несколько этапов.

1. На первом этапе проводится отбор примеров известных соединений для обучения ЭВМ. Источником информации является интегрированная система баз данных (БД) ИМЕТ РАН по свой-

ствам более 85 тыс. неорганических соединений (<http://www.imet-db.ru/>), включающая информацию о более 750 соединениях состава  $A^{II}_2B^{III}V^{VO}_6$ . Отбор примеров — наиболее сложная, длительная и неформализуемая задача, от решения которой во многом зависит точность получаемых прогнозов. В настоящем исследовании сложность формирования обучающей выборки была связана с крайне противоречивой информацией о типе искажения кристаллической структуры идеального перовскита при нормальных условиях для большинства соединений. Например, для соединения  $Sr_2YSbO_6$  указаны разные сингонии при комнатной температуре: моноклинная (пространственная группа  $P2_1/n$  [32]) и ромбическая [33]. Двойной перовскит  $Ba_2SmNbO_6$  по данным разных исследователей имеет: тетрагональный тип искажения [34] (пространственная группа  $I4/m$  [35]) и моноклинный (пространственные группы  $P2_1/n$  [36] или  $I2/m$  [37]). Одним из путей разрешения неоднозначностей и уменьшения объема анализируемой информации является использование разработанных нами специальных систем определения аномальных объектов, в основу которых положена идея компактности классов неорганических веществ в многомерном пространстве параметров химических элементов [38, 39], которая является следствием Периодического закона. Иными словами, вещества, в состав которых входит близкий по значениям параметров набор элементов, должны быть близки и по кристаллической структуре. Эти программные системы значительно сокращают время анализа экспериментальной информации, указывая эксперту на те вещества, чей опубликованный тип искажения кристаллической структуры не попадает в “свой” класс. Например, один из методов определения веществ, чей набор значений компонентов отличается от наборов таких значений для веществ с той же пространственной группой, сводится к определению величины ошибки экзаменационного распознавания при добавлении информации об оцениваемом веществе в обучающую выборку [38]. Если ошибка возрастает на величину, большую заданной, то этот объект считается аномальным. Естественно, окончательное решение о кристаллической структуре “выпадающего” вещества принимает специалист в предметной области.

2. Отбор параметров химических элементов для включения в искомую закономерность, позволяющую предсказать тип кристаллической структуры соединений, имеет важное значение. Первичный отбор выполняется на основе физико-химических представлений о природе изучае-

мых веществ и с использованием БД по свойствам элементов (<http://phases.imet-db.ru/elements>). В дополнение специальная программа генерирует алгебраические функции от параметров элементов с помощью набора элементарных алгебраических операций над значениями однотипных по физическому смыслу и размерности параметров. Далее с помощью программы [40], включенной в ИАС, оценивается важность для классификации не только исходных свойств элементов, но и сгенерированных функций. С помощью системы визуализации можно показать любую проекцию точек на плоскость, координатами которой является любая пара отобранных параметров элементов или их функций, что облегчает интерпретацию полученных результатов.

Результатом работы этих двух этапов является матрица (обучающая выборка), каждая строка которой соответствует набору значений свойств элементов, образующих экспериментально исследованное соединение  $A^{II}_2B^{III}V^{VO}_6$  с обозначением пространственной группы, к которой относится это соединение.

3. Для прогнозирования новых двойных перовскитов использовали две разработанные нами системы. С помощью первой информационно-аналитической системы [29] проводили прогнозирование типа искажения кристаллической структуры (пространственной группы). Вторую систему ParIS (Parameters of Inorganic Substances) [41] использовали для оценки параметров кристаллической решетки двойных перовскитов. Подсистема анализа данных ИАС в настоящее время включает 15 программ обучения ЭВМ и 9 программ коллективного принятия решения [29, 30]. Подсистема анализа данных системы ParIS включает 11 программ машинного обучения [41]. При обучении ЭВМ отбирали наиболее “точные” алгоритмы, которые в дальнейшем используются для поиска закономерностей и прогнозирования. Для оценки точности (отношения количества веществ, для которых правильно распознана принадлежность к заданным классам, к общему числу распознаваемых веществ) в ИАС применяли широко используемую процедуру — экзаменационное распознавание со скользящим контролем на материале обучающей выборки, которая подробно описана в [30]. При принятии коллективного решения в ИАС так же выбирали наиболее точный алгоритм, для чего применялось экзаменационное распознавание заданного количества веществ, случайно выбранных из обучающих выборок и неиспользованных в обучении ЭВМ (на завершающем этапе прогнозирования кон-

трольные примеры возвращались в обучающую выборку). Подсистема оценки качества обучения в системе ParIS позволяет оценить среднюю абсолютную (MAE — Mean Absolute Error) и среднеквадратичную ошибки (MSE — Mean Squared Error) (при скользящем контроле в режиме LOOCV — Leave-One-Out Cross-Validation), коэффициент детерминации  $R^2$  и т.д., а также построить диаграмму отклонений рассчитанных значений параметров от экспериментальных для веществ, информация о которых использована при обучении ЭВМ.

4. Прогнозирование проводили специальными подсистемами ИАС и ParIS с использованием только значений свойств элементов, входящих в состав прогнозируемого вещества. Сначала с применением ИАС осуществляли прогнозирование принадлежности к наиболее распространенным пространственным группам при комнатной температуре и атмосферном давлении. Эту задачу разбивали на две. Вначале для соединений состава  $A^{II}_2B^{III}V^{VO}_6$  проводили многоклассовое прогнозирование принадлежности к девяти из классов: соединениям со структурой идеального кубического перовскита (пр. гр.  $Pm(-)3m$ ), соединениям с пространственными группами  $P2_1/n$ ,  $Fm(-)3m$ ,  $I2/m$ ,  $Pbnm$ ,  $I4/m$ ,  $R(-)3$ ,  $P6_3/mmc$ , соединениям со структурой, отличной от приведенных выше, а потом последовательное разделение соединений  $A^{II}_2B^{III}V^{VO}_6$  на два класса, например, целевой класс 1 — фазы со структурой идеального кубического перовскита, класс 2 — соединения со структурой, отличной от идеального кубического перовскита. Окончательный результат прогнозирования формировался на основе сравнения прогнозов, полученных при решении всех задач. Если результаты противоречили друг другу, то прогноз считался неопределенным. Далее с помощью системы ParIS для прогнозируемых соединений проводили оценку значений параметров кристаллической решетки.

### Расчетная часть

После экспертной оценки в выборку для компьютерного анализа для прогноза пространственной группы была включена информация о 216 соединениях состава  $A^{II}_2B^{III}V^{VO}_6$  с моноклинной структурой (пр. гр.  $P2_1/n$ ), 179 соединениях с кубической структурой (пр. гр.  $Fm(-)3m$ ), 27 соединениях с моноклинной структурой (пр. гр.  $I2/m$ ), 20 соединениях со структурой идеального кубического перовскита (пр. гр.  $Pm(-)3m$ ), 19 соединениях с ромбической структурой (пр. гр.  $Pbnm$ ), 17 соеди-

нениях с тетрагональной структурой (пр. гр.  $I4/m$ ), 13 соединениях с ромбоэдрической структурой (пр. гр.  $R(-)3$ ), 10 соединениях с гексагональной струк-

турой (пр. гр.  $P6_3/mmc$ ) и 15 соединениях с кристаллической структурой, отличной от приведенных выше при обычных условиях. Существенная раз-

Таблица 1

Результаты оценки важности для классификации параметров элементов и выбора наиболее точных методов обучения ЭВМ

Table 1

The results of evaluating the importance for the classification of the elements parameters and the choice of the most accurate machine learning methods

Задача	Наиболее важные параметры элементов	Точность прогнозирования с использованием свойств элементов и наиболее важных параметров, %	Точность прогнозирования с использованием только свойств элементов, %	Выбранные методы обучения ЭВМ
Многоклассовое прогнозирование	A2(B)/M11(A); A4(B')+M7(B); A3(B')/M7(B)	<b>74</b>	74	(линейная машина, логические закономерности, k-ближайших соседей, метод опорных векторов) — голосование по большинству
Прогнозирование соединений с пр.гр. $P6_3/mmc$	I8(A)/I8(B')	<b>100</b>	96	(алгоритм вычисления оценок, нейронная сеть, k-ближайших соседей) — голосование по большинству
Прогнозирование соединений с пр.гр. $Pbnm$	A4(B')/A3(A)	97	<b>99</b>	(линейная машина, многослойный перцептрон, нейронная сеть, метод опорных векторов) — выпуклый стабилизатор
Прогнозирование соединений с пр.гр. $I2/m$	I11(B)*I11(B'); I10(A)/I10(B)	<b>99</b>	99	(нейронная сеть, k-ближайших соседей, метод опорных векторов) — выпуклый стабилизатор
Прогнозирование соединений с пр.гр. $I4/m$	E8(A)/E8(B')	<b>97</b>	94	(линейная машина, k-ближайших соседей, нейронная сеть) — усреднение
Прогнозирование соединений с пр.гр. $Fm(-)3m$	A2(B')+M7(B)	<b>85</b>	83	(линейная машина, нейронная сеть, k-ближайших соседей, метод опорных векторов) — обобщенный полиномиальный корректор
Прогнозирование соединений с пр.гр. $P2_1/n$	A2(B')/M6(A); E7(A)-E7(B'); E6(B)*E7(B')	91	<b>93</b>	(линейная машина, k-ближайших соседей, нейронная сеть, метод опорных векторов) — усреднение
Прогнозирование соединений с пр.гр. $Pm(-)3m$	A2(A)/A4(B')	94	<b>98</b>	(нейронная сеть, k-ближайших соседей, метод опорных векторов) — области компетенции
Прогнозирование соединений с пр.гр. $R(-)3$	A3(B')/M11(A)	94	<b>96</b>	(многослойный перцептрон, k-ближайших соседей, нейронная сеть, метод опорных векторов) — динамический метод Вудса

ница в размерах классов (количество примеров соединений с пр. гр.  $P2_1/n$  и  $Fm(-)3m$  на порядок больше, чем количество большинства соединений с другими пространными группами) может иметь следствием более низкую точность прогнозов соединений, относящихся к малочисленным классам.

В исходный набор параметров для прогноза пространными группами были включены следующие свойства химических элементов А, В и В': псевдопотенциальный орбитальный радиус (по Цангеру), ионный радиус (по Шеннону), расстояния до внутренних и до валентных электронов (по Шуберту), энергии ионизации первого, второго и третьего электронов (E5-E7), номера (по Менделееву – Петтифору) (M1-M11 и A1-A4), квантовый номер, электроотрицательность (по Полингу), химический потенциал Мидемы (E8), температуры плавления и кипения, стандартные энтропия (I11), энтальпия атомизации, теплопроводность (I8), молярная теплоемкость (I10) и т.д. (значения см. <http://phases.imet-db.ru/elements>). Всего 105 значений параметров элементов для каждого соединения плюс значения разных наиболее информативных для классификации алгебраических

функций от исходных параметров, определенных с применением программы [40].

### Результаты и их обсуждение

В табл. 1 приведены списки функций от параметров химических элементов, наиболее информативных для прогноза соединений с различными кристаллическими структурами. При решении этих задач проверялось насколько увеличивается точность экзаменационного прогнозирования при добавлении в искомые закономерности этих информативных функций наряду со свойствами элементов. Наилучшие по результатам наборы параметров элементов и алгоритмов, которые в дальнейшем использовали при обучении ЭВМ, выделены полужирным шрифтом. Программы, основанные на алгоритмах обучения различных вариантов нейронных сетей, линейной машины, формировании логических закономерностей, k-ближайших соседей, методе опорных векторов, — показали лучшие результаты в режиме скользящего контроля.

