

**С. М. ЛОГВИНКОВ, О. Н. БОРИСЕНКО, Н. С. ЦАПКО, Г. Н. ШАБАНОВА, А. Н. КОРОГОДСКАЯ,  
В. Н. ШУМЕЙКО, Е. А. ГАПОНОВА**

### **РАСЧЁТНАЯ ОЦЕНКА СТЕПЕНИ СЛОЖНОСТИ СУБСОЛИДУСНОГО СТРОЕНИЯ ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Исследование диаграмм состояния многокомпонентных физико-химических систем является наиболее наукоемкой задачей материаловедения. Без знаний о строении диаграмм состояния таких систем технологом невозможно прогнозировать фазовый состав материалов при их производстве и применении изделий из них, существенно усложняется проведение системного анализа результатов экспериментальных исследований по оптимизации свойств разрабатываемых материалов. В технологии огнеупоров определяющей стадией производства является твердофазное спекание, что обуславливает особую значимость информации о субсолидусном строении диаграмм состояния физико-химических систем, представленных набором компонентов в соответствии с планируемым фазовым составом материалов. Трехкомпонентные системы, простыми компонентами которых являются тугоплавкие оксиды, составляют физико-химическую основу большинства огнеупоров массового производства и их субсолидусное строение достаточно наглядно отображается в концентрационном треугольнике системы набором треугольников, вершинами которых являются точки составов соединений. Исследование посвящено установлению аналитической зависимости между количеством двойных и тройных соединений и числом всех возможных отрезков соединительных прямых между точками составов соединений, а также точек пересечения коннод между собой. При проведении исследований применялись общие принципы системного анализа, логические методы и терминология физико-химического анализа многокомпонентных систем, а также сведения по элементарной математике из разделов по числовым рядам, основам комбинаторики и алгебры. Соответствующие аналитические выражения дают возможность расчётного определения количественных классификационных признаков при таксономии многокомпонентных систем по степени сложности строения их субсолидусных областей, в частности, при сопоставлении сложности исследований трехкомпонентных оксидных систем и их типизации. Полученные формулы апробированы для расчетов на примерах конкретных оксидных систем. Результаты исследований позволяют получать важные количественные характеристики для оценки степени сложности субсолидусного строения трехкомпонентных систем.

**Ключевые слова:** трехкомпонентная система, субсолидусное строение, коннода, треугольник, точки составов, двойные соединения.

**С. М. ЛОГВИНКОВ, О. М. БОРИСЕНКО, Н. С. ЦАПКО, Г. М. ШАБАНОВА, А. М. КОРОГОДСЬКА,  
В. М. ШУМЕЙКО, О. О. ГАПОНОВА**

### **РОЗРАХУНКОВА ОЦІНКА СТУПЕНЯ СКЛАДНОСТІ СУБСОЛІДУСНОЇ БУДОВИ ТРИКОМПОНЕНТНИХ ФИЗИКО-ХІМІЧНИХ СИСТЕМ**

Дослідження діаграм стану багатокомпонентних фізико-хімічних систем є найбільш наукомістким завданням матеріалознавства. Без знань про будову діаграм стану таких систем технологом неможливо прогнозувати фазовий склад матеріалів при їх виробництві і застосуванні виробів з них, істотно ускладнюється проведення системного аналізу результатів експериментальних досліджень щодо оптимізації властивостей розроблюваних матеріалів. В технології вогнетривів визначальною стадією виробництва є твердофазне спікання, що обумовлює особливу значущість інформації про субсолидусну будову діаграм стану фізико-хімічних систем, представлених набором компонентів відповідно до запланованого фазового складу матеріалів. Трикомпонентні системи, простими компонентами яких є тугоплавкі оксиди, складають фізико-хімічну основу більшості вогнетривів масового виробництва і їх субсолидусна будова досить наочно відображається в концентраційному трикутнику системи набором трикутників, вершинами яких є точки складів сполук. Дослідження присвячене встановленню аналитичної залежності між кількістю подвійних і потрійних сполук і числом усіх можливих відрізків з'єднувальних прямих між точками складів сполук, а також точок перетину коннод між собою. При проведенні досліджень застосовувалися загальні принципи системного аналізу, логічні методи і термінологія фізико-хімічного аналізу багатокомпонентних систем, а також відомості з елементарної математики з розділів по числовим рядам, основам комбінаторики і алгебри. Відповідні аналітичні вирази дають можливість розрахункового визначення кількісних класифікаційних ознак при таксономії багатокомпонентних систем за ступенем складності будови їх субсолидусних областей, зокрема, при зіставленні складності досліджень трикомпонентних оксидних систем і їх типізації. Отримані формули апробовані для розрахунків на прикладах конкретних оксидних систем. Результати досліджень дозволяють отримувати важливі кількісні характеристики для оцінки ступеня складності субсолидусного будови трикомпонентних систем.

**Ключові слова:** трехкомпонентная система, субсолидусное будова, коннода, трикутник, точки складів, подвійні сполуки.

**S. M. LOGVINKOV, O. N. BORISENKO, N. S. TSAPKO, G. N. SHABANOVA, A. N. KOROHODSKA,  
V. N. SHUMEJKO, O. O. GAPONOVA**

### **CALCULATED EVALUATION OF THE DEGREE OF SUBSOLIDUS STRUCTURE COMPLEXITY OF THE PHYSICO-CHEMICAL THREE-COMPONENT SYSTEMS**

The study of state diagrams of multicomponent physicochemical systems is the most science-intensive task of materials science. Without knowledge about the structure of the state diagrams of such systems, it is impossible for technologists to predict the phase composition of materials during their production and use of products from them; the systematic analysis of the results of experimental studies to optimize the properties of the materials being developed becomes much more complicated. In refractory technology, the defining stage of production is solid-phase sintering, which makes

© С. М. Логвинков, О. Н. Борисенко, Н. С. Цапко, Г. Н. Шабанова, А. Н. Корогодская, и др., 2020

the information on the subsolidus structure of state diagrams of physicochemical systems represented by a set of components in accordance with the planned phase composition of materials particularly important. Three-component systems, the simple components of which are refractory oxides, constitute the physicochemical basis of most mass-produced refractories and their subsolidus structure is quite clearly displayed in the concentration triangle of the system by a set of triangles, the vertices of which are the points of the composition of the compounds. The study is devoted to the establishment of an analytical relationship between the number of double and triple compounds and the number of all possible segments of connecting lines between the points of the composition of the connections, as well as the points of intersection of the compounds between themselves. During the research, the general principles of systems analysis, logical methods and terminology of physicochemical analysis of multicomponent systems, as well as information on elementary mathematics from the sections on numerical series, the basics of combinatorics and algebra were used. The corresponding analytical expressions make it possible to calculate the quantitative classification characteristics in the taxonomy of multicomponent systems by the degree of complexity of the structure of their subsolidus regions, in particular, when comparing the complexity of studies of three-component oxide systems and their typification. The formulas obtained were tested for calculations using examples of specific oxide systems. The research results allow one to obtain important quantitative characteristics for assessing the degree of complexity of the subsolidus structure of three-component systems.

