

УДК 544.3

doi:10.20998/2413-4295.2025.04.05

ТОПОЛОГІЧНА НЕВИЗНАЧЕНІСТЬ ТЕТРАЕДРАЦІЇ ЧОТИРИКОМПОНЕНТНИХ
ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ СИСТЕМС. М. ЛОГВІНКОВ¹, О. М. БОРИСЕНКО^{2*}, Г. М. ШАБАНОВА², А. М. КОРОГОДСЬКА³,
В. М. ШУМЕЙКО², Н. С. ЦАПКО⁴¹ кафедра охорони праці та безпеки життєдіяльності, Харківський національний університет міського господарства імені О.М. Бекетова, м. Харків, УКРАЇНА² кафедра технологій кераміки, вогнетривів, скла та емалей, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків, УКРАЇНА³ кафедра загальної та неорганічної хімії, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», м. Харків, УКРАЇНА⁴ Науково-дослідна установа «Український науково-дослідний інститут екологічних проблем», м. Харків, УКРАЇНА

* e-mail: onborisenko@ukr.net

АНОТАЦІЯ Проведено аналіз тетраедрації фізико-хімічної системи $\text{BaO} - \text{MgO} - \text{TiO}_2 - \text{ZrO}_2$ з метою дослідження особливостей фазового складу чотирикомпонентних систем. Встановлено, що в концентраційній області, обмеженій точками складів сполук BT_4 , ZT , MT_2 , MT , B_2Z та BT , існує топологічна невизначеність, яка унеможливорює повну тетраедрацію. Це означає, що неможливо розбити цю область на елементарні тетраедри, вершини яких відповідають точкам складів сполук у термодинамічно рівноважних чотирьохфазних комбінаціях. Дослідження показує, що нететраедровані ділянки не суперечать фізико-хімічним та топологічним закономірностям і залишаються опуклими для забезпечення можливості співіснування певних сполук. Аналіз підсистем та їхньої триангуляції дозволив виявити, що навіть при коректній триангуляції трьохкомпонентних підсистем можливі внутрішні конноди, що визначають утворення елементарних тетраедрів, проте повне покриття концентраційної області досягається не завжди. Виявлена топологічна невизначеність має як прикладне, так і фундаментальне значення. З прикладної точки зору вона обмежує прогнозування чотирьохфазних комбінацій у синтезованих матеріалах, якщо вихідний склад належить до нететраедрованої області, оскільки можливе одночасне співіснування шести фаз. Фундаментально це свідчить про існування чотирикомпонентних діаграм стану, які не підлягають повній тетраедрації, що обумовлено лише топологічними особливостями розташування сполук у підсистемах та їх взаємозв'язками. Результати дослідження підкреслюють необхідність системного теоретичного аналізу та експериментальної перевірки фазових рівноваг у чотирикомпонентних системах для створення матеріалів із прогнозованими властивостями.

Ключові слова: чотирикомпонентні системи; тетраедрація; триангуляція; фазові рівноваги; концентраційна область; прогнозування фазового складу; електрокераміка.

TOPOLOGICAL UNCERTAINTY OF THE TETRAHEDRATION
OF FOUR-COMPONENT PHYSICO-CHEMICAL SYSTEMSS. LOGVINKOV¹, O. BORYSENKO², H. SHABANOVA², A. KOROHODSKA³, V. SHUMEJKO²,
N. TSAPKO⁴¹ Department of Occupational Health and Safety, O.M. Beketov National University of Urban Economy in Kharkiv, Kharkiv, UKRAINE² Department of Ceramics, Refractory Materials, Glass and Enamels Technology, National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", Kharkiv, UKRAINE³ Department of General and Inorganic Chemistry, National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", Kharkiv, UKRAINE⁴ Scientific Research Institution "Ukrainian Scientific Research Institute of Ecological Problems", Kharkiv, UKRAINE

