

Научная статья
УДК 544.31
doi:10.37614/2949-1215.2025.16.1.043

МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$

**Виктор Алексеевич Ворожцов¹, Андрей Леонидович Шилов², Валентина Леонидовна Столярова³,
Сергей Игоревич Лопатин⁴, Анна Викторовна Федорова⁵**

^{1–5}Филиал Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики имени Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт химии силикатов имени И. В. Гребенщикова», Санкт-Петербург, Россия

^{3, 4, 5}Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

¹v.vorozhcnov@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6931-1865>

²naskalinen@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2386-9759>

³v.stolyarova@spbu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7798-4405>

⁴s.lopatin@spbu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6060-5349>

⁵a.v.fedorova@spbu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8242-5608>

Аннотация

Масс-спектрометрическим эффузионным методом Кнудсена определен состав газовой фазы и парциальные давления молекулярных форм пара над образцами систем SrO-TiO_2 , SrO-HfO_2 , $\text{TiO}_2\text{-HfO}_2$ и $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$. По измеренным величинам парциальных давлений молекулярных форм пара рассчитаны активности наиболее летучего компонента в каждой из систем. На основе обобщенной решеточной теории ассоциированных растворов проведено моделирование термодинамических свойств системы $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ при температуре 2 300 К, в результате получены концентрационные зависимости активностей оксидов стронция, титана и гафния. Для сечения исследуемой системы при $\text{TiO}_2\text{:HfO}_2 = 1:1$ (мол. дол.) рассчитаны концентрационные зависимости относительных чисел связей различного типа с учетом второй координационной сферы в модельной решетке, иллюстрирующие связь избыточной энергии Гиббса с ассоциацией структурных элементов. На примере изученной системы $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ показано, что величины энергетических параметров решеточной модели, получаемые при оптимизации бинарных оксидных систем, могут быть использованы для оценки термодинамических свойств трехкомпонентных систем, состоящих из тех же компонентов.

Ключевые слова:

масс-спектрометрия, оксидные системы, термодинамические свойства, моделирование

Благодарности:

авторы выражают благодарность Российскому научному фонду за финансовую поддержку, грант № 23-13-00254, ресурсным центрам Научного парка СПбГУ «Рентгенодифракционные методы исследования» и «Геомодель» за проведение фазового и химического анализа образцов, а также криогенному отделу Научного парка СПбГУ за поставки жидкого азота для масс-спектрометра.

Финансирование:

Российский научный фонд, грант № 23-13-00254.

Для цитирования:

Масс-спектрометрическое изучение и моделирование термодинамических свойств системы $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ / В. А. Ворожцов [и др.]. // Труды Кольского научного центра РАН. Серия: Технические науки. 2025. Т. 16, № 1. С. 244–251. doi:10.37614/2949-1215.2025.16.1.043.

Original article

MASS SPECTROMETRIC STUDY AND MODELING OF THE THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ SYSTEM

Viktor A. Vorozhtcov¹, Andrey L. Shilov², Valentina L. Stolyarova³, Sergey I. Lopatin⁴, Anna V. Fedorova⁵

^{1–5}*J. V. Grebenshchikov Institute of Silicate Chemistry of NRC “Kurchatov Institute”, Saint Petersburg, Russia*

^{3, 4, 5}*Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia*

¹v.vorozhcnov@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6931-1865>

²naskalinen@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2386-9759>

³v.stolyarova@spbu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7798-4405>

⁴s.lopatin@spbu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6060-5349>

⁵a.v.fedorova@spbu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8242-5608>