**Keywords:** three-component system, subsolidus structure, connode, triangle, composition points, double compounds.

**Введение.** Исследование диаграмм состояния многокомпонентных физико-химических систем является наиболее наукоемкой задачей материаловедения. Без знаний о строении диаграмм состояния таких систем технологам невозможно прогнозировать фазовый состав материалов при их производстве и применении изделий из них, существенно усложняется проведение системного анализа результатов экспериментальных исследований по оптимизации свойств разрабатываемых материалов. В технологии огнеупоров определяющей стадией производства является твердофазное спекание, что обуславливает особую значимость информации о субсолидусном строении диаграмм состояния физико-химических систем, представленных набором компонентов в соответствии с планируемым фазовым составом материалов.

**Исходные положения, методики и анализ систем с двойными соединениями в двух подсистемах.** Трехкомпонентные системы, простыми компонентами которых являются тугоплавкие оксиды, составляют физико-химическую основу большинства огнеупоров массового производства и их субсолидусное строение достаточно наглядно отображается в концентрационном треугольнике системы набором треугольников, вершинами которых являются точки составов соединений. По сути, исследование субсолидусного строения трехкомпонентных систем предполагает выделение из многообразия возможных треугольников, построенных на точках составов самих компонентов, двойных и тройных соединений, лишь единственной комбинации треугольников, называемых элементарными. В элементарных треугольниках вершины отвечают точкам составов определенных соединений, которые в комбинациях по два и по три не реагируют химически между собой в конкретном диапазоне температур или употребляют термин «сосуществуют».

Процедура определения элементарных треугольников носит название триангуляция концентрационного треугольника физико-химической системы. Эта процедура чрезвычайно сложна при экспериментальном изучении всех сосуществующих комбинаций соединений по два и по три в температурном диапазоне до плавления соответствующих композиций, то есть в субсолидусной области. Для уменьшения трудоёмкости триангуляции прибегают к ее термодинамическому прогнозированию с помощью расчёта и анализа изменения энергии Гиббса в зависимости от температуры для всех вариантов твердофазных реакций обмена между соединениями системы. Количество экспериментов при этом значительно ограничивается и они выполняются, в основном, с позиций контроля обеспечения запланированного фазового состава композиций, что особенно ценно при исследовании ранее не изученных систем или при ревизии устаревших данных. Общее количество элементарных треугольников в субсолидусной области диаграмм состояния ограничено количеством двойных и тройных соединений в системе и легко рассчитывается по правилу Курнакова Н.С. [1]. Вместе с тем, аналитические зависимости для расчёта количества всех возможных вариантов твердофазных реакций, для определения сторон (комбинаций соединений по два) и самих элементарных треугольников (комбинации соединений по три), – не известны. В настоящее время исследователи составляют модельные уравнения твердофазных реакций обмена последовательным перебором всех сочетаний точек составов соединений в комбинациях по два и по три в зависимости от возможных типов твердофазных реакций «2-2» или «2-3»:



где  $A, B, C, D, F$  – условные составы исходных ком-

понентов, двойных и тройных соединений физико-химической системы.

Способ перебора несложно реализовать, когда в системе отсутствуют тройные соединения, а двойные соединения отмечаются в одной или двух подсистемах (на одной или двух сторонах концентрационного треугольника, соответственно). В противном случае процедура значительно усложняется, возможно дублирование или даже утрата некоторых сочетаний в результате значительного роста их количества при увеличении количества соединений в системе.

Установление аналитической зависимости между количеством двойных и тройных соединений и числом всех возможных отрезков соединительных прямых между точками составов соединений (для упрощения будем называть их коннодами, хотя название справедливо лишь для элементарных треугольников), а также точек пересечения коннод между собой (отвечают количеству твердофазных реакций, которые следует смоделировать и подвергнуть термодинамическому анализу), – является актуальной задачей физико-химического анализа многокомпонентных систем. Решение этой наукоемкой задачи облегчает операции прогнозирования и контроля точности определения субсолидусного строения диаграмм состояния. Кроме того, соответствующее аналитическое выражение даст возможность расчётного определения количественных классификационных признаков при таксономии многокомпонентных систем по степени сложности строения их субсолидусных областей, в частности, при сопоставлении сложности исследований трехкомпонентных оксидных систем и их типизации. Именно на решение обозначенной задачи направлена цель настоящего исследования.

При проведении исследований применялись общие принципы системного анализа [2], логические методы и терминология физико-химического анализа многокомпонентных систем [1, 3, 4], а также сведения по элементарной математике из разделов по числовым рядам, основам комбинаторики и алгебры [5, 6]. Сведения по конкретным диаграммам состояния для апробации полученных результатов взяты из монографий [3, 4, 7-12]. Для сокращения будем точки составов двойных соединений называть просто точками.

Поиск решения поставленной задачи начнём с рассмотрения наиболее простых вариантов трехкомпонентных систем, постепенно повышая их сложность вплоть до наиболее возможной. Пусть в трехкомпонентной системе присутствуют двойные соединения лишь в одной из трёх подсистем, что соответствует геометрическому образу – равносторонний треугольник с точками на одной из сторон. Три-

ангуляция в этом случае безальтернативна и реализуется коннодами из противоположной вершины к точкам на стороне концентрационного треугольника. При этом число коннод ( $k$ ) будет равно числу двойных соединений ( $d$ ), а точки пересечения коннод между собой ( $P$ ) отсутствуют. Отсутствие точек пересечения коннод обозначает, что ни одной твердофазной реакции обмена между соединениями системы смоделировать невозможно.

Рассмотрим трехкомпонентные системы с наличием двойных соединений в двух подсистемах и отметим очевидные (рис. 1) закономерности:

1. При любом количестве двойных соединений одна коннода образуется автоматически между точками наиболее близкими к вершине противоположной подсистемы, в которой двойные соединения отсутствуют. Эта коннода не даёт точек пересечений.

Максимальное количество коннод и точек их пересечения образуется в вариантах, когда двойные соединения наиболее равномерно распределены в каждой из двух подсистем.

2. В образовании возможных коннод участвуют две из трёх вершин системы и все точки составов двойных соединений.

