

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РАН  
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЁРДОГО ТЕЛА УРО РАН  
ИНСТИТУТ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ  
ИМ. А.В. НИКОЛАЕВА СО РАН

**ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
«ХИМИЯ ТВЁРДОГО ТЕЛА И  
ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ - 2022»  
И  
XIV Симпозиум «ТЕРМОДИНАМИКА И  
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ»**

10-13 октября 2022 г.

Екатеринбург • 2022

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РАН  
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЁРДОГО ТЕЛА УРО РАН  
ИНСТИТУТ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ  
ИМ. А.В. НИКОЛАЕВА СО РАН

ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ  
«ХИМИЯ ТВЁРДОГО ТЕЛА И  
ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ - 2022»  
и  
XIV Симпозиум «ТЕРМОДИНАМИКА И  
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ»

10-13 октября 2022 г.

г. Екатеринбург  
2022 год

УДК 544.2:544.3:546.05

*Редакционная коллегия:*

*М.В. Кузнецов, А.Н. Еняшин, Е.В. Поляков,  
Т.А. Денисова, Е.А. Богданова, В.Л. Кожевников*

*Рецензенты:*

*член-корреспондент РАН, профессор В.Г. Бамбуров,  
д.х.н. О.В. Бушкова, д.х.н. В.Н. Красильников*

**ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ - 2022» И XIV СИМПОЗИУМ «ТЕРМОДИНАМИКА И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ». - материалы XII-й Всероссийской конференции/Екатеринбург. - ИХТТ УрО РАН. Издательство «ДжиЛайм» ООО - 2022. – 452 с.**

Сборник трудов содержит представительную выборку результатов отечественных исследований последних лет в области химии твёрдого тела, синтеза и физикохимии функциональных материалов. Тематический круг рассмотренных вопросов включает химические проблемы материалов для получения и преобразования энергии, синтез неорганических функциональных материалов, методы моделирования свойств функциональных материалов. В сборнике отражены итоги традиционного XIV Симпозиума «Термодинамика и материаловедение» по направлениям: синтез и аттестация перспективных веществ и материалов; фазовые равновесия; приборы и техника термодинамических исследований. Приведённые материалы адресованы учёным – специалистам в области химии и наук о материалах, инженерам, аспирантам и студентам университетов химического профиля, инженерно-техническим работникам химико-металлургического, энергетического и ядерно-химического профиля.

\*

*Конференции по химии твёрдого тела ведут своё начало с декабря 1973 года - даты проведения конференции молодых учёных и специалистов СССР «Физика и химия твёрдого тела» в г.Свердловске (ныне г.Екатеринбурге). Настоящая конференция является 12-й по этому направлению и приурочена к 90-летию со дня основания Института химии твёрдого тела Уральского отделения Российской академии наук.*

ISBN 978-5-905545-32-0

© ИХТТ УрО РАН  
© М.В. Кузнецов

### **Программный комитет:**

Альмяшева О.В., д.х.н. СПбГЭТУ "ЛЭТИ" (Санкт-Петербург)  
Бамбуров В.Г., чл.-корр. РАН, ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Бушкова О.В., д.х.н., ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Васильева И.В., д.х.н., ИНХ СО РАН (Новосибирск)  
Гельфонд Н.В., д.х.н., ИНХ СО РАН (Новосибирск)  
Денисова Т.А., д.х.н. ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Дерябина А.В., к.и.н., ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Еняшин А.Н., к.х.н., ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Леонидов И.А., к.х.н., ИХТТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Марков В.Ф., д.х.н., УрФУ (Екатеринбург)  
Ремпель А.А., академик, ИМЕТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Титова С.Г., д.х.н., ИМЕТ УрО РАН (Екатеринбург)  
Черепанов В.А., д.х.н., УрФУ (Екатеринбург)