Abstract

The composition of the gaseous phase and the partial pressures of vapor species over the samples of the SrO-TiO₂, SrO-HfO₂, TiO₂-HfO₂, and SrO-TiO₂-HfO₂ systems were determined using the Knudsen effusion mass spectrometric method. Based on the measured partial pressures of the vapor species, the activities of the most volatile component in each system were calculated. The generalized lattice theory of associated solutions helped to model the thermodynamic properties of the SrO-TiO₂-HfO₂ system at a temperature of 2300 K. As a result, the concentration dependences of the activity of strontium, titanium and hafnium oxides were obtained. For a section of the studied system with a TiO₂:HfO₂ molar ratio of 1:1, the concentration-dependent relative numbers of bonds of different types were calculated, taking into account the second coordination sphere in the model lattice. These concentration dependencies illustrate the relationship between excess Gibbs energy and the association of structural elements. Using the SrO-TiO₂-HfO₂ system as an example, it was demonstrated that the energy parameters of the lattice model obtained by the optimization of binary oxide systems can be used to estimate the thermodynamic properties of ternary systems composed of the same components.

Keywords:

mass spectrometry, oxide systems, thermodynamic properties, modeling

Acknowledgments:

The authors are grateful to the Russian Science Foundation for the financial support as well as to the Centre for X-ray Diffraction Studies and Centre for Geo-Environmental Research and Modelling (GEOMODEL) of the Research Park of Saint Petersburg State University for phase and chemical analyses of the samples and also to the Cryogenic department of the Research Park of Saint Petersburg State University for the supply of liquid nitrogen for the mass spectrometer.

Funding:

Russian Science Foundation, grant N 23-13-00254.

For citation:

Mass spectrometric study and modeling of the thermodynamic properties of the SrO-TiO₂-HfO₂ system / V. A. Vorozhtcov [et al.] // Transactions of the Kola Science Centre of RAS. Series: Engineering Sciences. 2025. Vol. 16, No. 1. P. 244–251. doi:10.37614/2949-1215.2025.16.1.043.

Введение

В настоящее время материалы на основе высокоэнтропийных оксидов, благодаря специфическому сочетанию физико-химических свойств, находят все более широкое применение для решения комплекса технологических задач, среди которых разработка керамики высшей огнеупорности нового поколения [1], хранение кислорода [2], выделение кислорода из газовых смесей [3] и получение синтез-газа окислением метана [4]. Для прогнозирования эксплуатационных характеристик таких материалов при высоких температурах и выбора условий проведения их высокотемпературного синтеза необходима информация о термодинамических свойствах и процессах испарения. Наиболее эффективным методом получения указанных данных является масс-спектрометрический эффузионный метод Кнудсена [5], или метод высокотемпературной масс-спектрометрии (BTMC).

В данной работе методом BTMC проведено изучение системы SrO-TiO₂-HfO₂. Предлагаемое исследование являлось частью более широкой программы, направленной на изучение термодинамических свойств высокоэнтропийных материалов, содержащих оксиды стронция, титана и гафния, в частности систем Sr-La-Ti-Hf-Fe-O и Sr-La-Ti-Hf-Fe-O-C. Выполненное в настоящей работе моделирование термодинамических свойств системы SrO-TiO₂-HfO₂ на основе обобщенной решеточной теории ассоциированных растворов (ОРТАР) [6] дает возможность, с одной стороны, оценить величины активностей компонентов исследуемой системы, недоступные для прямого экспериментального определения, а с другой стороны, дополнить имеющуюся базу данных энергетических параметров используемой модели для расчета термодинамических свойств многокомпонентных оксидных систем.

Синтез и идентификация образцов

При выборе составов образцов для исследований было необходимо учитывать диапазоны парциальных давлений компонентов системы SrO-TiO₂-HfO₂, доступных для измерений методом BTMC, а также предусмотреть возможность корректного проведения моделирования по полученным экспериментальным данным. Стандартным методом твердофазного синтеза было получено семь образцов в системах SrO-TiO₂, SrO-HfO₂, TiO₂-HfO₂ и Sr(Ti_{0.5}Hf_{0.5})O₃. В качестве исходных веществ были выбраны SrCO₃, TiO₂ и HfO₂. Рассчитанные количества реагентов гомогенизировались в агатовой ступке, полученная смесь спрессовывалась в таблетки, которые прокаливались до постоянного фазового состава в высокотемпературной печи при атмосферном давлении. Оптимальная температура и время прокаливания были выбраны согласно условиям, обеспечивающим постоянный фазовый состав образцов

при увеличении времени прокаливания шихты согласно следующим условиям: температура для всех синтезированных образцов 1723 К, время прокаливания для образцов №№ 1–6 было установлено 20 ч, для образца № 7 — 45 ч. Составы синтезированных образцов приведены в табл. 1.