3. Суммарное количество возможных коннод, исходящих из вершин системы, равно количеству двойных соединений. Оставшаяся часть возможных коннод может быть определена через число сочетаний точек в комбинациях по две с вычетом «вырожденных» сочетаний, то есть нереализуемых из-за расположения на одной прямой (на каждой из двух сторон системы, где присутствуют составы двойных соединений). Для вычисления «вырожденных» сочетаний учтём, что равномерное распределение точек по двум подсистемам предусматривает два варианта в зависимости от чётности при нечётности значения  $d$ . Меньшее ( $V_1$ ) и большее ( $V_2$ ) число точек при равномерном (с допустимой разницей в 1 единицу) их распределении в двух подсистемах определяются выражениями:

$$V_1 = \frac{d}{2} - \frac{1}{4} + \frac{(-1)^d}{4}, \quad (3)$$

$$V_2 = d - V_1 = \frac{d}{2} + \frac{1}{4} - \frac{(-1)^d}{4}. \quad (4)$$

При строго определённых значениях  $V_1$  и  $V_2$  количество возможных коннод определяется формулой:

$$k = d + \frac{d!}{2!(d-2)!} - \left( \frac{V_1!}{2!(V_1-2)!} + \frac{V_2!}{2!(V_2-2)!} \right). \quad (5)$$

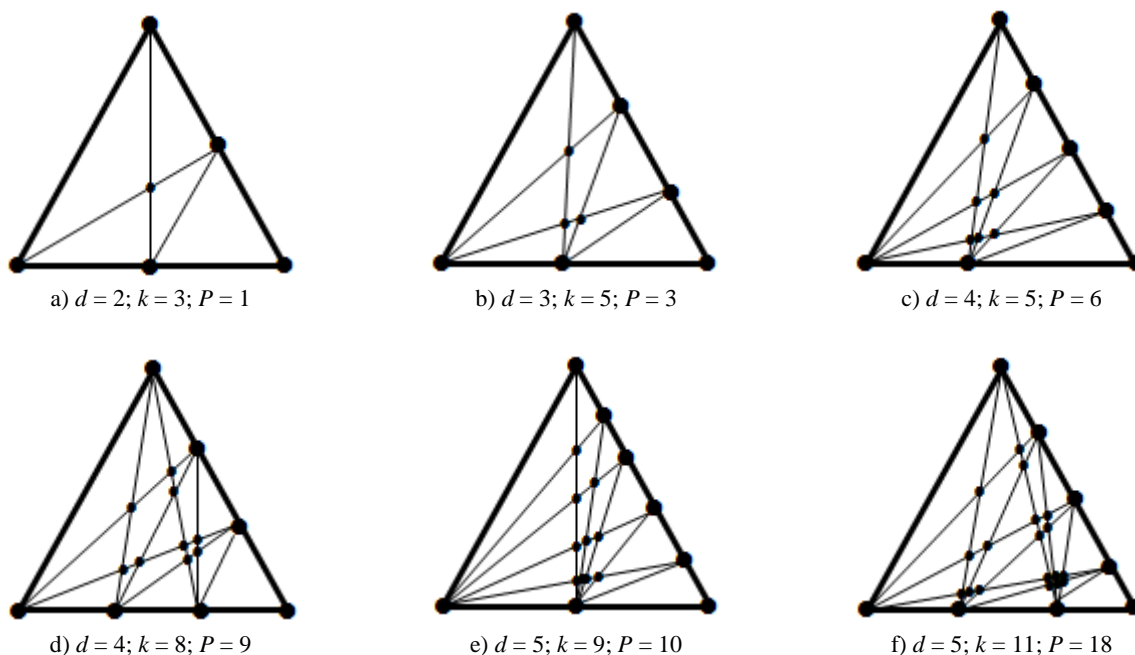


Рисунок 1 – Варианты трехкомпонентных систем с двойными соединениями в двух подсистемах

Для небольших значений  $d$  можно убедиться в правильности формулы (5) по рис. 1, а для больших значений  $d$  и упрощения громоздких выражений для записи факториалов можно использовать приближенную формулу Стирлинга [5], точность которой возрастает с увеличением значения  $d$ . Однако можно вывести гораздо более удобную для практических расчетов формулу. При этом следует заметить, что каждая точка на одной из сторон концентрационного треугольника может образовать конноду с каждой из точек на другой стороне, то есть количество коннод будет отвечать произведению  $V_1 \cdot V_2$ , а формула (5) примет простой вид:

$$k = d + V_1 \cdot V_2. \quad (6)$$

К формуле (6) можно прийти и из других рассуждений, если причислить точки вершин к числу точек составов двойных соединений на соответствующих сторонах концентрационного треугольника и учесть совпадение одной из образующихся коннод со стороной концентрационного треугольника:

$$\begin{aligned} k &= (V_1 + 1) \cdot (V_2 + 1) - 1 = \\ &= V_1 + V_2 + V_1 \cdot V_2 = d + V_1 \cdot V_2 \end{aligned} \quad (7)$$

Для определения количества возможных пересечений между коннодами заметим, что они образуются как пересечения диагоналей четырехугольников, в которых две вершины являются точками на одной сто-

роне концентрационного треугольника, а две другие – точками на противоположной стороне. Поэтому количество точек пересечения коннод можно рассчитывать как число парных комбинаций коннод, образующихся в результате двойных перестановок точек (включаются соответствующие вершины) на каждой из двух сторон концентрационного треугольника:

$$\begin{aligned} P &= \frac{(V_1 + 1)!}{2!(V_1 + 1 - 2)!} \cdot \frac{(V_2 + 1)!}{2!(V_2 + 1 - 2)!} = \\ &= \frac{V_1 \cdot V_2 \cdot (V_1 + 1) \cdot (V_2 + 1)}{4}. \end{aligned} \quad (8)$$

Справедливость формулы для расчета количества пересечений коннод (соответствуют числу твердофазных реакций обмена) несложно проверить по приведенным на рис. 1 вариантам систем.

**Анализ систем с наличием двойных соединений во всех подсистемах.** Системы с наличием двойных соединений во всех подсистемах являются усложненным вариантом по сравнению с рассмотренными ранее. Очевидно, что точки составов двойных соединений могут располагаться на сторонах концентрационного треугольника неравномерно. Однако уже было установлено, что максимальное количество точек пересечения коннод наблюдается при наиболее равномерном варианте распределения точек по сторонам концентрационного треугольника. В случае, когда задано только общее количество двойных соеди-

нений ( $d$ ) и не известно их распределение по подсистемам, могут наблюдаться три варианта в зависимости от остатка при делении  $d$  на три. Алгоритм распределения точек в подсистемах должен предусматривать первоначальное деление числа на 3 с определением минимального целого числа наиболее близкого к значению  $d/3$  и остатка. Затем остаток (он может быть представлен 1 или 2) следует поделить на две части ранее указанным способом (см. формулы (3), (4)). Для больших чисел методы деления на три с остатком разработаны [6], что позволяет находить количество соединений в каждой подсистеме при наиболее равномерном их распределении и больших значениях  $d$ . Для реальных физико-химических систем количество двойных соединений в каждой подсистеме известно (для отличия от предыдущего варианта диаграмм обозначим их  $n_1, n_2$  и  $n_3$ ).

В системах с небольшим числом двойных соединений в каждой из подсистем количество коннод и точек пересечения несложно подсчитать (рис. 2).