Далее с использованием системы ParIS было проведена оценка значений параметров кристал-

Таблица 2

Результаты оценки точности прогнозирования параметров кристаллической решетки соединений состава  $A_2^{II}B^{III}V^{VO}_6$

Table 2

The results of evaluating the accuracy of predicting the parameters of the crystal lattice of compounds of the composition  $A_2^{II}B^{III}V^{VO}_6$

Задача	Пространственная группа (Пр. гр.), параметр	Алгоритм	Коэффициент детерминации, $R^2$	Средняя абсолютная ошибка, MAE	Средне-квадратичная ошибка, MSE
1	<i>I2/m, a</i>	Elastic Net	0,95	0,0251	0,0018
2	<i>I2/m, b</i>	Orthogonal Matching Pursuit	0,96	0,0486	0,0364
3	<i>I2/m, c</i>	Linear Regression	1,00	0,0677	0,0235
4	<i>I2/m, β</i>	ARD Regression	0,99	0,7359	3,5439
5	<i>I4/m, a</i>	Ridge	1,00	0,0120	0,0005
6	<i>I4/m, c</i>	Random Forest	0,99	0,0163	0,0007
7	<i>Fm(-)3m, a</i>	ARD Regression	0,81	0,0725	0,0520
8	<i>P2<sub>1</sub>/n, a</i>	ARD Regression	0,98	0,0181	0,0019
9	<i>P2<sub>1</sub>/n, b</i>	Convex with loop reduction	0,93	0,0234	0,0013
10	<i>P2<sub>1</sub>/n, c</i>	Ridge	0,66	0,0438	0,0434
11	<i>P2<sub>1</sub>/n, β</i>	SAND	0,78	0,0794	0,0335
12	<i>P6<sub>3</sub>/mmc, a</i>	ARD Regression	0,99	0,0201	0,0014
13	<i>P6<sub>3</sub>/mmc, c</i>	ARD Regression	1,00	0,8264	3,5610
14	<i>Pbnm, a</i>	ARD Regression	0,99	0,1256	0,0562
15	<i>Pbnm, b</i>	Orthogonal Matching Pursuit	0,97	0,1758	0,1934
16	<i>Pbnm, c</i>	Orthogonal Matching Pursuit	0,97	0,3931	0,5264
17	<i>Pm(-)3m, a</i>	Orthogonal Matching Pursuit	0,93	0,0230	0,0076
18	<i>R(-)3, a</i>	SAND	1,00	0,7839	2,4921
19	<i>R(-)3, c</i>	ARD Regression	1,00	0,7411	1,6414

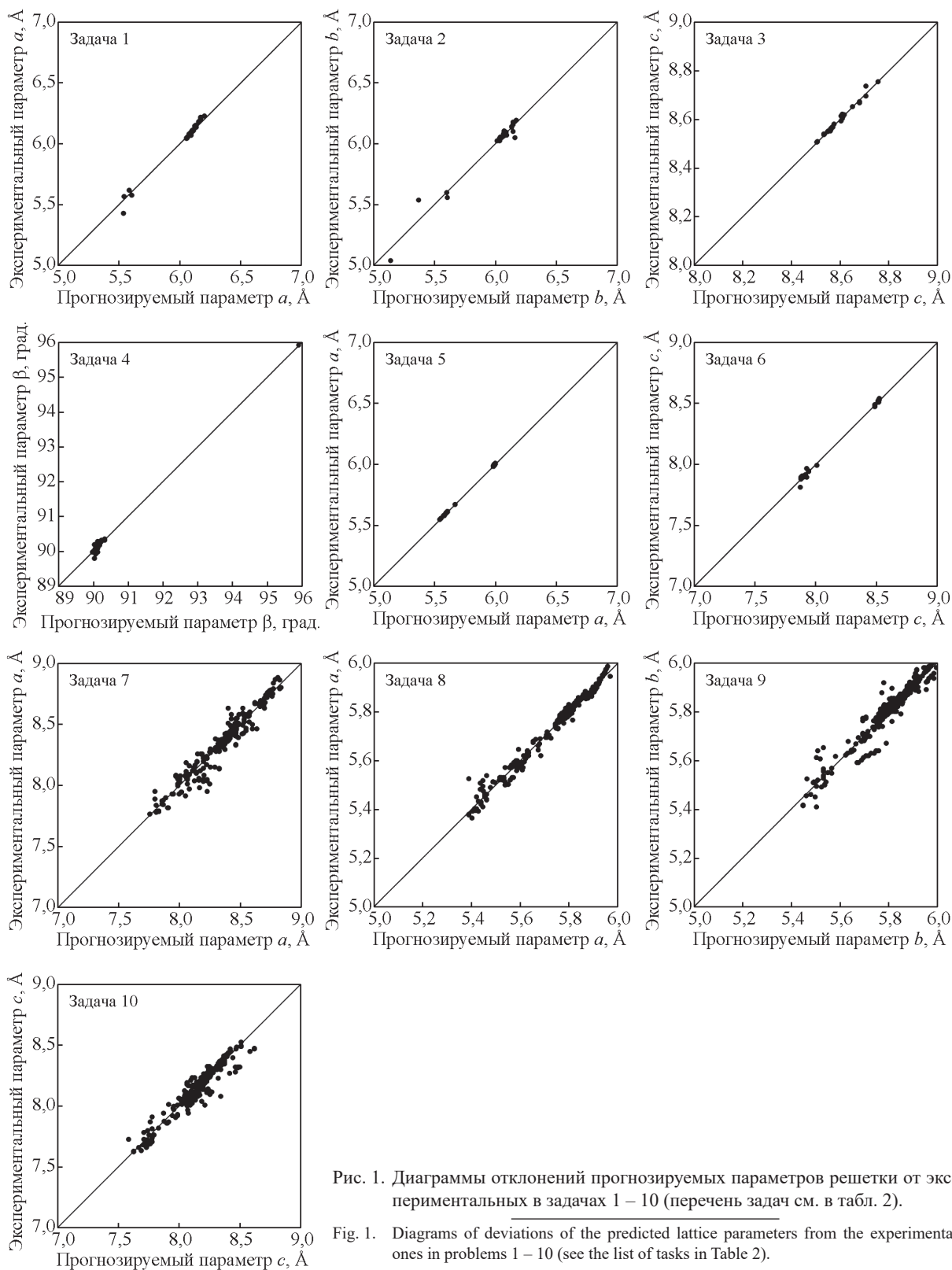


Рис. 1. Диаграммы отклонений прогнозируемых параметров решетки от экспериментальных в задачах 1 – 10 (перечень задач см. в табл. 2).

Fig. 1. Diagrams of deviations of the predicted lattice parameters from the experimental ones in problems 1 – 10 (see the list of tasks in Table 2).

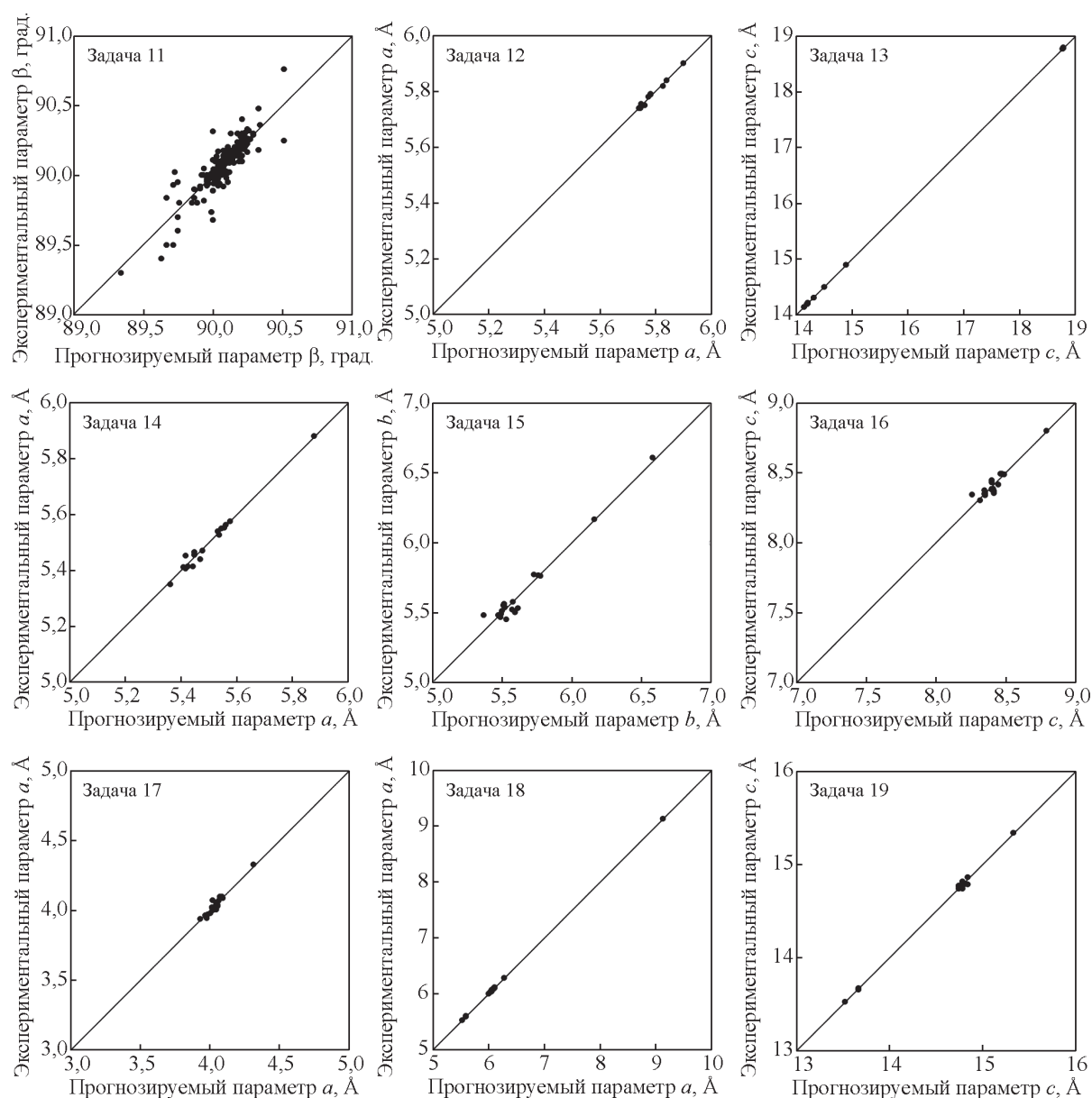


Рис. 2. Диаграммы отклонений прогнозируемых параметров решетки от экспериментальных в задачах 11 – 19 (перечень задач см. в табл. 2).

Fig. 2. Diagrams of deviations of the predicted lattice parameters from the experimental ones in problems 11 – 19 (see the list of tasks in Table 2).

лической решетки прогнозируемых соединений. В табл. 2 приведен список алгоритмов, использование которых при экзаменационном распознавании обучающей выборки в режиме LOOCV дало наилучший набор значений параметров MAE, MSE и  $R^2$ . Диаграммы отклонений прогнозируемых параметров решетки от экспериментальных даны

на рис. 1, 2. Следует отметить, что большинство лучших результатов были получены при использовании программ, включенных в систему ParIS [41] и основанных на алгоритмах ортогонального согласованного преследования (Orthogonal Matching Pursuit) и регрессии автоматического определения релевантности (Automatic Relevance Determination



Таблица 3

Прогноз параметра  $a$  кристаллической кубической решетки новых соединений состава  $A_2^{II}B^{III}B'VO_6$

Table 3

Prediction of the parameter  $a$  of the crystal cubic lattice of new compounds of composition  $A_2^{II}B^{III}B'VO_6$