ABSTRACT An analysis of the tetrahedration of the physico-chemical system $\text{BaO} - \text{MgO} - \text{TiO}_2 - \text{ZrO}_2$ was carried out to study the features of the phase composition of four-component systems. It was established that in the concentration region bounded by the composition points of the compounds BT_4 , ZT , MT_2 , MT , B_2Z , and BT , there is a topological uncertainty that prevents complete tetrahedration. This means that it is impossible to divide this region into elementary tetrahedra whose vertices correspond to the composition points of compounds in thermodynamically equilibrium four-phase combinations. The study shows that the non-tetrahedrated areas do not contradict physico-chemical and topological regularities and remain convex to ensure the possibility of coexistence of certain compounds. Analysis of subsystems and their triangulations revealed that even with correct triangulation of three-component subsystems, internal connodes may appear, determining the formation of elementary tetrahedra; however, complete coverage of the concentration region is not always achieved. The identified topological uncertainty has both applied and fundamental significance. From an applied perspective, it limits the prediction of four-phase combinations in synthesized materials if the initial composition belongs to a non-tetrahedrated region, as the simultaneous coexistence of six phases is possible. Fundamentally, this indicates the existence of four-component phase diagrams that cannot be fully tetrahedrated, which is

determined solely by the topological features of the placement of compounds in subsystems and their interrelations. The study's results emphasize the need for a systematic theoretical analysis and experimental verification of phase equilibria in four-component systems to create materials with predictable properties.

Keywords: four-component systems; tetrahedration; triangulation; phase equilibria; concentration region; prediction of phase composition; electroceramics.

Вступ

Отримання нових матеріалів із прогнозованими властивостями можливе лише на основі комплексу знань про фізико-хімічні процеси досягнення термодинамічної рівноваги комбінаціями фаз, здатних утворюватися з компонентів таких матеріалів [1–5]. Засновник фізико-хімічного аналізу М. С. Курнаков запропонував відображати різні фізико-хімічні процеси певними геометричними елементами на діаграмах стану, які слугують базою сучасного матеріалознавства. Розвиток учення про діаграми стану одно-, дво-, три-, чотири- і більше багатокомпонентних фізико-хімічних систем вимагав об'єднаних зусиль учених по всьому світу в застосуванні методів: аналітичної геометрії для розрахунку складів фаз; рівноважної термодинаміки для встановлення комбінацій співіснуючих фаз; топології, комбінаторики та матричної алгебри для аналізу взаємодій; експериментальної фізики та хімії, зокрема високих/низьких температур і тисків [6–10].

Сучасні тенденції до збільшення числа компонентів спеціальних металевих сплавів, сольових композицій, гетерофазних керамічних матеріалів та інших – потребують знання реальних діаграм стану не лише одно-, дво- і трикомпонентних фізико-хімічних систем, але й чотирьох- і більше багатокомпонентних систем. Збільшення кількості компонентів знижує наочність діаграм стану, призводить до ускладнення їхньої будови та підсилює прояв особливостей організації фазового складу [11]. У зв'язку з цим особливої актуальності набувають дослідження чотирьох- і більше багатокомпонентних діаграм стану, у яких виявляються не лише конкретні експериментальні дані, але й фундаментальні теоретичні основи їхньої будови та методи застосування в технологічній практиці.

Мета роботи

Мета роботи – проаналізувати можливість тетраедрації системи $\text{BaO} - \text{MgO} - \text{TiO}_2 - \text{ZrO}_2$ за конкретного варіанта триангуляції трикомпонентних підсистем і узагальнити результати для загального застосування до чотирьохкомпонентних фізико-хімічних систем.

Виклад основного матеріалу

Однокомпонентні діаграми є найпростішими, вони відображають зміну зовнішніх параметрів залежно від агрегатного стану індивідуальних речовин (частіше – температури й тиску). Відповідно,

однокомпонентні діаграми відображають лише фізичні процеси, що не супроводжуються зміною складу речовини. Ускладнення будови таких діаграм стану спричиняють фазові переходи у твердих речовинах.

Двокомпонентні діаграми вже враховують взаємозв'язок змін параметрів стану та складу, можливості утворення сполук й їхню стабільність відповідно до хімічних реакцій найпростішого типу – синтезу та розкладу. Для двокомпонентних діаграм будова ускладняється можливостями твердофазної розчинності речовин, характером і типом утворюваних твердих розчинів та видом плавлення хімічних сполук. Значна кількість одно- та двокомпонентних діаграм досить детально досліджена, методологія їх застосування для розв'язання практичних задач відпрацьована, і основні дослідження наразі зосереджені на уточненні окремих елементів їхньої будови.