Для вывода формулы для расчета количества точек пересечения коннод в системах, где двойные соединения распределены по всем подсистемам будем рассматривать равномерное распределение точек  $n_1 = n_2 = n_3 = 2$  в условной системе (рис. 3).

Сплошным отмечены конноды между точками подсистем  $n_1$  и  $n_2$ , которые с учетом точек вершин дают количество пересечений (сплошные точки):

$$P_1 = \frac{(n_1 + 1)! \cdot (n_2 + 1)!}{2!(n_1 + 1 - 2)! \cdot 2!(n_2 + 1 - 2)!} = \frac{n_1 \cdot n_2 \cdot (n_1 + 1) \cdot (n_2 + 1)}{4} \quad (11)$$

Индекс при  $P$  отображает, что это лишь часть общего количества точек пересечения во всей системе. Не сложно подсчитать по (11) и проверить на рис. 3 значение  $P_1$  для рассматриваемой системы:  $P_1 = 9$ .

Пунктирными линиями обозначены конноды между точками подсистем  $n_1$  и  $n_3$  (две таких конноды – к вершине  $C$  – совпадают с ранее обозначенными сплошными линиями). Количество пересечений между пунктирными коннодами (на рис. 3 обозначены пустыми точками):

$$P_2 = \frac{(n_1 + 1)! \cdot n_3 + 1!}{2! n_1 + 1 - 2! \cdot 2! n_3 + 1 - 2!} = \frac{n_1 \cdot n_3 \cdot (n_1 + 1) \cdot (n_3 + 1)}{4} \quad (12)$$

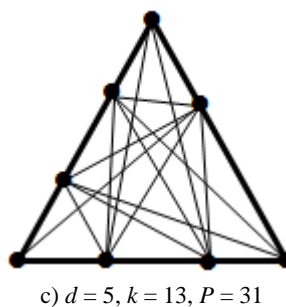
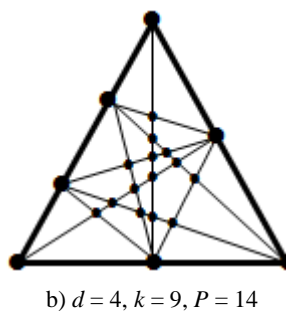
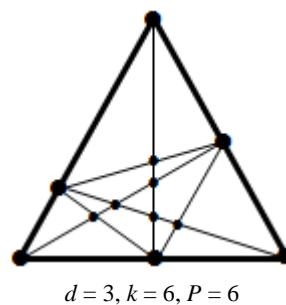


Рисунок 2 – Варианты систем с небольшим количеством соединений в каждой подсистеме

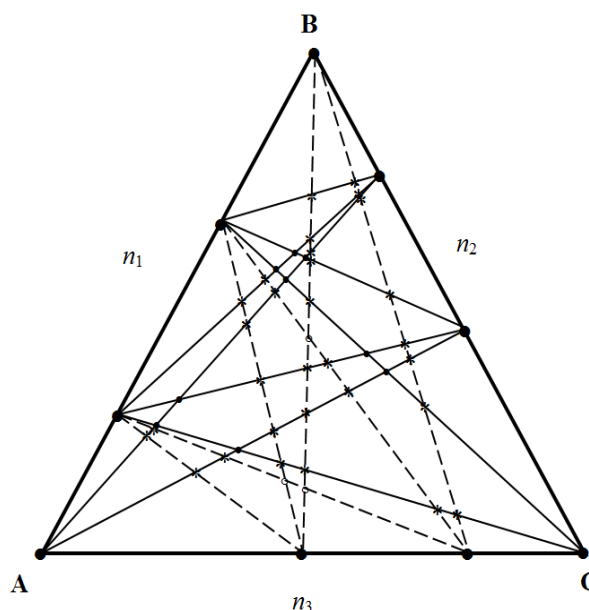


Рисунок 3 – Анализируемая система А – В – С (отображена лишь часть коннод)

Расчётное значение для  $P_2$  по (12) совпадает с количеством пустых точек на рис. 3:  $P_2 = 3$ .

Кроме  $P_1$  и  $P_2$  следует учесть и количество точек пересечения сплошных и пунктирных коннод (на рис. 3 отмечены звездочками). Для этого заметим, что конноды из вершины В на точки подсистемы  $n_3$  пересекают все сплошные конноды, число которых будет  $n_1 + n_2 + n_1 \cdot n_2$ , соответственно, количество точек пересечения составит:

$$P_3 = n_3 \cdot (n_1 + n_2 + n_1 \cdot n_2). \quad (13)$$

В рассматриваемом примере (рис. 3) и расчетное значение по (13) совпадают:  $P_3 = 16$ .

Теперь обратим внимание, что две пунктирные конноды из верхней точки подсистемы  $n_1$  пересекают уже не все сплошные конноды, так как две сплошные конноды из этой же точки на точки подсистемы  $n_2$  и вершину С оказываются выше расположенными (рис. 3). Поэтому пересекаются на  $(n_2 + 1)$  меньшее число коннод и образуется следующее количество точек пересечения:

$$P_4 = n_3 \cdot [n_1 + n_2 + n_1 \cdot n_2 - (n_2 + 1)] = n_3 \cdot (n_1 + n_1 \cdot n_2 - 1). \quad (14)$$

Несложно проверить тождественность: расчетное значение  $P_4 = 10$  и фактическое (рис. 3).

Аналогична ситуация и с нижней точкой подсистемы  $n_1$ , но пересечений пунктирных и сплошных коннод наблюдается еще на  $(n_2 + 1)$  меньше, так как сплошные конноды из этой точки на точки подсистемы  $n_2$  и вершину С также оказываются более высоко расположенными и не пересекаются (рис. 3). Соответственно, образуется следующее количество точек пересечения:

$$P_5 = n_3 \cdot [n_1 + n_2 + n_1 \cdot n_2 - 2(n_2 + 1)]. \quad (15)$$

Количество соответствующих точек пересечения коннод на рис. 3 и расчетное по (15) – совпадает:  $P_5 = 4$ .

При произвольном значении  $n_1$  слагаемых, подобных  $P_4$  и  $P_5$ , будет  $n_1$  штук и определяться они будут из аналогичных выражений ((14), (15)), в которых множители при отрицательном члене будут первыми натуральными числами от 1, 2 ... до  $n_1$ , то есть представлять простую арифметическую прогрессию. Сумма такой прогрессии определяется формулой:  $0,5 \cdot n_1 \cdot (n_1 + 1)$ , с учетом которой общее количество точек пересечения, определяемых при суммировании  $P_4, P_5 \dots P_{n_1}$  ( $P_{\Sigma 1}$ ):

$$P_{\Sigma 1} = n_1 \cdot n_3 \cdot (n_1 + n_2 + n_1 \cdot n_2) - n_3 \cdot 0,5 \cdot n_1 \cdot (n_1 + 1) \cdot (n_2 + 1). \quad (16)$$

В рассматриваемом примере только два слагаемых:  $P_4 = 10, P_5 = 4$ , то есть в сумме 14, что соответствует рассчитанному по (16) значению:  $P_{\Sigma 1} = 14$ .