Состав	$a, \text{Å}$	Состав	$a, \text{Å}$	Состав	$a, \text{Å}$
Пр. гр. $Fm(-)3m$ (алгоритм ARD Regression)					
$Ca_2AlUO_6$	7,9030	$Sr_2PmUO_6$	8,5299	$Ba_2PmWO_6$	8,5261
$Ca_2ScUO_6$	8,1164	$Sr_2TbUO_6$	8,5152	$Ba_2PmMoO_6$	8,4351
$Ca_2GaUO_6$	8,0806	$Sr_2TmUO_6$	8,4477	$Ba_2PmUO_6$	8,7044
$Ca_2YUO_6$	8,3583	$Sr_2BiUO_6$	8,6795	$Ba_2GdRuO_6$	8,3499
$Ca_2PrUO_6$	8,4692	$Sr_2AmUO_6$	8,6044	$Ba_2TbRuO_6$	8,3412
$Ca_2PmUO_6$	8,3950	$Ba_2AlMoO_6$	7,9431	$Ba_2TbWO_6$	8,51144
$Ca_2GdUO_6$	8,3890	$Ba_2AlWO_6$	8,0341	$Ba_2HoWO_6$	8,4857
$Ca_2TbUO_6$	8,3803	$Ba_2AlReO_6$	7,8691	$Ba_2TmVO_6$	8,2003
$Ca_2DyUO_6$	8,3573	$Ba_2AlOsO_6$	7,9099	$Ba_2TmWO_6$	8,4439
$Ca_2HoUO_6$	8,3545	$Ba_2AlUO_6$	8,2124	$Ba_2TmUO_6$	8,6222
$Ca_2ErUO_6$	8,3436	$Ba_2ScVO_6$	8,0040	$Ba_2YbVO_6$	8,1570
$Ca_2TmUO_6$	8,3128	$Ba_2ScWO_6$	8,2476	$Ba_2YbWO_6$	8,4006
$Ca_2YbUO_6$	8,2694	$Ba_2VRuO_6$	7,9352	$Ba_2BiUO_6$	8,8539
$Ca_2LuUO_6$	8,2666	$Ba_2VWO_6$	8,1055	$Ba_2AmNbO_6$	8,5534
$Ca_2AmUO_6$	8,4695	$Ba_2VUO_6$	8,2837	$Ba_2AmMoO_6$	8,5096
$Sr_2AlMoO_6$	7,7686	$Ba_2CrUO_6$	8,2579	$Ba_2AmSbO_6$	8,5015
$Sr_2AlWO_6$	7,8596	$Ba_2FeVO_6$	7,9140	$Ba_2AmWO_6$	8,6006
$Sr_2AlOsO_6$	7,7354	$Ba_2FeWO_6$	8,1576	$Ba_2AmOsO_6$	8,4765
$Sr_2AlUO_6$	8,0379	$Ba_2GaReO_6$	8,0467	$Ba_2AmUO_6$	8,7789
$Sr_2ScUO_6$	8,2513	$Ba_2GaOsO_6$	8,0875	$Pb_2ScOsO_6$	8,2317
$Sr_2VWO_6$	7,9310	$Ba_2GaUO_6$	8,3900	$Pb_2ScUO_6$	8,5342
$Sr_2VUO_6$	8,1092	$Ba_2YWO_6$	8,4894	$Pb_2RhNbO_6$	8,3336
$Sr_2MnWO_6$	8,0465	$Ba_2RhVO_6$	8,0290	$Pb_2RhMoO_6$	8,2898
$Sr_2MnOsO_6$	7,9223	$Ba_2RhMoO_6$	8,1815	$Pb_2RhSbO_6$	8,2818
$Sr_2FeWO_6$	7,9831	$Ba_2RhWO_6$	8,2725	$Pb_2RhBiO_6$	8,4624
$Sr_2GaWO_6$	8,0372	$Ba_2RhOsO_6$	8,1483	$Pb_2DyUO_6$	8,7750
$Sr_2GaUO_6$	8,2155	$Ba_2InWO_6$	8,3499	$Pb_2HoUO_6$	8,7722
$Sr_2YUO_6$	8,4932	$Ba_2LaWO_6$	8,5879	$Pb_2ErUO_6$	8,7613
$Sr_2RhMoO_6$	8,0070	$Ba_2PrUO_6$	8,7786	$Pb_2TmUO_6$	8,7305
$Sr_2RhRuO_6$	7,9278	$Ba_2PmMoO_6$	8,4351	$Pb_2LuUO_6$	8,6844
$Sr_2RhWO_6$	8,0980	$Ba_2PmRuO_6$	8,3559	$Pb_2AmUO_6$	8,8872
$Sr_2RhOsO_6$	7,9739	$Ba_2PmSbO_6$	8,4270		
Пр. гр. $Pm(-)3m$ (алгоритм Orthogonal Matching Pursuit)					
$Ba_2VBiO_6$	4,3161	$Pb_2VlR_6$	3,9191	$Pb_2RhWO_6$	4,0431
$Ba_2MnBiO_6$	4,3068	$Pb_2CrMoO_6$	3,9810	$Pb_2InWO_6$	4,0573
$Ba_2FeBiO_6$	4,3309	$Pb_2CrRuO_6$	3,9102	$Pb_2InReO_6$	3,9909
$Ba_2GaVO_6$	3,8673	$Pb_2CrWO_6$	3,9975	$Pb_2InOsO_6$	3,9843
$Ba_2GaMoO_6$	3,9691	$Pb_2CrOsO_6$	3,9245	$Pb_2InIrO_6$	3,9771
$Ba_2GaWO_6$	3,9856	$Pb_2CrIrO_6$	3,9173	$Pb_2InBiO_6$	4,3587
$Pb_2AlSbO_6$	3,9782	$Pb_2MnMoO_6$	3,9734	$Pb_2LaRuO_6$	4,0798
$Pb_2AlBiO_6$	4,2428	$Pb_2MnRuO_6$	3,9027	$Pb_2PrRuO_6$	4,0145
$Pb_2VMoO_6$	3,9827	$Pb_2FeRuO_6$	3,9268	$Pb_2NdRuO_6$	4,0347
$Pb_2VRuO_6$	3,9120	$Pb_2GaMoO_6$	3,9536	$Pb_2BiSbO_6$	4,2570
$Pb_2VReO_6$	3,9328	$Pb_2GaIrO_6$	3,8900	$Pb_2BiReO_6$	4,1538
$Pb_2VOsO_6$	3,9262	$Pb_2GaBiO_6$	4,2715	$Pb_2BiOsO_6$	4,1473

Таблица 4

Прогноз параметров кристаллической тетрагональной (или гексагональной) решетки новых соединений состава  $A_2^{II}B^{III}B^{IV}O_6$

Состав	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	Состав	$a, \text{Å}$	$c, \text{Å}$
	Пр. гр. $I4/m$ (алгоритм Ridge)	Пр. гр. $I4/m$ (алгоритм Random Forest)		Пр. гр. $R(-)3$ (алгоритм SAND)	Пр. гр. $R(-)3$ (алгоритм ARD Regression)
$Sr_2GaMoO_6$	5,5927	7,8916	$Ba_2BiMoO_6$	6,0390	14,7809
	Пр. гр. $P6_3/mmc$ (алгоритм ARD Regression)	Пр. гр. $P6_3/mmc$ (алгоритм ARD Regression)	$Ba_2BiRuO_6$	6,0401	14,7499
$Ba_2VOsO_6$	5,8344	17,1422	$Ba_2BiWO_6$	6,0430	14,7879
$Ba_2Vlro_6$	5,8418	17,1460	$Ba_2BiReO_6$	6,0410	14,7602
$Ba_2CrVO_6$	5,7491	18,7279	$Ba_2BiOsO_6$	6,0433	14,7568

Table 4

Prediction of the parameters of the crystal tetragonal (or hexagonal) lattice of new compounds with the composition  $A_2^{II}B^{III}B^{IV}O_6$

Таблица 5

Продолжение Таблицы 5

Прогноз параметров кристаллической моноклинной решетки (пространственная группа  $P2_1/n$ ) новых соединений состава  $Ca_2^{II}B^{III}B^{IV}O_6$

Prediction of the parameters of the crystal monoclinic lattice (space group  $P2_1/n$ ) of new compounds of the composition  $Ca_2^{II}B^{III}B^{IV}O_6$

Состав	$a, \text{Å}^1$	$b, \text{Å}^2$	$c, \text{Å}^3$	$\beta, \text{град.}^4$
$Ca_2AlMoO_6$	5,3719	5,4116	7,5809	89,97
$Ca_2AlWO_6$	5,3777	5,4271	7,5174	90,00
$Ca_2AlReO_6$	5,3538	5,4073	7,5789	89,97
$Ca_2AlOsO_6$	5,3502	5,3898	7,5403	90,05
$Ca_2Allro_6$	5,3466	5,3922	7,5448	89,98
$Ca_2ScMoO_6$	5,4702	5,6066	7,8717	89,99
$Ca_2ScRuO_6$	5,4455	5,5646	7,8609	90,13
$Ca_2ScWO_6$	5,4760	5,6221	7,8082	89,94
$Ca_2ScReO_6$	5,4521	5,6023	7,8697	89,94
$Ca_2ScIrO_6$	5,4449	5,5872	7,8356	89,95
$Ca_2ScBiO_6$	5,5697	5,7895	8,0406	90,02
$Ca_2VSbO_6$	5,4507	5,5291	7,89310	90,03
$Ca_2VReO_6$	5,4077	5,5048	7,8582	90,06
$Ca_2VBiO_6$	5,5253	5,6919	8,0290	90,02
$Ca_2CrIrO_6$	5,3972	5,4665	7,6980	90,04
$Ca_2CrBiO_6$	5,5220	5,6687	7,9030	90,02
$Ca_2MnOsO_6$	5,4163	5,4920	7,6727	90,12
$Ca_2MnBiO_6$	5,5375	5,6966	7,8822	90,12
$Ca_2FeWO_6$	5,4430	5,5292	7,6840	90,05
$Ca_2GaWO_6$	5,4169	5,5060	7,6418	90,05
$Ca_2GaReO_6$	5,3930	5,4862	7,7034	90,06
$Ca_2GaOsO_6$	5,3894	5,4688	7,6647	90,05
$Ca_2Galro_6$	5,3858	5,4712	7,6693	90,0
$Ca_2GaBiO_6$	5,5106	5,6734	7,8743	90,00
$Ca_2YMoO_6$	5,5574	5,7506	8,0854	90,12
$Ca_2YWO_6$	5,5632	5,7660	8,0219	90,09
$Ca_2YReO_6$	5,5393	5,7462	8,0834	90,11

Состав	$a, \text{Å}^1$	$b, \text{Å}^2$	$c, \text{Å}^3$	$\beta, \text{град.}^4$
$Ca_2YOsO_6$	5,5357	5,7288	8,0448	90,07
$Ca_2Ylro_6$	5,5321	5,7312	8,0493	90,13
$Ca_2YBiO_6$	5,6569	5,9334	8,2543	89,78
$Ca_2RhNbO_6$	5,4593	5,5722	7,9340	90,06
$Ca_2RhSbO_6$	5,4675	5,5523	7,9194	90,03
$Ca_2RhTaO_6$	5,4593	5,5862	7,8944	90,05
$Ca_2RhBiO_6$	5,5421	5,7152	8,0553	90,03
$Ca_2InMoO_6$	5,4992	5,6577	7,9415	90,01
$Ca_2InRuO_6$	5,4745	5,6157	7,9307	90,06
$Ca_2InWO_6$	5,5050	5,6732	7,8780	90,12
$Ca_2InReO_6$	5,4811	5,6534	7,9396	90,11
$Ca_2IrMoO_6$	5,4739	5,6383	7,9055	90,07
$Ca_2BiMoO_6$	5,5987	5,8405	8,1105	89,97
$Ca_2LaMoO_6$	5,6370	5,8731	8,0823	90,09
$Ca_2LaWO_6$	5,6428	5,8886	8,0188	90,03
$Ca_2LaReO_6$	5,6190	5,8688	8,0803	90,09
$Ca_2LaOsO_6$	5,6154	5,8514	8,0417	90,09
$Ca_2Lalro_6$	5,6118	5,8538	8,0462	90,11
$Ca_2LaBiO_6$	5,7366	6,0560	8,2512	90,11
$Ca_2PrVO_6$	5,5790	5,7735	8,2133	90,11
$Ca_2PrMoO_6$	5,6126	5,8341	8,1946	90,10
$Ca_2PrWO_6$	5,6184	5,8496	8,1311	90,13
$Ca_2PrReO_6$	5,5945	5,8298	8,1927	90,10
$Ca_2PrOsO_6$	5,5909	5,8124	8,1540	90,09
$Ca_2PrIrO_6$	5,5873	5,8148	8,1586	90,09
$Ca_2PrBiO_6$	5,7121	6,0170	8,3636	90,11
$Ca_2NdVO_6$	5,5752	5,7670	8,2429	90,09
$Ca_2NdMoO_6$	5,6088	5,8276	8,2242	90,19
$Ca_2NdWO_6$	5,6146	5,8431	8,1607	90,13
$Ca_2NdReO_6$	5,5907	5,8233	8,2223	90,18

