



НАЦИОНАЛЬНЫЙ  
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР  
«КУРЧАТОВСКИЙ  
ИНСТИТУТ»

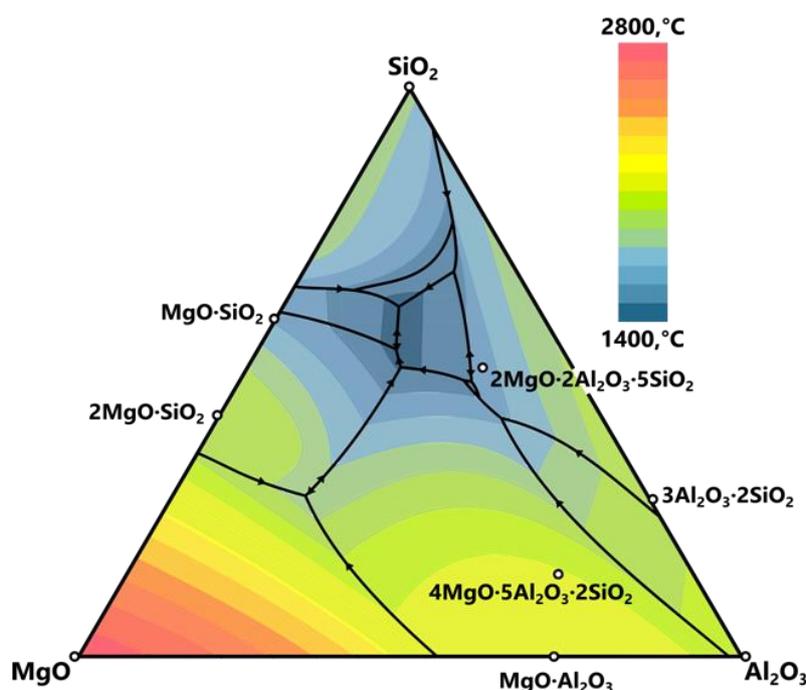
Национальный исследовательский центр  
«Курчатовский институт»

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Ордена Трудового Красного Знамени  
Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова

**X ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
(с международным участием)  
«ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ХИМИЯ  
ОКСИДНЫХ СИСТЕМ И МАТЕРИАЛОВ»**

Посвящается 75-летию ИХС РАН

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ**



25 – 28 сентября 2023 г.  
Санкт-Петербург

**УДК 546.05**

**ББК 21.4**

**В93**

**X Всероссийская конференция (с международным участием) «Высокотемпературная химия оксидных систем и материалов»: Сборник тезисов докладов, г. Санкт-Петербург, 25 – 28 сентября 2023 г. – СПб.: ООО «Издательство «ЛЕМА», 2023. – 376 с.**

**ISBN 978-5-00105-845-8**

В сборнике представлены тезисы докладов X Всероссийской конференции (с международным участием) «Высокотемпературная химия оксидных систем и материалов», проведенной 25-28 сентября 2023 г. в г. Санкт-Петербурге.

Сборник может быть полезен для ученых, инженеров, технологов, преподавателей, аспирантов и студентов, научная и производственная деятельность которых связана с исследованиями в области неорганической и физической химии, неорганических материалов (стекло, керамика, высокотемпературные оксиды и покрытия),

Издание осуществлено с оригинала, подготовленного Институтом химии силикатов им. И. В. Гребенщикова РАН на основе MS Word файлов, представленных авторами докладов. Техническое редактирование касалось только ошибок, обусловленных дефектами подготовки исходных файлов.

© Коллектив авторов, 2023

© ООО «Издательство «ЛЕМА», 2023

**Национальный исследовательский центр  
«Курчатовский институт»  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Ордена Трудового Красного Знамени  
Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова**

**X ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
(с международным участием)  
«ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ХИМИЯ  
ОКСИДНЫХ СИСТЕМ И МАТЕРИАЛОВ»**

**Посвящается 75-летию ИХС РАН**

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ**

**25 – 28 сентября 2023 г.  
Санкт-Петербург**

УДК 544.015.35

## РАСЧЁТ СЕЧЕНИЙ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ СИСТЕМЫ SrO-La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub>

Ворожцов В.А.<sup>1</sup>, Альмяшев В.И.<sup>1,2,3</sup>, Столярова В.Л.<sup>1,4</sup>

<sup>1</sup>Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup>Научно-исследовательский технологический институт имени А.П. Александрова,  
Сосновый Бор, Россия

<sup>3</sup>Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»  
им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

<sup>4</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия  
st011089@student.spbu.ru

**Аннотация.** Впервые выполнен расчёт изотермических и политермических сечений фазовой диаграммы системы SrO-La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> с использованием базы данных NUCLEA. В изученной системе наблюдались равновесия с участием индивидуальных оксидов и соединений бинарных систем.

