

Санкт-Петербургское отделение РАН
Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
Институт химии твердого тела УрО РАН
Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева
Научный совет РАН по неорганической химии
Научный совет РАН по физической химии

XVI Симпозиум с международным участием ТЕРМОДИНАМИКА И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ (ТиМ-2025)

Тезисы докладов

30 июня – 4 июля 2025

**Санкт-Петербург
2025**

УДК 541.11 + 541.123 + 541.6
ББК Г531

ISBN 978-5-7629-3510-4

Термодинамика и материаловедение: Тезисы докладов XVI Симпозиума с международным участием, Санкт-Петербург, 30 июня – 4 июля 2025
/ ответственный за выпуск Е.К. Храпова. Санкт-Петербург: СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2025, 175 с.

Испарение и термодинамические свойства системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$

Ворожцов В.А.¹, Шилов А.Л.¹, Столярова В.Л.^{1,2}, Лопатин С.И.^{1,2},
Федорова А.В.^{1,2}, Альмяшев В.И.^{1,3}

¹ Филиал НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ – ИХС, Санкт-Петербург, Россия

² СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

³ НИТИ им. А.П. Александрова, Сосновый Бор, Россия

Керамика на основе высокоэнтропийных соединений, содержащих компоненты системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$, весьма перспективна, как неоднократно показано [1, 2], для разработки новых материалов с уникальными магнитными, электрохимическими, каталитическими свойствами и высокой термической стабильностью, включая защитные покрытия нового поколения. Синтез и эксплуатация указанных материалов, как правило, проводятся при высоких температурах, что обуславливает необходимость информации о процессах испарения и термодинамических свойствах, в частности, системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$.

В настоящей работе впервые изучены процессы испарения и термодинамические свойства системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3$ методом высокотемпературной масс-спектрометрии (ВТМС). Образцы рассматриваемой системы получены методом твердофазного синтеза из индивидуальных оксидов при максимальной температуре 1473 К в течение 30 часов. Идентификация образцов выполнена методами рентгенофлуоресцентного и рентгенофазового анализа. Методом ВТМС установлено, как и ранее в [3], что при нагревании образцов в температурном интервале 1400–1600 К Fe_2O_3 восстанавливается до FeO с выделением кислорода. Над образцами системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-FeO}$ идентифицированы молекулярные формы пара Fe, FeO и O_2 . Определены температурные зависимости парциального давления пара Fe над изученными образцами и активности FeO в системе $\text{La}_2\text{O}_3\text{-FeO}$ в температурном интервале 1650–1840 К, что позволило впервые оценить парциальные молярные энтальпии испарения и смешения FeO в исследованной системе. Найденные значения активности FeO в системе $\text{La}_2\text{O}_3\text{-FeO}$ свидетельствовали о наличии отрицательных отклонений от идеального поведения.

Концентрационная зависимость активности FeO в системе $\text{La}_2\text{O}_3\text{-FeO}$ аппроксимирована полиномами Редлиха–Кистера [4] и Вильсона [5], а также оптимизирована на основе обобщённой решёточной теории ассоциированных растворов [6]. Это позволило рассчитать активности La_2O_3 и избыточные энергии Гиббса в системе $\text{La}_2\text{O}_3\text{-FeO}$ при температуре 1840 К в предположении о существовании непрерывного расплава в изученном концентрационном интервале. Рассчитанные значения избыточной энергии Гиббса в системе $\text{La}_2\text{O}_3\text{-FeO}$ также свидетельствовали об отрицательных отклонениях от идеальности, что, однако, противоречило результатам расчётов с привлечением базы данных NUCLEA. Таким образом, полученные результаты требуют дальнейшего обсуждения.

Литература

1. Zhang Q., Saito F. *J Mater Sci*, 2001, 36(9), 2287-2290.
2. Stolyarova V.L., Vasileva I.I., Vorozhtcov V.A., Sokolova T.V. *Russ Chem Rev*, 2025, 94(2), RCR5156.
3. Stolyarova V.L., Lopatin S.I., Vorozhtcov V.A., et al. *High Temp*, 2023, 61(6), 790-800.
4. Redlich O., Kister A.T. *Ind Eng Chem*, 1948, 40(2), 341-345.
5. Orye R.V., Prausnitz J.M. *Ind Eng Chem*, 1965, 57(5), 18-26.
6. Barker J.A. *J Chem Phys*, 1952, 20(10), 1526-1532.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 23-13-00254.

Авторы благодарят Ресурсные центры Научного парка СПбГУ «Рентгенодифракционные методы исследования» и «Геомодель» за предоставленную возможность использования приборной базы, а также Криогенный отдел за поставки жидкого азота.