Таблица 1

Образцы системы SrO-TiO₂-HfO₂, изученные в настоящей работе

№	Содержание оксидов по синтезу, мол. %			Фазовый состав, мол. %	Результаты анализа методом РФЛА, мол. %
	SrO	TiO ₂	HfO ₂		
1	90	10	—	—	(89±4) SrO : (12±3) TiO ₂
2	50	50	—	—	(49±7) SrO : (51±3) TiO ₂
3	90	—	10	SrHfO ₃ , SrO	(91±4) SrO : (12±3) HfO ₂
4	50	—	50	SrHfO ₃ , HfO ₂	(48±7) SrO : (51±3) HfO ₂
5	—	90	10	TiO ₂ , HfO ₂	87±6) TiO ₂ : (12±3) HfO ₂
6	—	50	50	TiO ₂ , HfO ₂	(48±4) TiO ₂ : (46±8) HfO ₂
7	50	25	25	SrHfO ₃ , SrTiO ₃ , HfO ₂	(49±4) SrO : (26±5) TiO ₂ : (25±4) HfO ₂

Рентгенофазовый анализ синтезированных образцов выполнен на дифрактометре Bruker D2 Phaser с медным и кобальтовым анодом, элементный состав определен методом рентгенофлуоресцентного анализа (РФЛА) на энергодисперсионном спектрометре серии EDX 800 HS (Shimadzu) в вакууме. Результаты анализа образцов приведены в табл. 1.

Экспериментальные результаты

Изучение процессов испарения и термодинамических свойств синтезированных образцов в системе SrO-TiO₂-HfO₂ выполнено методом дифференциальной масс-спектрометрии [5] на масс-спектрометре МС-1301 при ионизирующем напряжении, равном 30 В. Образцы испарялись из вольфрамовых эффузионных камер, нагреваемых электронной бомбардировкой, температура измерялась оптическим пирометром ЭОП-66. Для калибровки прибора и в качестве стандарта при определении парциального давления молекулярных форм пара были выбраны соответственно CaF₂ и Ag.

Парциальное давление i -й молекулярной формы пара p_i над исследуемым образцом было определено по формуле

$$p_i = p_{st} \frac{I_i T_i \sigma_{st} \gamma_{st}}{I_{st} T_{st} \sigma_i \gamma_i}, \quad (1)$$

где I_i — интенсивность ионного тока i в масс-спектре пара над образцом; T_i — температура; σ_i — поперечное сечение ионизации молекулярной формы пара i ; γ_i — коэффициент конверсии вторично-электронного умножителя для иона i , пропорциональный обратному корню из молярной массы иона $1/\sqrt{M_i}$. Индексы i и st относятся к образцу и стандарту. Парциальное давление кислорода над изученным образцом было оценено по формуле Цайферта [7] с привлечением данных о парциальных давлениях пара SrO и TiO₂. Для идентификации ионов в масс-спектрах пара над исследуемой системой были определены их энергии появления соответствующих ионов. Результаты исследования состава пара над изученными образцами приведены в табл. 2.

Установлено, что процессы испарения образцов системы SrO-TiO₂-HfO₂ аналогичны реакциям, протекающим при переходе в пар индивидуальных оксидов:



Таблица 2

Молекулярные формы, идентифицированные в паре над исследованными образцами системы SrO-TiO₂-HfO₂ при различных температурах