Теперь можно аналитически рассчитать количество точек пересечения на рис. 3 ( $S_1$ ), как сумму  $P_1, P_2, P_3$  и  $P_{\Sigma 1}$ :

$$S_1 = 0,25 \cdot n_1 \cdot n_2 \cdot (n_1 + 1) \cdot (n_2 + 1) + 0,25 \cdot n_1 \cdot n_3 \cdot (n_1 + 1) \cdot (n_3 + 1) + n_3 \cdot (n_1 + n_2 + n_1 \cdot n_2) + n_1 \cdot n_3 \cdot (n_1 + n_2 + n_1 \cdot n_2) - 0,5 \cdot n_1 \cdot n_3 \cdot (n_1 + 1) \cdot (n_2 + 1) \quad (17)$$

Для варианта равномерного распределения двойных соединений по подсистемам ( $n_1 = n_2 = n_3 = n$ ) громоздкое уравнение для  $S_1$  упрощается:

$$S_1 = n^2 \cdot (n^2 + 2,5 \cdot n + 1,5). \quad (18)$$

Справедливость формул (17), (18) для рассматриваемого варианта системы проверить не сложно:  $S_1 = 42$ .

Отметим, что  $S_1$  не включает точек пересечения коннод, которые не нанесены на рис. 3, – между точками подсистем  $n_2$  и  $n_3$ . Эти конноды могут пересекаться между собой и с уже нанесенными на рис. 3 сплошными и пунктирными коннодами. Между собой эти условные (отсутствующие на рис. 3) конноды дают следующее количество точек пересечений:

$$P_6 = \frac{n_2!}{2!} \cdot \frac{n_3!}{2!} \cdot \frac{n_3!}{n_3 - 2!} = \frac{n_2 \cdot n_3 \cdot (n_2 - 1) \cdot (n_3 - 1)}{4}. \quad (19)$$

Не сложно проверить, что в рассматриваемом примере  $P_6 = 1$ .

Условные конноды из верхней точки подсистемы  $n_3$  будут пересекать все сплошные конноды, за исключением трех, выходящих из этой точки на точки подсистемы  $n_1$  и вершину А (рис. 3). С учетом того, что количество коннод из анализируемой точки будет равно числу точек в подсистеме  $n_3$ , количество пересечений определяется:

$$P_7 = n_3 \cdot [n_1 + n_2 + n_1 \cdot n_2 - (n_1 + 1)]. \quad (20)$$

В рассматриваемом случае (рис. 3) значение  $P_7 = 10$ , что отвечает расчету по формуле (20).

Условные конноды из нижней точки подсистемы

$n_2$  (рис. 3) также дадут пересечения со сплошными коннодами. Но ещё на  $(n_1 + 1)$  меньшее количество:

$$P_8 = n_3 \cdot [n_1 + n_2 + n_1 \cdot n_2 - 2(n_1 + 1)]. \quad (21)$$

Тождественность расчетного значения  $P_8 = 4$ , что несложно проверить при соответствующей достройке рис. 3.

Снова обратим внимание, что при произвольном значении  $n_2$  коэффициенты перед отрицательными членами в выражениях типа (20), (21) будут первыми натуральными числами от 1, 2 ... до  $n_2$ . Применяя формулу суммы членов арифметической прогрессии можно получить выражение для суммы  $P_7, P_8 \dots P_{n_2}$  ( $P_{\Sigma 2}$ ):

$$P_{\Sigma 2} = n_2 \cdot n_3 \cdot (n_1 + n_2 + n_1 \cdot n_2) - 0,5 \cdot n_2 \cdot n_3 \cdot (n_1 + 1)(n_2 + 1). \quad (22)$$

Тождественность вычисленного значения  $P_{\Sigma 2} = 14$  и соответствующей суммы  $P_7$  и  $P_8$  в рассматриваемом примере соблюдается.

Теперь следует учесть точки пересечения условных и пунктирных коннод (рис. 3). Всего коннод между точками подсистем  $n_1$  и  $n_3$  может быть  $n_1 + n_3 + n_1 \cdot n_3$ , но конноды от вершины  $C$  (их  $n_1$  штук) уже учтены и они отображены сплошными коннодами. Кроме того, пунктирные конноды из точки подсистемы  $n_3$ , расположенной ближе к вершине  $A$ , на точки подсистемы  $n_1$  отказываются «отсеченными» от участия в пересечениях с рассматриваемыми коннодами между точками подсистем  $n_2$  и  $n_3$ . Всего таких «отсеченных» коннод  $(n_1 + 1)$  штуки их также следует исключить из числа коннод, которые могут быть пересечены ( $k_n$ ):

$$k_n = (n_1 + n_3 + n_1 \cdot n_3) - n_1 - (n_1 + 1) = n_3 - n_1 + n_1 \cdot n_3 - 1. \quad (23)$$

В рассматриваемом случае значение  $k_n = 3$ .

Обратим внимание, что не все из условных коннод будут пересекать отмеченные выше (23) конноды. Так, из верхней точки подсистемы  $n_2$  будет исходить  $n_3$  штук коннод, но идущая на точку ближе расположенную к вершине  $A$ , – не будет пересекать пунктирных коннод (рис. 3). Аналогичная ситуация и для нижней точки подсистемы  $n_2$ . Фактически, следует исключить одно соединение подсистемы  $n_3$  при подсчёте пересекающихся коннод:  $n_2 \cdot (n_3 - 1) = 2$ . При пересечении такого количества коннод с пунктирными коннодами, число которых определяет формула (23), будет образовываться следующее количество точек пересечения:

$$P_9 = [(n_3 - n_1 + n_1 \cdot n_3 - n_1 - (n_1 + 1)) \cdot n_2 \cdot (n_3 - 1)]. \quad (24)$$

Не сложно убедиться в тождественности рассчитанного по (24) значения  $P_9 = 6$  фактическому числу точек при достройке рис. 3.

Суммарное количество точек пересечения условных коннод с имеющимися на рис. 3 ( $S_2$ ) определяется сложением  $P_6, P_{\Sigma 2}$  и  $P_9$ :

$$S_2 = 0,25 \cdot n_2 \cdot n_3 \cdot (n_2 - 1) \cdot (n_3 - 1) + n_2 \cdot n_3 \cdot (n_1 + n_2 + n_1 \cdot n_2) - 0,5 \cdot n_2 \cdot n_3 \cdot (n_1 + 1)(n_2 + 1) + [(n_3 - n_1 + n_1 \cdot n_3) - n_1 - (n_1 + 1)] \cdot n_2 \cdot (n_3 - 1) \quad (25)$$

В рассматриваемом примере (рис. 3) при достройке коннод между точками подсистем  $n_2$  и  $n_3$  будет насчитываться 21 дополнительная точка пересечения, что отвечает расчетному значению ( $n_1 = n_2 = n_3 = n$ )  $S_2 = 21$ .