Продолжение Таблицы 5

Продолжение Таблицы 5

Состав	$a, \text{Å}^1$	$b, \text{Å}^2$	$c, \text{Å}^3$	$\beta, \text{град.}^4$	Состав	$a, \text{Å}^1$	$b, \text{Å}^2$	$c, \text{Å}^3$	$\beta, \text{град.}^4$
$\text{Ca}_2\text{NdOsO}_6$	5,5871	5,8059	8,1836	90,08	$\text{Ca}_2\text{HoMoO}_6$	5,5629	5,7515	8,0893	90,12
$\text{Ca}_2\text{NdIrO}_6$	5,5835	5,8083	8,1882	90,08	$\text{Ca}_2\text{HoWO}_6$	5,5687	5,7670	8,0258	90,08
$\text{Ca}_2\text{NdBiO}_6$	5,7083	6,0105	8,3932	89,87	$\text{Ca}_2\text{HoReO}_6$	5,5448	5,7472	8,0874	90,10
$\text{Ca}_2\text{PmVO}_6$	5,5681	5,7550	8,0263	90,06	$\text{Ca}_2\text{HoOsO}_6$	5,5412	5,7297	8,0488	90,12
$\text{Ca}_2\text{PmNbO}_6$	5,6184	5,8555	8,0553	90,06	$\text{Ca}_2\text{HoIrO}_6$	5,5376	5,7321	8,0533	90,12
$\text{Ca}_2\text{PmMoO}_6$	5,6017	5,8156	8,0076	90,18	$\text{Ca}_2\text{HoBiO}_6$	5,6624	5,9343	8,2583	89,75
$\text{Ca}_2\text{PmRuO}_6$	5,5770	5,7736	7,9968	90,05	$\text{Ca}_2\text{ErVO}_6$	5,5233	5,6807	8,0794	90,0
$\text{Ca}_2\text{PmSbO}_6$	5,6267	5,8356	8,0406	89,87	$\text{Ca}_2\text{ErMoO}_6$	5,5569	5,7413	8,0607	90,15
$\text{Ca}_2\text{PmTaO}_6$	5,6184	5,8694	8,0157	90,06	$\text{Ca}_2\text{ErWO}_6$	5,5627	5,7567	7,9972	90,08
$\text{Ca}_2\text{PmWO}_6$	5,6075	5,8310	7,9441	90,12	$\text{Ca}_2\text{ErReO}_6$	5,5388	5,7369	8,0587	90,15
$\text{Ca}_2\text{PmReO}_6$	5,5837	5,8112	8,0057	90,19	$\text{Ca}_2\text{ErOsO}_6$	5,5352	5,7195	8,0201	90,20
$\text{Ca}_2\text{PmOsO}_6$	5,5800	5,7938	7,9670	90,05	$\text{Ca}_2\text{ErIrO}_6$	5,5316	5,7219	8,0246	90,20
$\text{Ca}_2\text{PmIrO}_6$	5,5764	5,7962	7,9716	90,05	$\text{Ca}_2\text{ErBiO}_6$	5,6564	5,9241	8,2296	89,72
$\text{Ca}_2\text{PmBiO}_6$	5,7012	5,9984	8,1766	89,87	$\text{Ca}_2\text{TmVO}_6$	5,5179	5,6714	8,0797	90,0
$\text{Ca}_2\text{SmVO}_6$	5,5619	5,7438	8,3538	90,0	$\text{Ca}_2\text{TmMoO}_6$	5,5515	5,7320	8,0610	90,15
$\text{Ca}_2\text{SmMoO}_6$	5,5955	5,8044	8,3351	89,87	$\text{Ca}_2\text{TmWO}_6$	5,5573	5,7475	7,9974	90,09
$\text{Ca}_2\text{SmWO}_6$	5,6013	5,8199	8,2716	89,91	$\text{Ca}_2\text{TmReO}_6$	5,5334	5,7276	8,0590	90,15
$\text{Ca}_2\text{SmReO}_6$	5,5774	5,8001	8,3332	89,86	$\text{Ca}_2\text{TmOsO}_6$	5,5298	5,7102	8,0204	90,10
$\text{Ca}_2\text{SmOsO}_6$	5,5738	5,7826	8,2945	90,02	$\text{Ca}_2\text{TmIrO}_6$	5,5262	5,7126	8,0249	90,23
$\text{Ca}_2\text{SmIrO}_6$	5,5702	5,7850	8,2991	90,03	$\text{Ca}_2\text{TmBiO}_6$	5,6510	5,9148	8,2299	89,82
$\text{Ca}_2\text{SmBiO}_6$	5,6950	5,9872	8,5040	90,0	$\text{Ca}_2\text{YbVO}_6$	5,5136	5,6602	8,0789	90,12
$\text{Ca}_2\text{EuVO}_6$	5,5581	5,7336	8,1583	90,02	$\text{Ca}_2\text{YbMoO}_6$	5,5471	5,7208	8,0601	90,18
$\text{Ca}_2\text{EuMoO}_6$	5,5917	5,7942	8,1396	90,17	$\text{Ca}_2\text{YbWO}_6$	5,5529	5,7363	7,9966	90,12
$\text{Ca}_2\text{EuWO}_6$	5,5975	5,8097	8,0761	90,12	$\text{Ca}_2\text{YbReO}_6$	5,5291	5,7165	8,0582	90,18
$\text{Ca}_2\text{EuReO}_6$	5,5736	5,7899	8,1376	90,17	$\text{Ca}_2\text{YbOsO}_6$	5,5255	5,6991	8,0196	90,10
$\text{Ca}_2\text{EuOsO}_6$	5,5700	5,7724	8,0990	89,97	$\text{Ca}_2\text{YbIrO}_6$	5,5219	5,7015	8,0241	90,19
$\text{Ca}_2\text{EuIrO}_6$	5,5664	5,7748	8,1035	90,01	$\text{Ca}_2\text{YbBiO}_6$	5,6467	5,9037	8,2291	89,75
$\text{Ca}_2\text{EuBiO}_6$	5,6912	5,9770	8,3085	89,91	$\text{Ca}_2\text{LuVO}_6$	5,5054	5,6537	8,0387	90,14
$\text{Ca}_2\text{GdMoO}_6$	5,5824	5,7859	8,1187	90,17	$\text{Ca}_2\text{LuMoO}_6$	5,5390	5,7143	8,0200	90,10
$\text{Ca}_2\text{GdWO}_6$	5,5882	5,8013	8,0552	90,21	$\text{Ca}_2\text{LuWO}_6$	5,5448	5,7298	7,9565	90,09
$\text{Ca}_2\text{GdReO}_6$	5,5643	5,7815	8,1168	90,17	$\text{Ca}_2\text{LuReO}_6$	5,5209	5,7100	8,0180	90,10
$\text{Ca}_2\text{GdOsO}_6$	5,5607	5,7641	8,0781	89,97	$\text{Ca}_2\text{LuOsO}_6$	5,5173	5,6926	7,9794	90,05
$\text{Ca}_2\text{GdIrO}_6$	5,5571	5,7665	8,0827	90,08	$\text{Ca}_2\text{LuIrO}_6$	5,5137	5,6950	7,9839	90,19
$\text{Ca}_2\text{GdBIO}_6$	5,6819	5,9687	8,2877	89,91	$\text{Ca}_2\text{LuBiO}_6$	5,6385	5,8972	8,1889	90,09
$\text{Ca}_2\text{TbVO}_6$	5,5410	5,7113	8,1307	90,11	$\text{Ca}_2\text{AmVO}_6$	5,5799	5,7596	8,1853	90,03
$\text{Ca}_2\text{TbMoO}_6$	5,5745	5,7719	8,1120	90,14	$\text{Ca}_2\text{AmNbO}_6$	5,6302	5,8601	8,2143	90,03
$\text{Ca}_2\text{TbSbO}_6$	5,5995	5,7919	8,1449	89,75	$\text{Ca}_2\text{AmMoO}_6$	5,6135	5,8202	8,1666	90,13
$\text{Ca}_2\text{TbWO}_6$	5,5803	5,7874	8,0484	90,17	$\text{Ca}_2\text{AmRuO}_6$	5,5889	5,7782	8,1558	90,13
$\text{Ca}_2\text{TbReO}_6$	5,5565	5,7676	8,1100	90,14	$\text{Ca}_2\text{AmSbO}_6$	5,6385	5,8402	8,1996	89,79
$\text{Ca}_2\text{TbOsO}_6$	5,5529	5,7501	8,0714	90,05	$\text{Ca}_2\text{AmTaO}_6$	5,6302	5,8741	8,1747	90,01
$\text{Ca}_2\text{TbIrO}_6$	5,5493	5,7525	8,0759	90,10	$\text{Ca}_2\text{AmWO}_6$	5,6193	5,8357	8,1031	90,06
$\text{Ca}_2\text{TbBiO}_6$	5,6740	5,9548	8,2809	90,04	$\text{Ca}_2\text{AmReO}_6$	5,5955	5,8159	8,1647	90,08
$\text{Ca}_2\text{DyVO}_6$	5,5350	5,7011	8,1004	90,0	$\text{Ca}_2\text{AmOsO}_6$	5,5919	5,7984	8,1260	90,01
$\text{Ca}_2\text{DyMoO}_6$	5,5686	5,7617	8,0816	90,12	$\text{Ca}_2\text{AmIrO}_6$	5,5883	5,8008	8,1306	90,10
$\text{Ca}_2\text{DyWO}_6$	5,5744	5,7772	8,0181	90,08	$\text{Ca}_2\text{AmBiO}_6$	5,7130	6,0030	8,3356	89,85
$\text{Ca}_2\text{DyReO}_6$	5,5505	5,7574	8,0797	90,10					
$\text{Ca}_2\text{DyOsO}_6$	5,5469	5,7399	8,0411	90,12					
$\text{Ca}_2\text{DyIrO}_6$	5,5433	5,7423	8,0456	90,12					
$\text{Ca}_2\text{DyBiO}_6$	5,6681	5,9445	8,2506	89,75					
$\text{Ca}_2\text{HoVO}_6$	5,5293	5,6909	8,1081	90,0					

<sup>1</sup> — алгоритм ARD Regression, <sup>2</sup> — алгоритм Convex with loop reduction, <sup>3</sup> — алгоритм Ridge, <sup>4</sup> — алгоритм SAND.