№	Содержание оксидов по синтезу, мол. %			T, К	Молекулярные формы в паре
	SrO	TiO ₂	HfO ₂		
1	90	10	—	1590–1845	Sr
				1845–2050	Sr, TiO, TiO ₂
				2050–2285	TiO, TiO ₂
2	50	50	—	1844–2288	Sr, TiO, TiO ₂
3	90	—	10	1560–2320	Sr
				>2800	HfO
4	50	—	50	1745–2325	Sr
				>2800	HfO
5	—	90	10	2150–2565	TiO, TiO ₂
				>2700	HfO
6	—	50	50	2200–2670	TiO, TiO ₂
				>2700	HfO
7	50	25	25	2149–2318	Sr, TiO, TiO ₂
				2613–2853	HfO

В связи с тем, что летучести компонентов системы SrO-TiO₂-HfO₂ значительно различаются, во всех образцах достоверно определена лишь активность компонента, испаряющегося при более низкой температуре. В образцах, содержащих SrO, определялась активность оксида стронция $a(\text{SrO})$, а в образцах системы TiO₂-HfO₂ — активность оксида титана $a(\text{TiO}_2)$ согласно следующим уравнениям:

$$a(\text{SrO}) = \frac{p(\text{SrO})}{p_0(\text{SrO})} = \frac{p^{1.5}(\text{Sr})}{p_0^{1.5}(\text{Sr})}, \quad (7)$$

$$a(\text{TiO}_2) = \frac{p(\text{TiO}_2)}{p_0(\text{TiO}_2)} = \frac{I(\text{TiO}_2^+)}{I_0(\text{TiO}_2^+)}. \quad (8)$$

В случае, когда атомарный стронций над образцом и стандартом одновременно не наблюдались, величина активности $a(\text{SrO})$ была получена с использованием парциального давления стронция над стандартом $p_0(\text{Sr})$, которое было найдено из температурной зависимости $p_0(\text{Sr})$ над стандартом.

Кроме того, было проведено полное изотермическое испарение образцов №№ 1–6 и рассчитаны концентрационные зависимости активности наиболее летучего компонента. Следует отметить, что активность SrO в образце № 1, полученная для состава SrO:TiO₂ = 50:50, мол. %, в ходе полного испарения, соответствует результатам, полученным ранее в [8], но оказалась на 3 порядка выше, чем активность для того же состава в образце № 2. Одной из возможных причин этого может быть слишком высокая скорость и незначительное время испарения этого образца, из-за чего компоненты во время полного испарения образца № 1 не успевали прореагировать с образованием соединения SrTiO₃ с соответствующим уменьшением активности SrO. Именно по этой причине для дальнейшего моделирования были приняты во внимание только данные, полученные при изучении образца № 2.

Моделирование

Начиная с [9], ОПТАР успешно применялся для моделирования термодинамических свойств оксидных систем. Общий подход и описание метода можно найти в [6]. Наибольший интерес представляет возможность проведения оценочных расчетов термодинамических свойств многокомпонентной системы на основе параметров, полученных при моделировании составляющих ее бинарных систем. В настоящей работе этот подход тестируется сопоставлением активности $a(\text{SrO})$, полученной в трехкомпонентной системе SrO-TiO₂-HfO₂, с величиной, рассчитанной на основе ОПТАР по экспериментальным значениям $a(\text{SrO})$ в системах SrO-TiO₂ и SrO-HfO₂ и $a(\text{TiO}_2)$ в системе TiO₂-HfO₂.

Для моделирования была выбрана решетка с координационным числом 4, в узлах которой размещены структурные элементы SrO, TiO₂ и HfO₂. Каждый структурный элемент занимает один узел решетки и имеет по две контактные точки атомов кислорода и по две контактные точки атома металла.

Энергии взаимнообмена контактов О-О и М-М полагались равными нулю, энергии контактов М-О[Me] и Ме-О[М] считались равными друг другу (М, Ме = Sr, Ti, Hf, в квадратных скобках указаны атомы второй координационной сферы). Такой модели соответствует система шести нелинейных уравнений с четырьмя подгоночными параметрами, которые определялись путем перебора всевозможных их значений при поиске минимума отклонений вычисленных избыточных химических потенциалов компонентов от соответствующих экспериментальных значений. Часть энергетических параметров, относящихся к системам, содержащим HfO_2 , были взяты из ранее опубликованных работ [10; 11].