**Ключевые слова:** фазовые равновесия; моделирование; база данных NUCLEA; CALPHAD.

Система SrO-La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> является неотъемлемой частью многокомпонентных оксидных материалов, обладающих широким спектром физико-химических свойств, перспективных в различных областях техники и материаловедения. Например, системы, содержащие оксиды стронция, лантана и циркония, привлекают внимание благодаря уникальным электрохимическим характеристикам, открывающим возможность создания материалов для хранения и переноса кислорода [1] и перовскитных фотоэлементов [2]. Другое направление применения рассматриваемых систем связано с разработкой материалов ответственного назначения, устойчивых при экстремальных воздействиях окружающей среды вследствие повышенной термической и химической стабильности [3].

Однако препятствием для успешной разработки керамики на основе системы SrO-La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> является отсутствие информации о фазовых равновесиях в указанной системе, без которой затруднён корректный выбор условий синтеза и эксплуатации рассматриваемых материалов. Этим продиктована актуальность цели настоящей работы, которая заключается в расчёте изотермических и политермических сечений фазовой диаграммы системы SrO-La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> в рамках подхода CALPHAD.

Для проведения расчётов использована база данных NUCLEA и минимизатор энергии Гиббса GEMINI2 [4, 5]. В системе SrO-La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> рассчитана серия изотермических и политермических сечений фазовой диаграммы, что позволило проследить изменение фазовых соотношений в рассматриваемой системе при повышении температуры и изменении содержания компонентов. Отмечено, что в системе SrO-La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> наблюдаются фазовые равновесия с участием индивидуальных компонентов и соединений бинарных систем.

### Литература:

1. Klimkowicz A., Świerczek K., Takasaki A., et al. Oxygen storage capability in Co- and Fe-containing perovskite-type oxides // Solid State Ionics. 2014. Т. 257. С.23-28.
2. Amiri A., Shahbazian-Yassar R. Recent progress of high-entropy materials for energy storage and conversion // Journal of Materials Chemistry A. 2021. Т. 9. №. 2. С.782-823.
3. Zheng, Y., Zou, M., Zhang, W., et al. Electrical and thermal transport behaviours of high-entropy perovskite thermoelectric oxides // Journal of Advanced Ceramics. 2021. Т. 10. С.377-384.
4. Bakardjieva S., Barrachin M., Bechta S., et al. Improvement of the European thermodynamic database NUCLEA // Progress in Nuclear Energy. 2010. Т. 52. №. 1. С.84-96.
5. NUCLEA: Thermodynamic database for nuclear applications [Электронный ресурс]. URL: <http://thermodata.online.fr/nuclea.html> (дата обращения: 12.05.2023).

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда  
(проект № 23-13-00254).*

**Сборник тезисов докладов X Всероссийской конференции  
(с международным участием) «Высокотемпературная химия  
оксидных систем и материалов»**

Оригинал-макет подготовлен ИХС РАН  
199034, г. Санкт-Петербург, наб. Макарова, д. 2  
Верстка: Белоусова О.Л.

Подписано в печать 10.10.2023 г.  
Формат 60x84/8. Бумага офсетная. Печать цифровая.  
Усл. Печ. Л. 43,7. Тираж 250 экз.  
Заказ № 6133.

Отпечатано с оригинал-макета заказчика  
в ООО «Издательство «ЛЕМА»  
199004, Россия, Санкт-Петербург, 1-я линия В.О., д. 28  
тел.: 323-30-50, тел./факс: 323-67-74  
e-mail: [izd\\_lemma@mail.ru](mailto:izd_lemma@mail.ru)  
<http://lemaprint.ru>