Таблица 6

Продолжение Таблицы 6

Прогноз параметров кристаллической моноклинной решетки (пространственная группа $P2_1/n$ ) новых соединений состава $A_2^{II}B^{III}B^VO_6$ (A — Sr, Ba или Pb)					Состав	$a, \text{Å}^1$	$b, \text{Å}^2$	$c, \text{Å}^3$	$\beta, \text{град.}^4$
Table 6					Sr <sub>2</sub> GdWO <sub>6</sub>	5,8183	5,8662	8,1761	90,20
Prediction of the parameters of the crystal monoclinic lattice (space group $P2_1/n$ ) of new compounds of the composition $A_2^{II}B^{III}B^VO_6$ (A — Sr, Ba or Pb) .					Sr <sub>2</sub> GdOsO <sub>6</sub>	5,7908	5,8289	8,1990	90,26
Состав	$a, \text{Å}^1$	$b, \text{Å}^2$	$c, \text{Å}^3$	$\beta, \text{град.}^4$	Sr <sub>2</sub> TbMoO <sub>6</sub>	5,8046	5,8368	8,2329	90,22
Sr <sub>2</sub> ScWO <sub>6</sub>	5,7061	5,6869	7,9291	90,03	Sr <sub>2</sub> TbRuO <sub>6</sub>	5,7799	5,7948	8,2221	90,22
Sr <sub>2</sub> YWO <sub>6</sub>	5,7933	5,8309	8,1428	90,21	Sr <sub>2</sub> TbWO <sub>6</sub>	5,8104	5,8522	8,1694	90,20
Sr <sub>2</sub> YBiO <sub>6</sub>	5,8870	5,9982	8,3752	90,09	Sr <sub>2</sub> TbOsO <sub>6</sub>	5,7829	5,8150	8,1923	90,20
Sr <sub>2</sub> InBiO <sub>6</sub>	5,8288	5,9054	8,2314	89,99	Sr <sub>2</sub> DyVO <sub>6</sub>	5,7651	5,7659	8,2213	90,15
Sr <sub>2</sub> LaMoO <sub>6</sub>	5,8671	5,9380	8,2032	90,21	Sr <sub>2</sub> DyWO <sub>6</sub>	5,8045	5,8420	8,1390	90,23
Sr <sub>2</sub> LaWO <sub>6</sub>	5,8729	5,9535	8,1397	90,51	Sr <sub>2</sub> DyOsO <sub>6</sub>	5,7770	5,8048	8,1620	90,19
Sr <sub>2</sub> LaReO <sub>6</sub>	5,8490	5,9336	8,2012	90,17	Sr <sub>2</sub> HoVO <sub>6</sub>	5,7594	5,7557	8,2290	90,15
Sr <sub>2</sub> LaOsO <sub>6</sub>	5,8454	5,9162	8,1626	90,22	Sr <sub>2</sub> HoWO <sub>6</sub>	5,7987	5,8318	8,1467	90,23
Sr <sub>2</sub> LaIrO <sub>6</sub>	5,8419	5,9186	8,1671	90,34	Sr <sub>2</sub> HoOsO <sub>6</sub>	5,7713	5,7946	8,1697	90,19
Sr <sub>2</sub> LaBiO <sub>6</sub>	5,9666	6,1208	8,3721	90,19	Sr <sub>2</sub> ErOsO <sub>6</sub>	5,7653	5,7843	8,1410	90,21
Sr <sub>2</sub> PrMoO <sub>6</sub>	5,8427	5,8990	8,3155	90,22	Sr <sub>2</sub> TmVO <sub>6</sub>	5,7480	5,7362	8,2006	90,15
Sr <sub>2</sub> PrWO <sub>6</sub>	5,8485	5,9145	8,252	90,07	Sr <sub>2</sub> TmNbO <sub>6</sub>	5,7982	5,8368	8,2295	90,15
Sr <sub>2</sub> PrReO <sub>6</sub>	5,8246	5,8946	8,3136	90,20	Sr <sub>2</sub> TmMoO <sub>6</sub>	5,7816	5,7968	8,1819	90,21
Sr <sub>2</sub> PrOsO <sub>6</sub>	5,8210	5,8772	8,2749	90,22	Sr <sub>2</sub> TmWO <sub>6</sub>	5,7874	5,8123	8,1183	90,16
Sr <sub>2</sub> PrIrO <sub>6</sub>	5,8174	5,8796	8,2795	90,27	Sr <sub>2</sub> TmOsO <sub>6</sub>	5,7599	5,7751	8,1413	90,20
Sr <sub>2</sub> NdNbO <sub>6</sub>	5,8556	5,9324	8,3928	90,19	Sr <sub>2</sub> YbVO <sub>6</sub>	5,7437	5,7251	8,1998	90,12
Sr <sub>2</sub> NdMoO <sub>6</sub>	5,8389	5,8925	8,3451	90,21	Sr <sub>2</sub> YbWO <sub>6</sub>	5,7830	5,8012	8,1175	90,16
Sr <sub>2</sub> NdWO <sub>6</sub>	5,8447	5,9080	8,2816	90,24	Sr <sub>2</sub> YbOsO <sub>6</sub>	5,7556	5,7639	8,1405	90,16
Sr <sub>2</sub> NdReO <sub>6</sub>	5,8208	5,8881	8,3432	90,22	Sr <sub>2</sub> LuMoO <sub>6</sub>	5,7691	5,7792	8,1409	90,20
Sr <sub>2</sub> NdOsO <sub>6</sub>	5,8172	5,87077	8,3045	90,22	Sr <sub>2</sub> LuWO <sub>6</sub>	5,7748	5,7947	8,0774	90,11
Sr <sub>2</sub> NdIrO <sub>6</sub>	5,8136	5,8731	8,3091	90,29	Sr <sub>2</sub> LuOsO <sub>6</sub>	5,7474	5,7574	8,1003	90,18
Sr <sub>2</sub> PmNbO <sub>6</sub>	5,8485	5,9203	8,1762	90,19	Sr <sub>2</sub> BiReO <sub>6</sub>	5,8337	5,9318	8,2293	89,91
Sr <sub>2</sub> PmMoO <sub>6</sub>	5,8318	5,8804	8,1285	90,22	Sr <sub>2</sub> AmVO <sub>6</sub>	5,8100	5,8244	8,3062	90,19
Sr <sub>2</sub> PmRuO <sub>6</sub>	5,8071	5,8384	8,1177	90,26	Sr <sub>2</sub> AmNbO <sub>6</sub>	5,8603	5,9250	8,3352	90,19
Sr <sub>2</sub> PmSbO <sub>6</sub>	5,8567	5,9004	8,1615	90,29	Sr <sub>2</sub> AmMoO <sub>6</sub>	5,8436	5,8851	8,2875	90,21
Sr <sub>2</sub> PmTaO <sub>6</sub>	5,8485	5,9343	8,1366	90,20	Sr <sub>2</sub> AmRuO <sub>6</sub>	5,8189	5,8431	8,2767	90,16
Sr <sub>2</sub> PmWO <sub>6</sub>	5,8376	5,8959	8,0650	90,23	Sr <sub>2</sub> AmSbO <sub>6</sub>	5,8686	5,9051	8,3205	90,19
Sr <sub>2</sub> PmReO <sub>6</sub>	5,8137	5,8761	8,1266	90,23	Sr <sub>2</sub> AmTaO <sub>6</sub>	5,8603	5,9389	8,2956	90,17
Sr <sub>2</sub> PmOsO <sub>6</sub>	5,8101	5,8586	8,0879	90,22	Sr <sub>2</sub> AmReO <sub>6</sub>	5,8255	5,8807	8,2856	90,15
Sr <sub>2</sub> PmIrO <sub>6</sub>	5,8065	5,8610	8,0925	90,27	Sr <sub>2</sub> AmOsO <sub>6</sub>	5,8219	5,8633	8,2469	90,16
Sr <sub>2</sub> PmBiO <sub>6</sub>	5,9313	6,0632	8,2975	90,19	Sr <sub>2</sub> AmIrO <sub>6</sub>	5,8183	5,8657	8,2515	90,19
Sr <sub>2</sub> SmVO <sub>6</sub>	5,7920	5,8087	8,4747	90,21	Sr <sub>2</sub> AmBiO <sub>6</sub>	5,9431	6,0679	8,4565	90,14
Sr <sub>2</sub> SmMoO <sub>6</sub>	5,8256	5,8693	8,4560	90,23	Ba <sub>2</sub> PrReO <sub>6</sub>	5,9751	6,0048	8,4817	90,04
Sr <sub>2</sub> SmRuO <sub>6</sub>	5,8009	5,8273	8,4452	90,30	Ba <sub>2</sub> PmReO <sub>6</sub>	5,9642	5,9863	8,2947	90,04
Sr <sub>2</sub> SmWO <sub>6</sub>	5,8314	5,8847	8,3925	90,18	Ba <sub>2</sub> PmIrO <sub>6</sub>	5,9570	5,9712	8,2606	90,02
Sr <sub>2</sub> SmReO <sub>6</sub>	5,8075	5,8649	8,4541	90,22	Ba <sub>2</sub> AmReO <sub>6</sub>	5,9760	5,9909	8,4537	90,02
Sr <sub>2</sub> SmOsO <sub>6</sub>	5,8039	5,8475	8,4154	90,18	Pb <sub>2</sub> DyIrO <sub>6</sub>	6,0769	5,7554	7,7063	90,0
Sr <sub>2</sub> EuWO <sub>6</sub>	5,8276	5,8745	8,1970	90,20	Pb <sub>2</sub> HoIrO <sub>6</sub>	6,0712	5,7452	7,7140	90,0
Sr <sub>2</sub> EuReO <sub>6</sub>	5,8037	5,8547	8,2585	90,23	Pb <sub>2</sub> ErIrO <sub>6</sub>	6,0652	5,7350	7,6854	90,04
Sr <sub>2</sub> EuOsO <sub>6</sub>	5,8001	5,8373	8,2199	90,28					

<sup>1</sup> — алгоритм ARD Regression, <sup>2</sup> — алгоритм Convex with loop reduction, <sup>3</sup> — алгоритм Ridge, <sup>4</sup> — алгоритм SAND

Таблица 7

Прогноз параметров кристаллической моноклинной решетки (пространственная группа  $I2/m$ ) новых соединений состава  $A_2^{II}B^{III}B'^V O_6$

Table 7

Prediction of the parameters of the crystal monoclinic lattice (space group  $I2/m$ ) of new compounds of the composition  $A_2^{II}B^{III}B'^V O_6$

Состав	$a, \text{Å}^1$	$b, \text{Å}^2$	$c, \text{Å}^3$	$\beta, \text{град.}^4$
Ba <sub>2</sub> LaVO <sub>6</sub>	6,0719	5,9619	8,0865	96,14
Ba <sub>2</sub> PrVO <sub>6</sub>	6,0405	5,9347	8,0366	95,96
Ba <sub>2</sub> PmBiO <sub>6</sub>	6,1496	6,1293	8,6383	90,16
Ba <sub>2</sub> SmVO <sub>6</sub>	6,0022	5,9067	7,9832	95,88
Ba <sub>2</sub> SmBiO <sub>6</sub>	6,1338	6,1190	8,6532	89,99
Ba <sub>2</sub> GdBiO <sub>6</sub>	6,1052	6,0920	8,6003	90,13
Ba <sub>2</sub> NpBiO <sub>6</sub>	6,1126	5,7853	8,6922	89,90
Ba <sub>2</sub> PuBiO <sub>6</sub>	6,1170	5,8743	8,6877	89,94
Ba <sub>2</sub> AmVO <sub>6</sub>	5,9485	5,6029	7,9832	95,77
Ba <sub>2</sub> AmBiO <sub>6</sub>	6,0801	5,8152	8,6531	89,89
Pb <sub>2</sub> EuNbO <sub>6</sub>	5,6388	6,0449	8,2646	90,12
Pb <sub>2</sub> EuMoO <sub>6</sub>	5,6166	5,8858	8,1018	93,50
Pb <sub>2</sub> EuTaO <sub>6</sub>	5,6446	6,0645	8,2677	90,12
Pb <sub>2</sub> TbMoO <sub>6</sub>	5,5839	5,8143	8,0534	93,49
Pb <sub>2</sub> TbReO <sub>6</sub>	5,5793	5,8839	7,9724	91,33
Pb <sub>2</sub> DyNbO <sub>6</sub>	5,5948	5,9673	8,2316	90,12
Pb <sub>2</sub> DyMoO <sub>6</sub>	5,5725	5,8082	8,0688	93,50
Pb <sub>2</sub> DyRuO <sub>6</sub>	5,5515	5,7632	7,9731	91,68
Pb <sub>2</sub> DyTaO <sub>6</sub>	5,6005	5,9868	8,2347	90,12
Pb <sub>2</sub> DyWO <sub>6</sub>	5,5815	5,8445	8,3123	92,94
Pb <sub>2</sub> DyOsO <sub>6</sub>	5,5607	5,9981	8,2088	87,64
Pb <sub>2</sub> HoNbO <sub>6</sub>	5,5873	5,9672	8,1806	90,11
Pb <sub>2</sub> HoMoO <sub>6</sub>	5,5650	5,8081	8,0178	93,49
Pb <sub>2</sub> HoRuO <sub>6</sub>	5,5440	5,7631	7,9221	91,66
Pb <sub>2</sub> HoTaO <sub>6</sub>	5,5930	5,9868	8,1837	90,11
Pb <sub>2</sub> HoWO <sub>6</sub>	5,5740	5,8445	8,2613	92,93
Pb <sub>2</sub> HoOsO <sub>6</sub>	5,5532	5,9981	8,1578	87,63
Pb <sub>2</sub> ErNbO <sub>6</sub>	5,5736	5,9421	8,1656	90,10
Pb <sub>2</sub> ErMoO <sub>6</sub>	5,5513	5,7830	8,0028	93,48
Pb <sub>2</sub> ErRuO <sub>6</sub>	5,5303	5,7380	7,9071	91,66
Pb <sub>2</sub> ErTaO <sub>6</sub>	5,5793	5,9617	8,1687	90,10
Pb <sub>2</sub> ErWO <sub>6</sub>	5,5603	5,8194	8,2463	92,93
Pb <sub>2</sub> ErOsO <sub>6</sub>	5,5395	5,9730	8,1428	87,62
Pb <sub>2</sub> TmMoO <sub>6</sub>	5,5376	5,7801	7,9998	93,48
Pb <sub>2</sub> TmRuO <sub>6</sub>	5,5166	5,7350	7,9041	91,65
Pb <sub>2</sub> TmWO <sub>6</sub>	5,5466	5,8165	8,2433	92,92
Pb <sub>2</sub> TmOsO <sub>6</sub>	5,5258	5,9700	8,1398	87,62
Pb <sub>2</sub> YbVO <sub>6</sub>	5,5315	5,9095	7,5742	95,81
Pb <sub>2</sub> YbNbO <sub>6</sub>	5,5851	6,0199	8,0972	90,01
Pb <sub>2</sub> YbMoO <sub>6</sub>	5,5628	5,8608	7,9344	93,40
Pb <sub>2</sub> YbWO <sub>6</sub>	5,5718	5,8972	8,1779	92,84

Продолжение Таблицы 7

Состав	$a, \text{Å}^1$	$b, \text{Å}^2$	$c, \text{Å}^3$	$\beta, \text{град.}^4$
Pb <sub>2</sub> YbReO <sub>6</sub>	5,5583	5,9303	7,8534	91,24
Pb <sub>2</sub> YbOsO <sub>6</sub>	5,5510	6,0508	8,0744	87,54
Pb <sub>2</sub> LuNbO <sub>6</sub>	5,5566	5,9123	8,0915	90,10
Pb <sub>2</sub> LuMoO <sub>6</sub>	5,5344	5,7532	7,9287	93,48
Pb <sub>2</sub> LuRuO <sub>6</sub>	5,5134	5,7082	7,8330	91,66
Pb <sub>2</sub> LuTaO <sub>6</sub>	5,5624	5,9319	8,0946	90,10
Pb <sub>2</sub> LuWO <sub>6</sub>	5,5434	5,7896	8,1722	92,93
Pb <sub>2</sub> LuOsO <sub>6</sub>	5,5225	5,9432	8,0687	87,62

<sup>1</sup> — алгоритм Elastic net, <sup>2</sup> — алгоритм Orthogonal Matching Pursuit, <sup>3</sup> — алгоритм Linear Regression, <sup>4</sup> — алгоритм ARD Regression

Таблица 8

Прогноз параметров кристаллической решетки новых соединений состава  $A_2^{II}B^{III}B'^V O_6$  с пространственной группой  $Pbnm$

Table 8

Prediction of crystal lattice parameters for new compounds of composition  $A_2^{II}B^{III}B'^V O_6$  with space group  $Pbnm$