Расчеты выполнены для температуры 2 300 К, при которой значительная часть диапазона составов исследованных систем лежит в области гомогенности. В качестве экспериментальной основы в расчетах использовались величины активности компонентов, измеренные в эквимольных составах бинарных систем, а именно в образцах № 2 ($a(\text{SrO}) = 0,0003$), № 4 ($a(\text{SrO}) = 0,020$) и № 6 ($a(\text{SrO}) = 0,228$). Результаты расчетов приведены на рис. 1–4.

Полученная в процессе моделирования система энергетических параметров исследуемой системы позволяет вычислить относительные числа связей различного типа в модельной решетке с учетом второй координационной сферы как функции состава. Результаты расчета для сечения $x(\text{TiO}_2) : x(\text{HfO}_2) = 1:1$, мол. дол., системы $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ приведены на рис. 5.

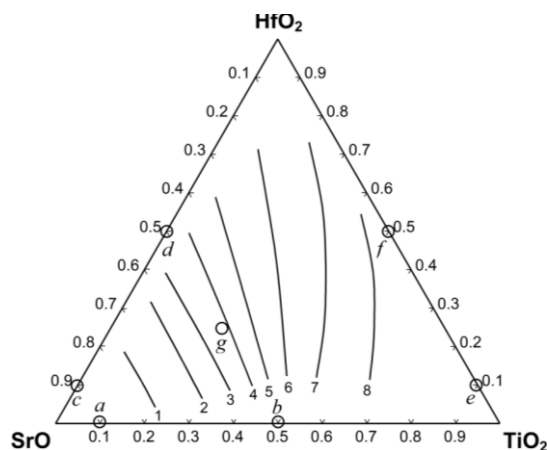


Рис. 1. Кривые изоактивности оксида стронция $a(\text{SrO})$ в системе $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ при температуре 2300 К:

1 — $a(\text{SrO}) = 0,6$; 2 — $a(\text{SrO}) = 0,3$; 3 — $a(\text{SrO}) = 10^{-1}$; 4 — $a(\text{SrO}) = 10^{-2}$;
5 — $a(\text{SrO}) = 10^{-3}$; 6 — $a(\text{SrO}) = 10^{-4}$; 7 — $a(\text{SrO}) = 10^{-5}$; 8 — $a(\text{SrO}) = 10^{-6}$.

Точками *a, b, c, d, e, f, g* отмечены составы исследованных образцов № 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 соответственно

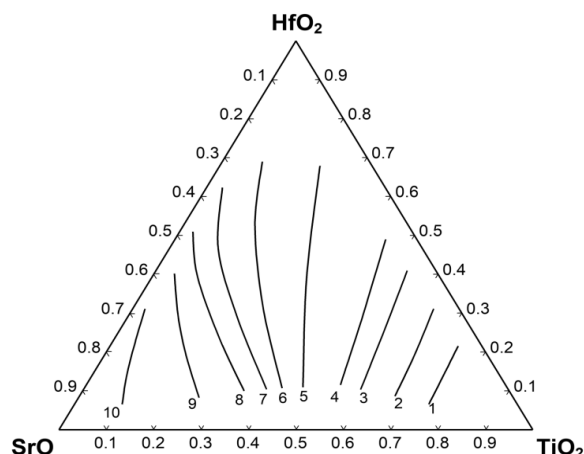


Рис. 2. Кривые изоактивности оксида титана $a(\text{TiO}_2)$ в системе $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ при температуре 2 300 К:

1 — $a(\text{TiO}_2) = 0,6$; 2 — $a(\text{TiO}_2) = 0,4$; 3 — $a(\text{TiO}_2) = 0,2$; 4 — $a(\text{TiO}_2) = 0,1$;
5 — $a(\text{TiO}_2) = 10^{-2}$; 6 — $a(\text{TiO}_2) = 10^{-3}$; 7 — $a(\text{TiO}_2) = 10^{-4}$; 8 — $a(\text{TiO}_2) = 10^{-5}$; 9 — $a(\text{TiO}_2) = 10^{-6}$; 10 — $a(\text{TiO}_2) = 10^{-7}$