Выражение для  $S_2$  можно преобразовать:

$$S_2 = 0,25 \cdot n_2 \cdot (4n_1 \cdot n_3^2 + n_2 \cdot n_3^2 + 2n_1 \cdot n_2 \cdot n_3 + 3n_3^2 + n_2 \cdot n_3 - 6n_1 \cdot n_3 - 9n_3 + 4n_1 + 4) \quad (26)$$

При равномерном распределении соединений по подсистемам, как в рассматриваемом случае:  $n_1 = n_2 = n_3 = n$ , выражение для вычисления  $S_2$  упрощается:

$$S_2 = 0,25 \cdot n \cdot (7n^3 - 2n^2 - 5n + 4). \quad (27)$$

Общее количество ( $P$ ) пересечений коннод в трехкомпонентной системе с двойными соединениями во всех подсистемах определяется суммой  $S_1$  и  $S_2$ :

$$P = 0,25 \cdot n_1^2 \cdot n_2^2 + 0,25 \cdot n_1^2 \cdot n_3^2 + 0,25 \cdot n_2^2 \cdot n_3^2 + 0,25 \cdot n_1^2 \cdot n_2 + 0,25 \cdot n_1 \cdot n_2^2 + 0,25 \cdot n_1^2 \cdot n_3 + 0,25 \cdot n_1 \cdot n_3^2 + 0,75 \cdot n_2 \cdot n_3^2 + 0,25 \cdot n_2^2 \cdot n_3 + 1,25 \cdot n_1 \cdot n_2 + 0,25 \cdot n_1 \cdot n_3 - 1,25 \cdot n_2 \cdot n_3 + 0,5 \cdot n_1^2 \cdot n_2 \cdot n_3 + n_1 \cdot n_2 \cdot n_3^2 + 0,5 \cdot n_1 \cdot n_2^2 \cdot n_3 + n_2. \quad (28)$$

Решения (28) всегда целочисленны, а сама формула не чувствительна относительно перемены набора значений  $n_1, n_2$  и  $n_3$ , то есть решение остается неизменным при произвольной нумерации сторон концентрационного треугольника исследуемых систем. Последнее утверждение легко проверить, например, при наличии в подсистемах одного, двух и трех двойных соединений нет разницы в нумерации подсистем: 1.)  $n_1 = 1, n_2 = 2, n_3 = 3$ ; 2.)  $n_1 = 1, n_2 = 3, n_3 = 2$ , и т.п.). При любой нумерации расчетное значение одинаково  $P = 54$ .

Выражение (28) громоздкое, но востребовано для точного определения количества пересечения коннод в системах со значительной неравномерностью распределения двойных соединений по подсистемам. Для равномерного распределения ( $n_1 = n_2 = n_3 = n$ ) выражение (28) упрощается:

$$P = 2,75 \cdot n^4 + 2 \cdot n^3 + 0,25 \cdot n^2 + n = 0,25 \cdot n^2 \cdot (11n^2 + 1) + n \cdot (n^2 + 1). \quad (29)$$

Выражение (29) является степенной функцией 4-й степени и быстро возрастает, в частности: при  $n = 2$ ,  $P = 63$ ; при  $n = 3$ ,  $P = 282$ ; при  $n = 4$ ,  $P = 840$ ; при  $n = 5$ ,  $P = 1980$ ; при  $n = 6$ ,  $P = 4011$ . Соответственно, для полного анализа субсолидусного строения трехкомпонентных систем всего с тремя двойными соединениями в каждой подсистеме потребуется смоделировать 282 твердофазных реакции обмена, а при увеличении значения  $n$  в два раза потребуется смоделировать уже 4011 реакций. Безусловно, что количество моделируемых твердофазных реакций отображает лишь определенную долю трудозатрат исследователя, но все же косвенно позволяет оценивать сложность субсолидусного строения трехкомпонентных физико-химических систем.

**Анализ систем с наличием двойных и тройных соединений, апробация найденных решений.** Из результатов рассмотрения систем только с двойными соединениями во всех подсистемах следует, что наличие в системе еще и тройных соединений вызовет существенное усложнение как вывода расчетной формулы, так и ее громоздкость. Точки составов тройных соединений в трехкомпонентных системах локализируются не на сторонах, а непосредственно в области концентрационного треугольника. Для вывода точной расчетной формулы можно рассматривать точки составов тройных соединений в качестве определенной проекции составов более многомерных, четырехкомпонентных систем. При этом необходимо определять следы проекций и в трех других подсистемах такой системы, а уже по этим проекциям (на гранях концентрационного тетраэдра) анализировать количества образуемых коннод и точек их пересечения. Процедура вывода расчетных формул представлялась достаточно трудоемкой и принят упрощенный вариант. Предлагается изменить топологию расположения точек составов всех соединений и вместо треугольника рассматривать окружность, точнее выпуклый  $m$ -угольник ( $m$  – сумма простых компонентов системы (их 3), двойных и тройных соединений). При таком подходе следует рассматривать пересечение не

коннод, а уже хорд окружности или диагоналей  $m$ -угольника. Количество пересечений в данном случае с очевидностью будет больше, чем при топологии треугольника. Однако некоторое увеличение количества точек пересечения остается в рамках решаемой задачи исследования – количество реальных пересечений не должно превышать вычисленного значения.

У выпуклого  $m$ -угольника есть ряд замечательных свойств, не зависящих от значения  $m$ . В частности, при его разбиении диагоналями, не пересекающимися внутри него, то есть при триангуляции, образуется следующее количество элементарных треугольников:

$$t = m - 2. \quad (30)$$

При этом для триангуляции требуется число диагоналей ( $l$ ):

$$l = m - 3. \quad (31)$$

Такая триангуляция может быть реализована количеством способов ( $Z$ ), определяемых выражением [5]:

$$Z = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2m - 5)}{(m - 1)!} \cdot 2^{m-2}. \quad (32)$$

В случае больших значений  $m$  можно применять формулу Стирлинга с учетом чего приближенное значение  $Z$  определяется выражением:

$$Z = \frac{2^{m(m-1)}}{(m-1) \cdot [\pi(m-2)]^{0.5}}. \quad (33)$$

Количество пересечений хорд/диагоналей определяется сочетанием из  $m$  элементов по четыре (точки концов двух пересекающихся хорд/диагоналей):

$$P = \frac{m!}{4! m - 4!} = \frac{m \cdot (m-1) \cdot (m-2) \cdot (m-3)}{24}. \quad (34)$$

Выражение (34) является степенной функцией четвертой степени, быстро возрастающей при увеличении значения  $m$ , в частности:

– при  $m = 10$  (3 – простых, 6 – двойных и одно тройное соединение)  $P = 210$ ;

– при  $m = 11$  (3 – простых, 6 – двойных и 2 тройных соединения)  $P = 330$ .