Состав	$a, \text{Å}^1$	$b, \text{Å}^2$	$c, \text{Å}^3$
Ca <sub>2</sub> VRuO <sub>6</sub>	5,4450	5,4891	7,7336
Ca <sub>2</sub> VWO <sub>6</sub>	5,4426	5,4942	7,6906
Ca <sub>2</sub> VUO <sub>6</sub>	5,9439	6,0479	8,5932
Ca <sub>2</sub> CrVO <sub>6</sub>	5,4291	5,3793	7,6249
Ca <sub>2</sub> CrRuO <sub>6</sub>	5,4040	5,3713	7,5380
Ca <sub>2</sub> CrUO <sub>6</sub>	5,9030	5,9301	8,3976
Ca <sub>2</sub> MnVO <sub>6</sub>	5,4164	5,5160	7,7218
Ca <sub>2</sub> MnMoO <sub>6</sub>	5,3955	5,5080	7,6164
Ca <sub>2</sub> MnRuO <sub>6</sub>	5,3914	5,5080	7,6348
Ca <sub>2</sub> MnUO <sub>6</sub>	5,8903	6,0668	8,4945
Ca <sub>2</sub> FeVO <sub>6</sub>	5,4461	5,5788	7,8200
Ca <sub>2</sub> FeUO <sub>6</sub>	5,9200	6,1296	8,5927
Ca <sub>2</sub> GaVO <sub>6</sub>	5,4429	5,5908	7,8498
Ca <sub>2</sub> GaMoO <sub>6</sub>	5,4220	5,5828	7,7444
Ca <sub>2</sub> GaRuO <sub>6</sub>	5,4179	5,5828	7,7629
Ca <sub>2</sub> RhUO <sub>6</sub>	5,9260	6,2269	8,6739
Ca <sub>2</sub> InVO <sub>6</sub>	5,5092	5,7359	7,9966
Ca <sub>2</sub> BiMoO <sub>6</sub>	5,5112	5,7493	7,8680
Ca <sub>2</sub> BiRuO <sub>6</sub>	5,5070	5,7493	7,8865
Ca <sub>2</sub> BiWO <sub>6</sub>	5,5047	5,7543	7,8435
Ca <sub>2</sub> BiReO <sub>6</sub>	5,5133	5,7837	7,9952
Ca <sub>2</sub> BiUO <sub>6</sub>	6,0059	6,3081	8,7461
Sr <sub>2</sub> VIrO <sub>6</sub>	5,5160	5,5495	7,7425
Sr <sub>2</sub> RhUO <sub>6</sub>	6,0257	6,2621	8,6739

<sup>1</sup> — алгоритм ARD Regression, <sup>2</sup> — алгоритм Orthogonal Matching Pursuit, <sup>3</sup> — алгоритм Orthogonal Matching Pursuit.

(ARD) Regression) [42]. В табл. 3 – 8 представлена часть прогнозов еще не полученных соединений  $A_2BB'O_6$  и оценка параметров их кристаллической решетки.

## Выводы

Анализ полученных результатов показывает, что большинство двойных перовскитов с кальцием и стронцием имеют моноклинное искажение (пр. гр.  $P2_1/n$ ). Для соединений с барием характерно удвоение идеальной кубической решетки (пр. гр.  $Fm(-)3m$ ). Точность прогнозов (в режиме скользящего контроля) типа искажения перовскитоподобной ячейки была не ниже 74 %. Точность оценки линейных параметров решетки была в пределах  $\pm 0,0120 - 0,8264 \text{ \AA}$ , а точность для углов  $\beta$  при моноклинном искажении решетки —  $\pm 0,08 - 0,74$  град.

Полученные прогнозы позволяют уменьшить количество комбинаций элементов при экспериментальном поиске перовскитоподобных соединений с желаемой пространственной группой, что сократит время и затраты. Для специалистов по квантово-механическим расчетам появляется возможность, хотя и приближенно, зная пространственную группу и параметры решетки, определить расположение атомов в кристаллической решетке еще не полученных соединений, что в дальнейшем позволит рассчитать некоторые их физические свойства.

Информация о составе, пространственной группе и параметрах решетки еще не полученных предсказанных соединений после публикации статьи будет введена в базу прогнозов и расширит функциональные возможности БД Фазы (<http://phases.imet-db.ru/>). Пользователь этой БД, кроме данных об уже исследованных неорганических соединениях, сможет получить и результаты наших расчетов.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты 20-01-00609 и 18-07-00080. Работа выполнялась по государственному заданию № 075-00328-21-00.*

## Литература

1. Corredor L.T., Landinez Tellez D.A., Martinez Buitrago D., Albino Aguiar J., Roa-Rojas J. Magnetic properties and structural characterization of  $Sr_2RuHoO_6$  complex perovskite. *Physica B: Condensed Matter*, 2010, v. 407, no. 16, pp. 3085 – 3088, doi: 10.1016/j.physb.2011.12.031.
2. Hinatsu Y., Doi Y., Wakeshima M. Antiferromagnetic transitions of osmium-containing rare earth double perovskites  $Ba_2LnOsO_6$  ( $Ln =$  rare earths). *Journal of Solid State Chemistry*, 2013, v. 206, pp. 300 – 307, doi: 10.1016/j.jssc.2013.08.020.
3. Li M.-R., Retuerto M., Deng Z., Stephens P.W., Croft M., Huang Q., Wu H., Deng X., Kotliar G., Sanchez-Benitez J., Hadermann J., Walker D., Greenblatt M. Giant magnetoresistance in the half-metallic double-perovskite ferrimagnet  $Mn_2FeReO_6$ . *Angewandte Chemie International Edition*, 2015, v. 54, no. 41, pp. 12069 – 12073, doi: 10.1002/anie.201506456.
4. Sahnoun O., Bouhani-Benzi H., Sahnoun M., Driz M. Magnetic and thermoelectric properties of ordered double perovskite  $Ba_2FeMoO_6$ . *Journal of Alloys and Compounds*, 2017, v. 714, pp. 704 – 708, doi: 10.1016/j.jallcom.2017.04.180.
5. Aguirre M.H., Logvinovich D., Bocher L., Robert R., Ebbinghaus S.G., Weidenkaff A. High-temperature thermoelectric properties of  $Sr_2RuYO_6$  and  $Sr_2RuErO_6$  double perovskites influenced by structure and microstructure. *Acta Materialia*, 2009, v. 57, no. 1, pp. 108 – 115, doi: 10.1016/j.actamat.2008.09.003.
6. Sri Gyan D., Dwivedi A., Roy P., Maiti T. Synthesis and thermoelectric properties of  $Ba_2TiFeO_6$  double perovskite with insight into the crystal structure. *Ferroelectrics*, 2018, v. 536, no. 1, pp. 146 – 155, doi: 10.1080/00150193.2018.1528922.
7. Murugesan G., Nithya R., Kalainathan S. Colossal dielectric behaviour of  $Sr_2TiMnO_{6-\delta}$  single crystals. *Journal of Crystal Growth*, 2020, v. 530, pp. 125179/1 – 6, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2019.125179.
8. Gorodea I., Goanta M., Toma M. Impact of A cation size of double perovskite  $A_2AlTaO_6$  ( $A = Ca, Sr, Ba$ ) on dielectric and catalytic properties. *Journal of Alloys and Compounds*, 2015, v. 632, no. 1 – 2, pp. 805 – 809, doi: 10.1016/j.jallcom.2015.01.310.
9. Feraru S., Samoila P., Borhan A.I., Ignat M., Iordan A.R., Palamaru M.N. Synthesis, characterization of double perovskite  $Ca_2MSbO_6$  ( $M = Dy, Fe, Cr, Al$ ) materials via sol-gel auto-combustion and their catalytic properties. *Materials Characterization*, 2013, v. 84, pp. 112 – 119, doi: 10.1016/j.matchar.2013.07.005.
10. Huang Y.-H., Liang G., Croft M., Lehtimaki M., Karppinen M., Goodenough J.B. Double-perovskite anode materials  $Sr_2MMoO_6$  ( $M = Co, Ni$ ) for solid oxide fuel cells. *Chemistry of materials*, 2009, v. 21, no. 10, pp. 2319 – 2326, doi: 10.1021/cm8033643.
11. Rath M.K., Lee K.-T. Characterization of novel  $Ba_2LnMoO_6$  ( $Ln = Pr$  and  $Nd$ ) double perovskite as the anode material for hydrocarbon-fueled solid oxide fuel cells. *Journal of Alloys and Compounds*, 2018, v. 737, pp. 152 – 159, doi: 10.1016/j.jallcom.2017.12.090.
12. Ravi S. Multiferroism in  $Pr_2FeCrO_6$  perovskite. *Journal of Rare Earths*, 2018, v. 36, no. 11, pp. 1175 – 1178, doi: 10.1016/j.jre.2018.03.023.
13. Gou G., Charles N., Shi J., Rondinelli J.M. A-site ordered double perovskite  $CaMnTi_2O_6$  as a multifunctional piezoelectric and ferroelectric-photovoltaic material.

- Inorganic Chemistry, 2017, v. 56, no. 19, pp. 11854 – 11861, doi: 10.1021/acs.inorgchem.7b01854.
14. Anderson M.T., Greenwood K.B., Taylor G.A., Poeppelmeier K.R. B-cation arrangements in double perovskites. *Progress in Solid State Chemistry*, 1993, v. 22, no. 3, pp. 197 – 233, doi: 10.1016/0079-6786(93)90004-B.
  15. Glazer A.M. The classification of tilted octahedral in perovskites. *Acta Crystallographica*, 1972, v. B28, no. 11, pp. 3384 – 3392, doi: 10.1107/S0567740872007976.
  16. Howard C.J., Stokes H.T. Group-theoretical analysis of octahedral tilting in perovskites. *Acta Crystallographica*, 1998, v. B54, no. 6, pp. 782 – 789, doi: 10.1107/S0108768198004200.
  17. Lufaso M.W., Woodward P.M. Prediction of the crystal structures of perovskites using the software program SPuDS. *Acta Crystallographica*, 2001, v. B57, no. 6, pp. 725 – 738, doi: 10.1107/S0108768101015282.
  18. Lufaso M.W., Barnes P.W., Woodward P.M. Structure prediction of ordered and disordered multiple octahedral cation perovskites using SPuDS. *Acta Crystallographica*, 2006, v. B62, no. 3, pp. 397 – 410, doi: 10.1107/S010876810600262X.
  19. Askerka M., Li Z., Lempen M., Liu Y., Johnston A., Saidaminov M.I., Zajacz Z., Sargent E.H. Learning-in-templates enables accelerated discovery and synthesis of new stable double-perovskites. *Journal of the American Chemical Society*, 2019, v. 141, no. 8, pp. 3682 – 3690, doi: 10.1021/jacs.8b13420.
  20. Dimitrovska S., Aleksovska S., Kuzmanovski I. Prediction of the unit cell edge length of cubic  $A^{2+}BB'O_6$  perovskites by multiple linear regression and artificial neural networks. *Central European Journal of Chemistry*, 2005, v. 3, no. 1, pp. 198 – 215.
  21. Li W., Jacobs R., Morgan D. Predicting the thermodynamic stability of perovskite oxides using machine learning models. *Computational Materials Science*, 2018, v. 150, pp. 454 – 463, doi: 10.1016/j.commatsci.2018.04.033.
  22. Majid A., Khan A., Choi T.-S. Predicting lattice constant of complex cubic perovskites using computational intelligence. *Computational Materials Science*, 2011, v. 50, no. 6, pp. 1879 – 1888, doi: 10.1016/j.commatsci.2011.01.035.
  23. Pilania G., Mannodi-Kanakithodi A., Uberuaga B.P., Ramprasad R., Gubernatis J.E., Lookman T. Machine learning bandgaps of double perovskites. *Scientific Reports*, 2016, v. 6, art. 19375, doi: 10.1038/srep19375.
  24. Xie S.R., Kotlarz P., Hennig R.G., Nino J.C. Machine learning of octahedral tilting in oxide perovskites by symbolic classification with compressed sensing. *Computational Materials Science*, 2020, v. 180, pp. 109690/1 – 9, doi: 10.1016/j.commatsci.2020.109690.
  25. Xu Q., Li Z., Liu M., Yin W.-J. Rationalizing perovskites data for machine learning and materials design. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2018, v. 9, no. 24, pp. 6948 – 6954, doi: 10.1021/acs.jpcclett.8b03232.
  26. Киселева Н.Н., Покровский Б.И., Комиссарова Л.Н., Ващенко Н.Д. Моделирование образования сложных окислов из исходных компонентов на основе кибернетического метода формирования понятий. *Журнал неорганической химии*, 1977, т. 22, № 4, с. 883 – 886.
  27. Киселева Н.Н. Компьютерное конструирование неорганических соединений. Использование баз данных и методов искусственного интеллекта. М.: Наука. 2005, 288 с.
  28. Журавлев Ю.И., Рязанов В.В., Сенько О.В. Распознавание. Математические методы. Программная система. Практические применения. М.: ФАЗИС. 2006, 176 с.
  29. Kiselyova N.N., Stolyarenko A.V., Ryazanov V.V., Senko O.V., Dokukin A.A., Podbel'skii V.V. A system for computer-assisted design of inorganic compounds based on computer training. *Pattern Recognition and Image Analysis*, 2011, v. 21, no. 1, pp. 88 – 94, doi: 10.1134/S1054661811010081.
  30. Zhuravlev Yu.I., Kiselyova N.N., Ryazanov V.V., Senko O.V., Dokukin A.A. Design of inorganic compounds with the use of precedent-based pattern recognition methods. *Pattern Recognition and Image Analysis*, 2011, v. 21, no. 1, pp. 95 – 103, doi: 10.1134/S1054661811010135.
  31. Киселева Н.Н., Дударев В.А., Рязанов В.В., Сенько О.В., Докукин А.А. Прогнозирование халькоспинелей состава  $ABCX_4$  ( $X$  — S или Se). *Перспективные материалы*, 2020, № 7, с. 5 – 18, doi: 10.30791/1028-978X-2020-7-5-18.
  32. Wong Ng W., Kaduk J.A., Luong M., Huang Q. X-ray diffraction study and powder patterns of double-perovskites  $Sr_2RSbO_6$  ( $R = Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Y, Er, Tm, Yb, \text{ and } Lu$ ). *Powder Diffraction*, 2014, v. 29, no. 4, pp. 371 – 378, doi: 10.1017/S0885715614000566.
  33. Lavat A.E., Baran E.J. Structural and IR-spectroscopic characterization of some new  $Sr_2LnSbO_6$  perovskites. *Journal of Alloys and Compounds*, 2008, vol. 460, no. 1 – 2, pp. 152 – 154, doi: 10.1016/j.jallcom.2007.06.003.
  34. Евдокимов А.А., Меньшенина Н.Ф. Параметры элементарных ячеек  $Ba_2R\Theta O_6$  ( $\Theta = Nb, Ta$ ). *Журнал неорганической химии*, 1982, т. 27, № 8, с. 2137 – 2139.
  35. Saines P.J., Kennedy B.J., Elcombe M.M. Structural phase transitions and crystal chemistry of the series  $Ba_2LnB'O_6$  ( $Ln = \text{lanthanide and } B' = Nb^{5+} \text{ or } Sb^{5+}$ ). *Journal of Solid State Chemistry*, 2007, v. 180, no. 2, pp. 401 – 409, doi: 10.1016/j.jssc.2006.10.017.
  36. Henmi K., Hinatsu Y., Masaki N.M. Crystal structures and magnetic properties of ordered perovskites  $Ba_2LnNbO_6$  ( $Ln = \text{lanthanide elements}$ ). *Journal of Solid State Chemistry*, 1999, v. 148, no. 2, pp. 353 – 360, doi: 10.1006/jssc.1999.8460.
  37. Fu W.T., Ijdo D.J.W. New insight into the symmetry and the structure of the double perovskites  $Ba_2LnNbO_6$  ( $Ln = \text{lanthanides and } Y$ ). *Journal of Solid State Chemistry*, 2006, v. 179, no. 4, pp. 1022 – 1028, doi: 10.1016/j.jssc.2005.12.031.