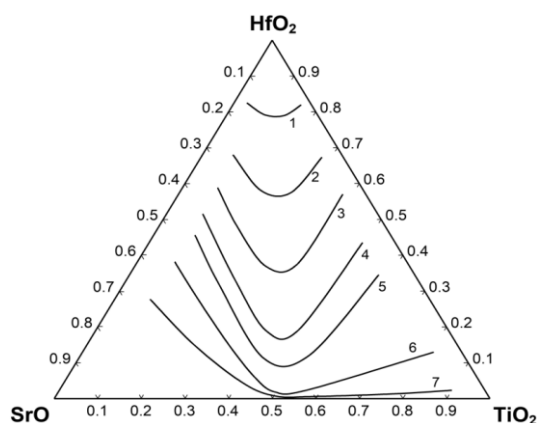


Рис. 3. Кривые изоактивности оксида гафния $a(\text{HfO}_2)$ в системе $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ при температуре 2 300 К:
1 — $a(\text{HfO}_2) = 0,8$; 2 — $a(\text{HfO}_2) = 0,6$; 3 — $a(\text{HfO}_2) = 0,4$; 4 — $a(\text{HfO}_2) = 0,2$;
5 — $a(\text{HfO}_2) = 0,1$; 6 — $a(\text{HfO}_2) = 10^{-2}$; 7 — $a(\text{HfO}_2) = 10^{-3}$

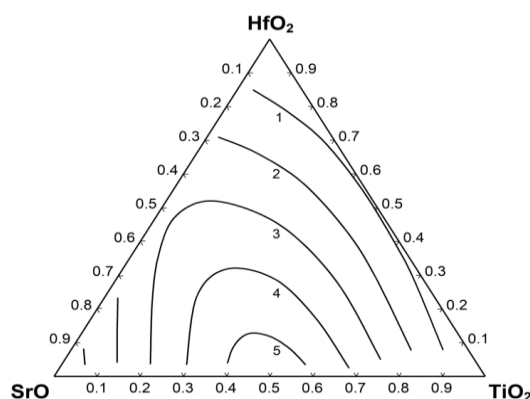


Рис. 4. Кривые постоянных величин избыточной энергии Гиббса ΔG^E , кДж/моль, в системе $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ при температуре 2 300 К:
1 — $\Delta G^E = -20$; 2 — $\Delta G^E = -40$; 3 — $\Delta G^E = -60$; 4 — $\Delta G^E = -80$; 5 — $\Delta G^E = -100$

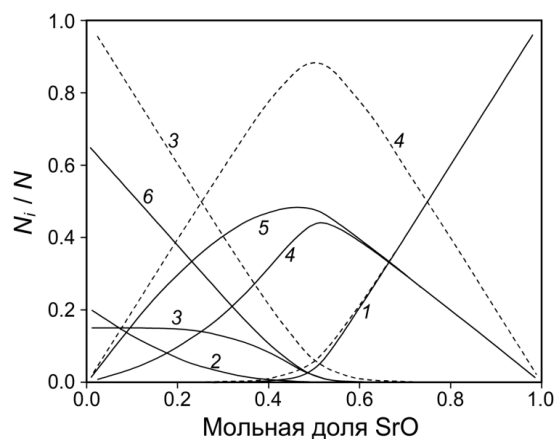


Рис. 5. Относительные числа связей различного типа с учетом второй координационной сферы, рассчитанные на основе ОПТАР для системы $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ в эквимольном по $\text{TiO}_2\text{-HfO}_2$ концентрационном сечении (сплошные линии). Пунктирные кривые соответствуют связям, рассчитанным для бинарной системы SrO-HfO_2 . Цифрами обозначены связи:
1 — $\text{Sr-O}[\text{Sr}]$; 2 — $\text{Ti-O}[\text{Ti}]$; 3 — $\text{Hf-O}[\text{Hf}]$; 4 — $\text{Sr-O}[\text{Hf}]$; 5 — $\text{Sr-O}[\text{Ti}]$; 6 — $\text{Ti-O}[\text{Hf}]$