### **Состав организационного комитета:**

Альмяшева О.В., СПбГЭТУ "ЛЭТИ", д.х.н.  
Бамбуров В.Г., ИХТТ УрО РАН, чл.-корр. РАН  
Болдырев В.В., ИХКГ СО РАН, академик  
Бушкова О.В., ИХТТ УрО РАН, д.х.н.  
Гавричев К.С., ИОНХ РАН, д.х.н.  
Гнеденков С.В., ИХ ДВО РАН, чл.-корр. РАН  
Гудилин Е.А., МГУ, чл.-корр. РАН  
Гусаров В.В., ФТИ им. А.Ф. Иоффе, чл.-корр. РАН  
Дыбцев Д.Н., ИНХ СО РАН, д.х.н.  
Зайков Ю.П., ИВТЭ УрО РАН, д.х.н.  
Зверева И.А., СПбГУ, д.х.н.  
Морозова Н.Б., ИНХ СО РАН, д.х.н.  
Наумов Н.Г., ИНХ СО РАН, д.х.н.  
Немудрый А.П., ИХТТМ СО РАН, чл.-корр. РАН  
Окотруб А.В., ИНХ СО РАН, д.ф.-м.н.  
Ремпель А.А., ИМЕТ УрО РАН, академик  
Русанов А.И., СПбГУ, академик  
Станкус С.В., ИТ СО РАН, д.ф.-м.н.  
Столярова В.Л., СПбГУ, чл.-корр. РАН  
Тойка А.М., СПбГУ, д.х.н.  
Успенская И.А., МГУ, д.х.н.  
Федин В.П., ИНХ СО РАН, чл.-корр. РАН  
Хайкина Е.Г., БИП СО РАН, д.х.н.  
Шевченко В.Я., ИХС РАН, академик  
Шубин Ю.В., ИНХ СО РАН, д.х.н.  
Ярославцев А.Б., ИОНХ РАН, академик

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГАФНИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ: ЭКСПЕРИМЕНТ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

В.Л. Столярова<sup>1</sup>, В.А. Ворожцов<sup>1</sup>, А.Л. Шилов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>СПбГУ, Университетская наб., 7-9, Санкт-Петербург, 199034

<sup>2</sup>ИХС РАН, наб. Адм. Макарова, 2, Санкт-Петербург, 199034

В настоящей работе обобщены полученные впервые в последние годы экспериментальные данные о процессах испарения и термодинамических свойствах бинарных, трёх- и четырёхкомпонентных систем на основе оксидов гафния и РЭЭ, изученные масс-спектрометрическим эффузионным методом Кнудсена при температурах до 3000 К. Проиллюстрированы потенциальные возможности полуэмпирических и статистико-термодинамического подходов для прогнозирования термодинамических свойств рассматриваемых систем при высоких температурах по данным о равновесиях в соответствующих бинарных системах. Обсуждаются достоинства полуэмпирических методов расчёта, включая методы Колера,

Редлиха-Кистера и Вильсона, а также на основе обобщённой решёточной теории ассоциированных при сопоставлении с экспериментальными результатами.

Установлено, что наилучшее соответствие между рассчитанными на основе полуэмпирических подходов и экспериментальными данными получено методом Вильсона. В частности, в системе  $\text{Sm}_2\text{O}_3\text{-Y}_2\text{O}_3\text{-HfO}_2$  применение метода Вильсона для оценки величин избыточной энергии Гиббса оправдано в концентрационных интервалах, удалённых от бинарных систем. Отметим, что наилучшим соответствием с экспериментальными данными об активностях оксидов лантаноидов в исследованных четырёхкомпонентных системах характеризуются результаты, полученные на основе подхода ОРТАР по данным для соответствующих бинарных систем.

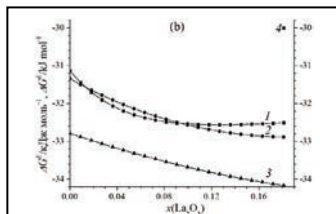


Рисунок. Избыточные энергии Гиббса в системе  $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Sm}_2\text{O}_3\text{-Y}_2\text{O}_3\text{-HfO}_2$  при 2330 К, рассчитанные полуэмпирическими методами Колера (1), Редлиха-Кистера (2), Вильсона (3) и на основе подхода ОРТАР (4) на концентрационном сечении с постоянным соотношением мол. дол. компонентов, равным:  $x_{\text{Sm}_2\text{O}_3}/x_{\text{HfO}_2} = 0.37$ .