Предложенный вариант расчета (34) позволяет оценить и сравнительную кратность усложнения суб-



солидусного строения системы с наличием тройных соединений по отношению к аналогичной, но только с двойными соединениями.

Апробируем полученные формулы для расчетов на примерах конкретных оксидных систем. Пусть требуется сопоставить степень сложности субсолидусного строения систем: I. CaO – MgO – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и II. CaO – MgO – TiO<sub>2</sub>. По данным [3, 4, 9, 10] в этих системах в субсолидусной области стабильны по шесть двойных соединений, тройных оксидов – нет, в подсистеме CaO – MgO двойные соединения не образуются. В первой подсистеме одно из шести двойных соединений находится в подсистеме MgO – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, а пять оставшихся – в подсистеме CaO – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Во второй системе все шесть соединений поровну распределены по подсистемам CaO – TiO<sub>2</sub> и MgO – TiO<sub>2</sub>.

Согласно формуле (8) при исследовании субсолидусного строения этих оксидных систем потребуется составить, уравнивать, посчитать значения изменений энергии Гиббса в зависимости от температуры, проанализировать и проверить следующее количество модельных твердофазных реакций ( $P_I$  и  $P_{II}$ , соответственно):

$$P_I = \frac{1 \cdot 5 \cdot 6 \cdot 2}{4} = 15, \quad P_{II} = \frac{3 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 4}{4} = 48.$$

Из сравнения значений  $P_I$  и  $P_{II}$  очевидно, что степень сложности субсолидусного строения системы CaO – MgO – TiO<sub>2</sub> более чем в 2 раза выше. При этом, максимальная сложность ( $P_{max}$ ) систем с 6 двойными соединениями при равномерном их распределении по всем трем подсистемам, то есть при  $n = 2$  для формулы (29):

$$P_{max} = 0,25 \cdot 4 \cdot 45 + 2 \cdot 5 = 55.$$

Соответственно, сложность субсолидусного строения первой из рассматриваемых подсистем – 27,3 %, а второй – 65,5 % относительно максимально возможной сложности.

Рассмотрим более трудный пример оценки степени сложности двух алюмосиликатных систем с участием оксидов щелочноземельных металлов (MgO и BaO): I. MgO – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – SiO<sub>2</sub> и II. BaO – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – SiO<sub>2</sub>. На первый взгляд системы являются «родственными». Однако согласно [4, 7, 8, 11, 12] в субсолидусной области первой – стабильны 4 двойных и 2 тройных соединения (двойные соединения распределены так: 1 – в подсистеме MgO – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 1 – в подсистеме Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – SiO<sub>2</sub> и 2 – в подсистеме MgO – SiO<sub>2</sub>), а во второй – стабильны 14 двойных и 3 тройных соединения

(двойные соединения распределены так: 1 – в подсистеме Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – SiO<sub>2</sub>, 8 – в подсистеме BaO – SiO<sub>2</sub> и 5 – в подсистеме BaO – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). Сначала применим формулу (28), условно принимая, что тройных соединений в системах нет:  $P_I = 14$ ,  $P_{II} = 1037$ . Как видим, различие в сложности даже в упрощенном случае в 74 раза! При этом максимальные сложности подобных систем можно определить по формуле (29), приняв равномерное распределение двойных соединений по подсистемам (для первой  $n = 4/3 \approx 2$ , округление до целого в сторону большего числа; для второй:  $n = 14/3 \approx 5$ ):

$$P_{maxI} = 63, \quad P_{maxII} = 1980.$$

Поэтому сложность рассматриваемых систем (без учета наличия тройных соединений) составляет 22,2 % и 52,4 % относительно максимально возможной.

Теперь учтем и наличие тройных соединений и будем применять формулу (30), в которой значение  $m_I = 3 + 4 + 2 = 9$ ,  $m_{II} = 3 + 14 + 3 = 20$ :

$$P_I = 126, \quad P_{II} = 4845.$$

Фактическое различие  $P_I$  и  $P_{II}$  показывает, что сложность субсолидусного строения системы BaO – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – SiO<sub>2</sub> в 38 раз выше, чем системы MgO – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – SiO<sub>2</sub>. Безусловно, можно было сделать качественный вывод о большей сложности той или иной из систем путем простого сравнения количества двойных и тройных соединений в этих системах. Однако, в практике исследований субсолидусного строения трехкомпонентных систем встречаются случаи когда невозможно сделать однозначный вывод. В частности, при наличии в одной системе 15 двойных равномерно распределенных по подсистемам соединений и отсутствии тройных соединений, а в другой – 9 равномерно распределенных по подсистемам двойных соединений и одного тройного соединения. В этой ситуации не обойтись без количественной оценки степени сложности субсолидусного строения для адекватного их сопоставления.

**Заключение.** В заключение отметим, что результаты исследований позволяют получать важные количественные характеристики для оценки степени сложности субсолидусного строения трехкомпонентных систем. Вместе с тем, анализ и установление субсолидусного строения многокомпонентных систем является творческим процессом и не сводится только к количеству моделируемых твердофазных реакций обмена. Для выполнения такого ряда исследований требуется высокая квалификация исполнителя, широ-

кий науний кругозор для мінімізації трудоміжких операцій, чому будуть сприяти і результати нашої роботи.