38. Ожерельев И.С., Сенько О. В., Киселева Н.Н. Метод поиска выпадающих объектов с использованием параметров неустойчивости обучения. Системы и средства информатики, 2019, т. 29, № 2, с. 122 – 134, doi: 10.14357/08696527190211.
39. Динеев В.Д., Дударев В.А. Расширяемая система для многокритериального поиска выбросов в данных. CEUR Workshop Proceedings (CEUR-WS.org), v. 2790. Supplementary Proceedings of the XXII International Conference on Data Analytics and Management in Data Intensive Domains (DAMDID/RCDL 2020), pp. 103 – 113, <http://ceur-ws.org/Vol-2790/paper10.pdf>.
40. Senko O.V. An optimal ensemble of predictors in convex correcting procedures. Pattern Recognition and Image Analysis, 2009, v. 19, no. 3, pp. 465 – 468, doi: 10.1134/S1054661809030110.
41. Dudarev V.A., Kiselyova N.N., Stolyarenko A.V., Dokukin A.A., Senko O.V., Ryazanov V.V., Vashchenko E.A., Vitushko M.A., Pereverzev-Orlov V.S. An information system for inorganic substances physical properties prediction based on machine learning methods. CEUR Workshop Proceedings (CEUR-WS.org), v. 2790. Supplementary Proceedings of the XXII International Conference on Data Analytics and Management in Data Intensive Domains (DAMDID/RCDL 2020), pp. 89 – 102, <http://ceur-ws.org/Vol-2790/paper09.pdf>.
42. Pedregosa F., Varoquaux G., Gramfort A., Michel V., Thirion B., Grisel O., Blondel M., Prettenhofer P., Weiss R., Dubourg V., Vanderplas J., Passos A., Cournapeau D., Brucher M., Perrot M., Duchesnay E. Scikit-learn: Machine learning in python. Journal of Machine Learning Research, 2011, v. 12 (Oct.), pp. 2825 – 2830.
- ordered double perovskite  $Ba_2FeMoO_6$ . Journal of Alloys and Compounds, 2017, v. 714, pp. 704 – 708, doi: 10.1016/j.jallcom.2017.04.180.
5. Aguirre M.H., Logvinovich D., Bocher L., Robert R., Ebbinghaus S.G., Weidenkaff A. High-temperature thermoelectric properties of  $Sr_2RuYO_6$  and  $Sr_2RuErO_6$  double perovskites influenced by structure and microstructure. Acta Materialia, 2009, vol. 57, no. 1, pp. 108 – 115, doi: 10.1016/j.actamat.2008.09.003.
6. Sri Gyan D., Dwivedi A., Roy P., Maiti T. Synthesis and thermoelectric properties of  $Ba_2TiFeO_6$  double perovskite with insight into the crystal structure. Ferroelectrics, 2018, vol. 536, no. 1, pp. 146 – 155, doi: 10.1080/00150193.2018.1528922.
7. Murugesan G., Nithya R., Kalainathan S. Colossal dielectric behaviour of  $Sr_2TiMnO_{6-\delta}$  single crystals. Journal of Crystal Growth, 2020, vol. 530, pp. 125179/1 – 6, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2019.125179.
8. Gorodea I., Goanta M., Toma M. Impact of A cation size of double perovskite  $A_2AlTaO_6$  (A = Ca, Sr, Ba) on dielectric and catalytic properties. Journal of Alloys and Compounds, 2015, vol. 632, no. 1 – 2, pp. 805 – 809, doi: 10.1016/j.jallcom.2015.01.310.
9. Feraru S., Samoila P., Borhan A.I., Ignat M., Iordan A.R., Palamaru M.N. Synthesis, characterization of double perovskite  $Ca_2MSbO_6$  (M = Dy, Fe, Cr, Al) materials via sol-gel auto-combustion and their catalytic properties. Materials Characterization, 2013, vol. 84, pp. 112 – 119, doi: 10.1016/j.matchar.2013.07.005
10. Huang Y.-H., Liang G., Croft M., Lehtimäki M., Karppinen M., Goodenough J.B. Double-perovskite anode materials  $Sr_2MMoO_6$  (M = Co, Ni) for solid oxide fuel cells. Chemistry of materials, 2009, vol. 21, no. 10, pp. 2319 – 2326, doi: 10.1021/cm8033643.
11. Rath M.K., Lee K.-T. Characterization of novel  $Ba_2LnMoO_6$  (Ln = Pr and Nd) double perovskite as the anode material for hydrocarbon-fueled solid oxide fuel cells. Journal of Alloys and Compounds, 2018, vol. 737, pp. 152 – 159, doi: 10.1016/j.jallcom.2017.12.090.
12. Ravi S. Multiferroism in  $Pr_2FeCrO_6$  perovskite. Journal of Rare Earths, 2018, vol. 36, no. 11, pp. 1175 – 1178, doi: 10.1016/j.jre.2018.03.023.
13. Gou G., Charles N., Shi J., Rondinelli J.M. A-site ordered double perovskite  $CaMnTi_2O_6$  as a multifunctional piezoelectric and ferroelectric-photovoltaic material. Inorganic Chemistry, 2017, vol. 56, no. 19, pp. 11854 – 11861, doi: 10.1021/acs.inorgchem.7b01854.
14. Anderson M.T., Greenwood K.B., Taylor G.A., Poeppelmeier K.R. B-cation arrangements in double perovskites. Progress in Solid State Chemistry, 1993, vol. 22, no. 3, pp. 197 – 233, doi: 10.1016/0079-6786(93)90004-B.
15. Glazer A.M. The classification of tilted octahedral in perovskites. Acta Crystallographica, 1972, vol. B28, no. 11, pp. 3384 – 3392, doi: 10.1107/S0567740872007976.
16. Howard C.J., Stokes H.T. Group-theoretical analysis of octahedral tilting in perovskites. Acta Crystallographica,



- 1998, vol. B54, no. 6, pp. 782 – 789, doi: 10.1107/S0108768198004200.
17. Lufaso M.W., Woodward P.M. Prediction of the crystal structures of perovskites using the software program SPuDS. *Acta Crystallographica*, 2001, vol. B57, no. 6, pp. 725 – 738, doi: 10.1107/S0108768101015282.
  18. Lufaso M.W., Barnes P.W., Woodward P.M. Structure prediction of ordered and disordered multiple octahedral cation perovskites using SPuDS. *Acta Crystallographica*, 2006, vol. B62, no. 3, pp. 397 – 410, doi: 10.1107/S010876810600262X.
  19. Askerka M., Li Z., Lempen M., Liu Y., Johnston A., Saidaminov M.I., Zajacz Z., Sargent E.H. Learning-in-templates enables accelerated discovery and synthesis of new stable double-perovskites. *Journal of the American Chemical Society*, 2019, vol. 141, no. 8, pp. 3682 – 3690, doi: 10.1021/jacs.8b13420.
  20. Dimitrovska S., Aleksovska S., Kuzmanovski I. Prediction of the unit cell edge length of cubic  $A^{2+}_2BB'O_6$  perovskites by multiple linear regression and artificial neural networks. *Central European Journal of Chemistry*, 2005, vol. 3, no. 1, pp. 198 – 215.
  21. Li W., Jacobs R., Morgan D. Predicting the thermodynamic stability of perovskite oxides using machine learning models. *Computational Materials Science*, 2018, vol. 150, pp. 454 – 463, doi: 10.1016/j.commatsci.2018.04.033.
  22. Majid A., Khan A., Choi T.-S. Predicting lattice constant of complex cubic perovskites using computational intelligence. *Computational Materials Science*, 2011, vol. 50, no. 6, pp. 1879 – 1888, doi: 10.1016/j.commatsci.2011.01.035.
  23. Pilania G., Mannodi-Kanakthodi A., Uberuaga B.P., Ramprasad R., Gubernatis J.E., Lookman T. Machine learning bandgaps of double perovskites. *Scientific Reports*, 2016, vol. 6, art. 19375, doi: 10.1038/srep19375.
  24. Xie S.R., Kotlarz P., Hennig R.G., Nino J.C. Machine learning of octahedral tilting in oxide perovskites by symbolic classification with compressed sensing. *Computational Materials Science*, 2020, vol. 180, pp. 109690/1 – 9, doi: 10.1016/j.commatsci.2020.109690.
  25. Xu Q., Li Z., Liu M., Yin W.-J. Rationalizing perovskites data for machine learning and materials design. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2018, vol. 9, no. 24, pp. 6948 – 6954, doi: 10.1021/acs.jpclett.8b03232.
  26. Kiselyova N.N., Pokrovskii B.I., Komissarova L.N., Vaschenko N.D. Modelirovanie obrazovaniya slozhnykh okislov iz iskhodnykh komponentov na osnove kiberneticheskogo metoda formirovaniya ponyatii [Simulation of the complicated oxides formation from initial components based on the cybernetic method of concept formation]. *Zhurnal Neorganicheskoi Khimii — Russian Journal of Inorganic Chemistry* (in Russ.), 1977, vol. 22, no. 4, pp. 883 – 886.
  27. Kiselyova N.N. *Komp'yuternoe konstruirovaniye neorganicheskikh soedinenii. Ispol'zovanie baz dannyykh i metodov iskusstvennogo intellekta* [Computer design of inorganic compounds: Use of databases and artificial intelligence methods]. Moscow, Nauka Publ., 2005, 288 p.
  28. Zhuravlev Yu.I., Ryazanov V.V., Sen'ko O.V. *Raspoznaniye. Matematicheskiye metody. Programmnyaya sistema. Prakticheskiye primeneniya* [Recognition. Mathematical methods. Program system. Practical applications]. Moscow, FAZIS Publ., 2006, 176 p.
  29. Kiselyova N.N., Stolyarenko A.V., Ryazanov V.V., Senko O.V., Dokukin A.A., Podbel'skii V.V. A system for computer-assisted design of inorganic compounds based on computer training. *Pattern Recognition and Image Analysis*, 2011, vol. 21, no. 1, pp. 88 – 94, doi: 10.1134/S1054661811010081.
  30. Zhuravlev Yu.I., Kiselyova N.N., Ryazanov V.V., Senko O.V., Dokukin A.A. Design of inorganic compounds with the use of precedent-based pattern recognition methods. *Pattern Recognition and Image Analysis*, 2011, vol. 21, no. 1, pp. 95 – 103, doi: 10.1134/S1054661811010135.
  31. Kiselyova N.N., Dudarev V.A., Ryazanov V.V., Sen'ko O.V., Dokukin A.A. Predictions of chalcospinel with composition  $ABCX_4$  ( $X = S$  or  $Se$ ). *Inorganic Materials: Applied Research*, 2021, vol. 12, no. 2, pp. 328 – 336, doi: 10.1134/S2075113321020246.
  32. Wong Ng W., Kaduk J.A., Luong M., Huang Q. X-ray diffraction study and powder patterns of double-perovskites  $Sr_2RSbO_6$  ( $R = Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Y, Er, Tm, Yb, \text{ and } Lu$ ). *Powder Diffraction*, 2014, vol. 29, no. 4, pp. 371 – 378, doi: 10.1017/S0885715614000566.
  33. Lavat A.E., Baran E.J. Structural and IR-spectroscopic characterization of some new  $Sr_2LnSbO_6$  perovskites. *Journal of Alloys and Compounds*, 2008, vol. 460, no. 1 – 2, pp. 152 – 154, doi: 10.1016/j.jallcom.2007.06.003.
  34. Evdokimov A.A., Men'shenina N.F. Parametry elementarnykh yascheek  $Ba_2REO_6$  ( $E = Nb, Ta$ ) [Unit cell parameters of  $Ba_2REO_6$  ( $E = Nb, Ta$ )]. *Zhurnal Neorganicheskoi Khimii — Russian Journal of Inorganic Chemistry* (in Russ.), 1982, vol. 27, no. 8, pp. 2137 – 2139.
  35. Saines P.J., Kennedy B.J., Elcombe M.M. Structural phase transitions and crystal chemistry of the series  $Ba_2LnB'O_6$  ( $Ln = \text{lanthanide and } B' = Nb^{5+} \text{ or } Sb^{5+}$ ). *Journal of Solid State Chemistry*, 2007, vol. 180, no. 2, pp. 401 – 409, doi: 10.1016/j.jssc.2006.10.017.
  36. Henmi K., Hinatsu Y., Masaki N.M. Crystal structures and magnetic properties of ordered perovskites  $Ba_2LnNbO_6$  ( $Ln = \text{lanthanide elements}$ ). *Journal of Solid State Chemistry*, 1999, vol. 148, no. 2, pp. 353 – 360, doi: 10.1006/jssc.1999.8460.
  37. Fu W.T., Ijdo D.J.W. New insight into the symmetry and the structure of the double perovskites  $Ba_2LnNbO_6$  ( $Ln = \text{lanthanides and } Y$ ). *Journal of Solid State Chemistry*, 2006, vol. 179, no. 4, pp. 1022 – 1028, doi: 10.1016/j.jssc.2005.12.031.
  38. Ozhereliev I.S., Senko O.V., Kiselyova N.N. Metod poiska vypadayushchikh ob'ektov s ispol'zovaniem