Обсуждение и выводы

Полученные результаты показывают, что система $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ характеризуется значительными отрицательными отклонениями от идеальности. Для составов с концентрацией оксида стронция менее 50 мол. % наблюдается особенно резкий спад активности SrO , что связано, по-видимому, с образованием соединения SrTiO_3 . Кривые 4 и 5 на рис. 5 демонстрируют более сильное взаимодействие оксидов стронция и титана, что приводит к сдвигу минимума ΔG^E в треугольнике составов (см. рис. 4) в сторону TiO_2 . Рассчитанное для состава № 7 значение активности SrO в системе $\text{SrO-TiO}_2\text{-HfO}_2$ (см. рис. 1) составило $1,7 \times 10^{-4}$, что находится в соответствии с определенной экспериментальной величиной $2,1 \times 10^{-4}$. Таким образом, в результате проведенного исследования еще раз проиллюстрировано, что применение ОРТАР для оценочных расчетов активностей компонентов в многокомпонентных системах по данным о равновесиях в соответствующих бинарных системах вполне обосновано.

Список источников

1. Wang Y. Processing and properties of high entropy carbides // *Adv. Appl. Ceram.* 2022. V. 121, № 2. P. 57–78.
2. Klimkowicz A., Świerczek K., Takasaki A., Dabrowski B. Oxygen storage capability in Co- and Fe-containing perovskite-type oxides // *Solid State Ionics*. 2014. V. 257. P. 23–28.
3. Adánez J., De Diego L. F., García-Labiano F., Gayán P., Abad A., Palacios J. M. Selection of oxygen carriers for chemical-looping combustion // *Energy and Fuels*. 2004. V. 18, № 2. P. 371–377.
4. Nalbandian L., Evdou A., Zaspalis V. $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{M}_y\text{Fe}_{1-y}\text{O}_{3-\delta}$ perovskites as oxygen-carrier materials for chemical-looping reforming // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2011. V. 36, № 11. P. 6657–6670.
5. Stolyarova V. L., Semenov G. A. *Mass Spectrometric Study of the Vaporization of Oxide Systems*, Beynon, J. H., Ed., Chichester: Willey, 1994.
6. Barker J. A. Cooperative orientation effects in solutions // *J. Chem Phys.* 1952. V. 20, № 10. P. 1526–1532.
7. Zeifert P. L. Measurement of vapor pressure of refractories. In: I.E. Kempbell (Ed.), *High Temperature Technology*, John Wiley, New York, 1956. P. 485.
8. Rangel-Salinas E., Pisch A., Chatillon C., Bernard C. Mass spectrometric determination of SrO activity in the SrO-TiO_2 system // *ECS Transactions*. 2007. V. 3, № 14. P. 87–98.
9. Шульц М. М., Иванов Г. Г., Столярова В. Л., Шахматкин Б. А. Термодинамические свойства расплавов и стекол системы $\text{B}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ // *Физика и химия стекла*. 1986. Т. 12, № 3. С. 285–292.
10. Kablov E. N., Shilov A. L., Stolyarova V. L., Vorozhtcov V. A., Karachevtsev F. N., Lopatin S. I., Shugurov S. M. Mass spectrometric study and modeling of the thermodynamic properties in the $\text{Gd}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2\text{-HfO}_2$ system at high temperatures // *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 2022. V. 36. P. e9306.
11. Shilov A. L., Stolyarova V. L., Lopatin S. I., Vorozhtcov V. A. Thermodynamic properties of the $\text{Gd}_2\text{O}_3\text{-Y}_2\text{O}_3\text{-HfO}_2$ system studied by high temperature Knudsen effusion mass spectrometry and optimized using the Barker lattice theory // *J. Alloys Compd.* 2019. V. 791. P. 1207–1212.