#### Список литературы

1. Физико-химические системы тугоплавких, неметаллических и силикатных материалов / [Бережной А.С., Питак Я.Н., Пономаренко А.Д., Соболев Н.П.] – К.: УМКВМОУ, 1992. – 172 с.
2. Логвинков С.М. Основы технологических систем / С.М. Логвинков, О.М. Борисенко. – Харьков: ХНЕУ ім. С. Сузнеця, 2015. – 308 с.
3. Бережной А.С. Многокомпонентные системы окислов / А.С. Бережной. – К.: Наукова думка, 1970. – 544 с.
4. Логвинков С.М. Твердофазные реакции обмена в технологии керамики: монография / С.М. Логвинков – Харьков: ХНЭУ, 2013. – 248 с.
5. Яглом А.М. Неэлементарные задачи в элементарном изложении / А.М. Яглом, И.М. Яглом // Задачи по комбинаторике и теории вероятностей. Задачи из разных областей математики. – М.: Гос. изд. технико-теоретич. лит., 1954. – 543 с.
6. Осипов Н.Н. Теория чисел / Н.Н. Осипов. – Красноярск: СФУ Институт космических и информационных технологий, 2008. – 117 с.
7. Кальцийбариевые оксидные системы и вяжущие материалы на основе их композиций / [Шабанова Г.Н., Корогодская А.Н., Миргород О.В. и др.] // Монография. – Харьков: ТОВ «Планета – Принт», 2014. – 273 с.
8. Шабанова Г.Н. Барийсодержащие оксидные системы и вяжущие материалы на их основе / Г.Н. Шабанова. – Харьков: НТУ «ХПИ», 2006. – 280 с.
9. Jung I., Decterov S.A., Pelton A.D. Critical thermodynamic evaluation and optimization of the MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> Systems. J. Phys. Equil. and Diff. Vol. 25, Pp. 329-345 (2004).
10. Rouf M.A., Cooper A.H., Bell A.B. A Study of Phase Equilibria in the System CaO-MgO-TiO<sub>2</sub>. Trans. Brit. Ceram. Soc., Vol 68, Pp. 263-267 (1969).
11. Mao H., Hillert M., Selleby M., Sundman B. Thermodynamic assessment of the CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> system. J. Amer. Ceram. Soc. Vol. 89 (1), Pp. 298-308 (2006).
12. Ropp R.C. Encyclopedia of the Alkaline Earth Compounds // Richard C. Ropp. – Amsterdam: Elsevier, 2013. – 1187 p.
- nonmetallic and silicate materials]. Kiyev: UMK VO Publ., 1992, 172 p.
2. Logvinkov S. M., Borysenko O. M. Osnovy tehnologichnyh system [Basics of technological systems]. Harkiv: HNEU named after S. Kuznets Publ., 2015, 308 p.
3. Berezhnoy A. S. Mnogokomponentnye sistemy okislov [The multi-component oxide systems]. Kiev, Naukova Dumka Publ., 1970, 544 p.
4. Logvinkov S. M. Tverdogfaznye reakcii obmena v tehnologii keramiki [Solid-phase exchange reaction in ceramic technology]. Kharkov, HNJeU named after S. Kuznets Publ., 2013, 248 p.
5. Jaglom A. M., Jaglom I. M. Nejelementarnye zadachi v jelementarnom izlozhenii. Zadachi po kombinatorike i teorii verojatnostej. Zadachi iz raznyh oblastej matematiki [Non-elementary problems in an elementary presentation. Problems in combinatorics and probability theory. Problems from different areas of mathematics]. Moskva, Gostehizdat Publ., 1954, 543 p.
6. Osipov N. N. Teorija chisel [Number theory]. Krasnojarsk: SFU IKIT Publ., 2008, 117 p.
7. Shabanova G. N., Korohodska A. N., Mirgorod O. V., Dejneka V. V., Tsapko N. S. Kal'cijbarievye oksidnye sistemy i vjazhushhie materialy na osnove ih kompozicij [Calcium-barium oxide systems and binders based on their compositions]. Har'kov, Planeta-Print Publ., 2014, 273 p.
8. Shabanova G. N. Barijsoderzhashhie oksidnye sistemy i vjazhushhie materialy na ih osnove [Barium-containing oxide systems and binders based on them] Har'kov, NTU «HPI» Publ., 2006, 280 p.
9. Jung I., Decterov S. A., Pelton A. D. Critical thermodynamic evaluation and optimization of the MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO-MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and MgO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> Systems. J. Phys. Equil. and Diff. Vol. 25, Pp. 329-345 (2004).
10. Rouf M. A., Cooper A. H., Bell A. B. A Study of Phase Equilibria in the System CaO-MgO-TiO<sub>2</sub>. Trans. Brit. Ceram. Soc., Vol 68, Pp. 263-267 (1969).
11. Mao H., Hillert M., Selleby M., Sundman B. Thermodynamic assessment of the CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> system. J. Amer. Ceram. Soc., Vol. 89 (1), Pp. 298-308 (2006).
12. Ropp R. C. Encyclopedia of the Alkaline Earth Compounds. Amsterdam, Elsevier Publ., 2013, 1187 p.

Надійшла (received) 28.08.2020

#### References (transliterated)

1. Berezhnoy A. S., Pitak Ya. N., Ponomarenko A. D., Sobol' N. P. Fiziko-khimicheskiye sistemy tugoplavkikh, nemetallicheskiikh i silikatnykh materialov [Physical and chemical systems of refractory,

#### Відомості про авторів / Сведения об авторах / About the Authors

**Логвинков Сергій Михайлович (Логвинков Сергей Михайлович, Logvinkov Sergey Mikhailovich)** – доктор технічних наук, старший науковий співробітник, Харківський національний економічний університет імені Семена Кузнеця, професор кафедри природоохоронних технологій, екології та безпеки життєдіяльності, м. Харків, Україна; тел.: +38(057)758-77-08, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5957-2386>, e-mail: Serhii.Logvinkov@m.hneu.edu.ua.

**Борисенко Оксана Миколаївна (Борисенко Оксана Николаевна, Borisenko Oksana Nikolaevna)** – кандидат технічних наук, доцент, Харківський національний економічний університет імені Семена Кузнеця, стар-

ший викладач кафедри природоохоронних технологій, екології та безпеки життєдіяльності, м. Харків, Україна; тел.: +38(057)758-77-08, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2746-6797>, e-mail: [Oksana.Borysenko@m.hneu.edu.ua](mailto:Oksana.Borysenko@m.hneu.edu.ua).

**Цанко Наталія Сергіївна** ( *Цанко Наталия Сергеевна, Tsapko Nataliia Sergeevna* ) – кандидат технічних наук, доцент, начальник відділу міжнародного співробітництва та науково-технічної інформації Науково-дослідної установи «Український науково-дослідний інститут екологічних проблем», м. Харків, Україна; тел.: +38(057)702-15-92; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-2480-3636>, e-mail: [tsapkonatali@gmail.com](mailto:tsapkonatali@gmail.com).

**Шабанова Галина Миколаївна** ( *Шабанова Галина Николаевна, Shabanova Galina Nikolaevna* ) – доктор технічних наук, професор, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», професор кафедри технології кераміки, вогнетривів, скла та емалей; м. Харків, Україна; ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7204-940X>; e-mail: [gala-shabanova@ukr.net](mailto:gala-shabanova@ukr.net) .

**Корогодська Алла Миколаївна** ( *Корогодская Алла Николаевна, Korohodska Alla Nikolaevna* ) – доктор технічних наук, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», доцент кафедри загальної та неорганічної хімії; м. Харків, Україна; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1534-2180>; e-mail: [alla-korogodskaya@ukr.net](mailto:alla-korogodskaya@ukr.net)

**Шумейко Віта Миколаївна** ( *Шумейко Вита Николаевна, Shumejko Vita Nikolaevna* ) – кандидат технічних наук, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», науковий співробітник кафедри технології кераміки, вогнетривів, скла та емалей; м. Харків, Україна; ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0567-0946>; e-mail: [shum-vita@ukr.net](mailto:shum-vita@ukr.net).

**Гапонова Олена Олександрівна** ( *Гапонова Елена Александровна, GaponovaOlena* ) – кандидат технічних наук, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», співробітник кафедри інтегровані технології, процеси та апарати; м. Харків, Україна; e-mail: [czn.ntu.hpi@ukr.net](mailto:czn.ntu.hpi@ukr.net).