- parametrov neustoichivosti obuscheniya [Method for searching outlier objects using parameters of learning instability]. *Sistemy i sredstva informatiki — Systems and means of informatics*, 2019, vol. 29, no. 2, pp. 122 – 134, doi: 10.14357/08696527190211.
39. Dineev V.D., Dudarev V.A. *Rashirayemaya sistema dlya mnogokriterial'nogo poiska vybrosov v dannykh* [Extendable system for multicriterial outlier detection]. CEUR Workshop Proceedings (CEUR-WS.org), vol. 2790. Supplementary Proceedings of the XXII International Conference on Data Analytics and Management in Data Intensive Domains (DAMDID/RCDL 2020), (in Russ.) pp. 103 – 113, <http://ceur-ws.org/Vol-2790/paper10.pdf>.
40. Senko O.V. An optimal ensemble of predictors in convex correcting procedures. *Pattern Recognition and Image Analysis*, 2009, vol. 19, no. 3, pp. 465 – 468, doi: 10.1134/S1054661809030110.
41. Dudarev V.A., Kiselyova N.N., Stolyarenko A.V., Dokukin A.A., Senko O.V., Ryazanov V.V., Vashchenko E.A., Vitushko M.A., Pereverzev-Orlov V.S. An information system for inorganic substances physical properties prediction based on machine learning methods. CEUR Workshop Proceedings (CEUR-WS.org), vol. 2790. Supplementary Proceedings of the XXII International Conference on Data Analytics and Management in Data Intensive Domains (DAMDID/RCDL 2020), pp. 89 – 102, <http://ceur-ws.org/Vol-2790/paper09.pdf>.
42. Pedregosa F., Varoquaux G., Gramfort A., Michel V., Thirion B., Grisel O., Blondel M., Prettenhofer P., Weiss R., Dubourg V., Vanderplas J., Passos A., Cournapeau D., Brucher M., Perrot M., Duchesnay E. Scikit-learn: Machine learning in python. *Journal of Machine Learning Research*, 2011, vol. 12 (Oct.), pp. 2825 – 2830.

*Статья поступила в редакцию — 3.02.2021 г.  
после доработки — 19.04.2021 г.  
принята к публикации — 20.04.2021 г.*

**Киселева Надежда Николаевна** — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук (119334, Москва, Ленинский проспект, 49), доктор химических наук, главный научный сотрудник, специалист по применению информационных технологий в химии и материаловедении. E-mail: [kis@imet.ac.ru](mailto:kis@imet.ac.ru).

**Дударев Виктор Анатольевич** — НИУ Высшая школа экономики (101000, Москва, ул. Мясницкая, 20), кандидат технических наук, доцент; Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук (119334, Москва, Ленинский проспект, 49), ведущий научный сотрудник, специалист по информационным технологиям. E-mail: [vic@imet.ac.ru](mailto:vic@imet.ac.ru).

**Столяренко Андрей Владиславович** — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова Российской академии наук (119334, Москва, Ленинский проспект, 49), кандидат технических наук, научный сотрудник, специалист по информационным технологиям. E-mail: [stol-drew@yandex.ru](mailto:stol-drew@yandex.ru).

**Докукин Александр Александрович** — Федеральное государственное учреждение Федеральный исследовательский центр “Информатика и управление” Российской академии наук (119333, Москва, ул. Вавилова, 40), кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник; Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова Российской академии наук (119334, Москва, Ленинский проспект, 49), ведущий научный сотрудник, специалист по методам обучения ЭВМ. E-mail: [dalex@ccas.ru](mailto:dalex@ccas.ru).

**Сенько Олег Валентинович** — Федеральное государственное учреждение Федеральный исследовательский центр “Информатика и управление” Российской академии наук (119333, Москва, ул. Вавилова, 40), доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник, специалист по методам обучения ЭВМ. E-mail: [senkoov@mail.ru](mailto:senkoov@mail.ru).

**Рязанов Владимир Васильевич** — Федеральное государственное учреждение Федеральный исследовательский центр “Информатика и управление” Российской академии наук (119333, Москва, ул. Вавилова, 40), доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, специалист по методам обучения ЭВМ. E-mail: [rvcas@mail.ru](mailto:rvcas@mail.ru).

**Витушко Михаил Анатольевич** — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича Российской академии наук (127051, Москва, Большой Каретный переулок, 19 стр. 1), научный сотрудник, специалист по методам обучения ЭВМ. E-mail: [vit@iitp.ru](mailto:vit@iitp.ru).

**Переверзев-Орлов Вячеслав Сергеевич** — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича Российской академии наук (127051, Москва, Большой Каретный переулок, 19 стр. 1), кандидат технических наук, ведущий научный сотрудник, специалист по методам обучения ЭВМ. E-mail: slavaperor@gmail.com.

**Ващенко Елена Анатольевна** — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича Российской академии наук (127051, Москва, Большой Каретный переулок, 19 стр. 1), научный сотрудник, специалист по методам обучения ЭВМ. E-mail: vea@iitp.ru.

---

## Prediction of the space group of perovskite-like compounds of the composition $A^{II}_2B^{III}B^VO_6$

N. N. Kiselyova, V. A. Dudarev, A. V. Stolyarenko, A. A. Dokukin, O. V. Sen'ko, V. V. Ryazanov, M. A. Vitushko, V. S. Pereverzev-Orlov, E. A. Vaschenko

The prediction of new compounds of the composition  $A^{II}_2B^{III}B^VO_6$  was carried out, the type of distortion of their perovskite-like lattice, the space group were predicted, and the parameters of the crystal lattice of the predicted compounds were estimated. When predicting, only the property values of the chemical elements were used. Programs based on machine learning algorithms for various variants of neural networks, a linear machine, the formation of logical regularities, k-nearest neighbors, support vector machine showed the best results when predicting the type of distortion of a perovskite-like lattice. When evaluating the lattice parameters, the programs based on algorithms for orthogonal matching pursuit and automatic relevance determination regression were the most accurate methods. The accuracy of predictions of the perovskite-like lattice distortion type was no less than 74 %. The accuracy of estimating the lattice linear parameters was within  $\pm 0.0120 - 0.8264$  Å, and the accuracy for angles  $\beta$  with monoclinic distortion of the lattice was  $\pm 0.08 - 0.74$  deg. The calculations were carried out using systems based on machine learning methods. To evaluate the prediction accuracy, an exam recognition in the cross-validation mode was used for the compounds included in the sample for machine learning. The predicted compounds are promising for the search for new magnetic, thermoelectric and dielectric materials.

**Keywords:** perovskite, crystal lattice parameter, predicting, machine learning

---

**Kiselyova Nadezhda** — Baikov Institute of Metallurgy and Materials Sciences of RAS (119334 Moscow, Russia, Leninskii Prospect, 49), Dr Sci (Chem), chief researcher, specialist in the application of information technologies (IT) to chemistry and materials science. E-mail: kis@imet.ac.ru.

**Dudarev Victor** — Higher School of Economics. National Research University (101000 Moscow, Russia, 20 Myasnitskaya Ulitsa), PhD (Eng), associate professor; Baikov Institute of Metallurgy and Materials Sciences of RAS (119334 Moscow, Russia, Leninskii Prospect, 49), leading researcher, IT specialist. E-mail: vic@imet.ac.ru.

**Stolyarenko Andrey** — Baikov Institute of Metallurgy and Materials Sciences of RAS (119334 Moscow, Russia, Leninskii Prospect, 49), PhD (Eng), researcher, IT specialist. E-mail: stol-drew@yandex.ru.

**Dokukin Aleksandr** — Federal Research Center "Computer Science and Control" of RAS (119333 Moscow, Russia, ul. Vavilova, 40), PhD (Phys-Math), senior researcher; Baikov Institute of Metallurgy and Materials Sciences of RAS (119334 Moscow, Russia, Leninskii Prospect, 49), leading researcher, machine learning specialist. E-mail: dalex@ccas.ru.

**Sen'ko Oleg** — Federal Research Center "Computer Science and Control" of RAS (119333 Moscow, Russia, ul. Vavilova, 40), Dr Sci (Phys-Math), professor; leading researcher, machine learning specialist. E-mail: senkoov@mail.ru.

**Ryazanov Vladimir** — Federal Research Center "Computer Science and Control" of RAS (119333 Moscow, Russia, ul. Vavilova, 40), Dr Sci (Phys-Math), professor; chief researcher, machine learning specialist. E-mail: rvccas@mail.ru.

**Vitushko Mikhail** — A.A. Kharkevich Institute for Information Transmission Problems of the RAS (127051 Moscow, Russia, Bolshoy Karetny per. 19, build.1), researcher, machine learning specialist. E-mail: vit@iitp.ru.

**Pereverzev-Orlov Vyacheslav** — A.A. Kharkevich Institute for Information Transmission Problems of the RAS (127051 Moscow, Russia, Bolshoy Karetny per. 19, build.1), PhD (Eng), leading researcher, machine learning specialist. E-mail: slavaperor@gmail.com.

**Vashchenko Elena** — A.A. Kharkevich Institute for Information Transmission Problems of the RAS (127051 Moscow, Russia, Bolshoy Karetny per. 19, build.1), researcher, machine learning specialist. E-mail: vea@iitp.ru.