References

1. Wang Y. Processing and properties of high entropy carbides. *Adv. Appl. Ceram.*, 2022, vol. 121, no. 2, pp. 57–78.
2. Klimkowicz A., Świerczek K., Takasaki A., Dabrowski B. Oxygen storage capability in Co- and Fe-containing perovskite-type oxides. *Solid State Ionics*, 2014, vol. 257, pp. 23–28.
3. Adánez J., De Diego L. F., García-Labiano F., Gayán P., Abad A., Palacios J. M. Selection of oxygen carriers for chemical-looping combustion. *Energy and Fuels*, 2004, vol. 18, no. 2, pp. 371–377.
4. Nalbandian L., Evdou A., Zaspalis V. $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{M}_y\text{Fe}_{1-y}\text{O}_{3-\delta}$ perovskites as oxygen-carrier materials for chemical-looping reforming. *Int. J. Hydrogen Energy*, 2011, vol. 36, no. 11, pp. 6657–6670.
5. Stolyarova V. L., Semenov G. A. *Mass Spectrometric Study of the Vaporization of Oxide Systems*, Beynon, J. H., Ed., Chichester: Willey, 1994.
6. Barker J. A. Cooperative orientation effects in solutions. *J. Chem. Phys.*, 1952, vol. 20, no. 10, pp. 1526–1532.
7. Zeifert P. L. *Measurement of vapor pressure of refractories*. In: I. E. Kempbell (Ed.), *High Temperature Technology*, John Wiley, New York, 1956, p. 485.
8. Rangel-Salinas E., Pisch A., Chatillon C., Bernard C. Mass spectrometric determination of SrO activity in the SrO-TiO_2 system. *ECS Transactions*, 2007, vol. 3, no. 14, pp. 87–98.
9. Shultz M. M., Ivanov G. G., Stolyarova V. L., Shahmatkin B. A. Termodinamicheskiye svoistva rasplavov i styokol sistemi $\text{B}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ [Thermodynamic properties of melts and glasses in the $\text{B}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ system]. *Fizika i himiya stekla* [Physics and Chemistry of Glasses], 1986, vol. 12, no. 3, pp. 285–292. (In Russ.).

10. Kablov E. N., Shilov A. L., Stolyarova V. L., Vorozhtcov V. A., Karachevtsev F. N., Lopatin S. I., Shugurov S. M. Mass spectrometric study and modeling of the thermodynamic properties in the $\text{Gd}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2\text{-HfO}_2$ system at high temperatures. *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, 2022, vol. 36, pp. e9306.
11. Shilov A. L., Stolyarova V. L., Lopatin S. I., Vorozhtcov V. A. Thermodynamic properties of the $\text{Gd}_2\text{O}_3\text{-Y}_2\text{O}_3\text{-HfO}_2$ system studied by high temperature Knudsen effusion mass spectrometry and optimized using the Barker lattice theory. *J. Alloys Compd.*, 2019, vol. 791, pp. 1207–1212.

Информация об авторах

В. А. Ворожцов — кандидат химических наук, старший научный сотрудник;
А. Л. Шилов — кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник;
В. Л. Столярова — академик РАН, доктор химических наук, профессор;
С. И. Лопатин — доктор химических наук, профессор, ведущий научный сотрудник;
А. В. Федорова — кандидат химических наук, доцент.

Information about the authors

V. A. Vorozhtcov — PhD (Chemistry), Senior Researcher;
A. L. Shilov — PhD (Chemistry), Lead Researcher;
V. L. Stolyarova — Full Member of RAS, DSc (Chemistry), Professor;
S. I. Lopatin — DSc (Chemistry), Professor, Lead Researcher;
A. V. Fedorova — PhD (Chemistry), Associate Professor.

Статья поступила в редакцию 25.06.2025; одобрена после рецензирования 04.07.2025; принята к публикации 08.07.2025.
The article was submitted 25.06.2025; approved after reviewing 04.07.2025; accepted for publication 08.07.2025.