До кінця 60-х років минулого століття були відпрацьовані різні варіанти графічної побудови трикомпонентних діаграм, визначені методики застосування фазових правил Гіббса, правил відрізків і центра ваги трикутника для аналізу процесів кристалізації, сформовані правила групування фаз, умови побудови ізотермічних і неізотермічних перетинів тощо [11]. Багаторазово перевірені формули, запропоновані на основі топологічних принципів ще М. С. Курнаковим, для встановлення правильності триангуляції за підрахунком внутрішніх коннод (K) і елементарних трикутників (T):

$$K = M + 3S, \quad (1)$$

$$T = 1 + M + 2S, \quad (2)$$

де M і S – кількість подвійних і потрійних сполук у фізико-хімічній системі, відповідно.

На той час вважалося, що з трикомпонентними системами все зрозуміло: усі основні закономірності та методи застосування вже відомі (наприклад, [12]), тобто дослідникам слід зосередити увагу лише на раніше не вивчених системах, накопичувати й уточнювати базу даних. Однак зазначалася й особливість, пов'язана з можливістю перебігу в трикомпонентних системах твердофазних обмінних реакцій – матеріалознавцям не рекомендували працювати над створенням нових матеріалів у концентраційних областях, де такі реакції спостерігалися. Причину цих рекомендацій пояснювали складністю та недостатньою вивченістю механізмів твердофазних обмінних реакцій, що не давало можливості достовірно прогнозувати фазовий склад синтезованих матеріалів. Лише пізніші

дослідження встановили, що твердофазні реакції обміну можуть мати зворотний характер і здатні поєднуватися через спільні стадії в новий механізм взаємодії, у тому числі з формуванням періодичних, самоорганізованих структурно-фазових процесів [13]. Такі особливості не лише ускладнили наочність і методики застосування подібних трикомпонентних діаграм, а й надали матеріалознавцям нові можливості створення унікальних матеріалів, здатних найбільш раціонально адаптувати мікроструктуру та фазовий склад до зовнішніх термомеханічних навантажень без порушення суцільності.

Ситуація з чотирикомпонентними діаграмами певною мірою була подібна до описаної вище для трикомпонентних систем. Основні закономірності фазових рівноваг були встановлені, визначені з топологічних принципів залежності між окремими елементами тетраедрованої чотирикомпонентної системи та запропоновані перевірені формули (наприклад, Н. С. Домбровська):

$$P = M + 3S + 6Q, \quad (3)$$

$$N = 1 + M + 2S + 3Q, \quad (4)$$

де P – кількість внутрішніх граней елементарних тетраедрів; M , S , Q – кількість подвійних, потрійних та чотирихкратних сполук; N – кількість елементарних тетраедрів.

Однак сформульовані за аналогією з трикомпонентними діаграмами правила (групування фаз, примикання, суміжні простори або області станів тощо) мали винятки і вимагали застосування спеціальних способів усунення вироджених фазових областей [11,13]. За рівняннями (3) і (4) велись дискусії щодо їхньої застосовності у зв'язку з виявленням варіантів тетраедрації, для яких результати суперечили розрахунковим величинам P та N . Причину вибіркової працездатності формул (3) і (4) А. С. Бережний [10] встановив у топологічній невизначеності тетраедрації концентраційної області чотирикомпонентної діаграми, яка обмежена точками складів п'яти сполук (А, В, С, D, E), через заздалегідь невідомий напрямок протікання твердофазної обмінної реакції:

$$A + B = C + D + E. \quad (5)$$

У разі протікання реакції (5) у прямому напрямку (зліва направо) термодинамічно стабільною є комбінація сполук у продуктах взаємодії, а концентраційна область представлена двома елементарними тетраедрами: $A - C - D - E$ та $B - C - D - E$ (рис. 1).

У разі зворотного напрямку протікання реакції (5) термодинамічно стабільною є комбінація вихідних сполук А і В, які можуть співіснувати лише з парами сполук у продуктах взаємодії (С і D, D і E, С і E) та утворювати три елементарні тетраедри $A - B - C - D$, $A - B - D - E$, $A - B - C - E$. У цьому випадку на діаграмі існує «порожній»

контур (С – D – E), який «проколоти» коннодою (AB) у точці O (рис. 1).

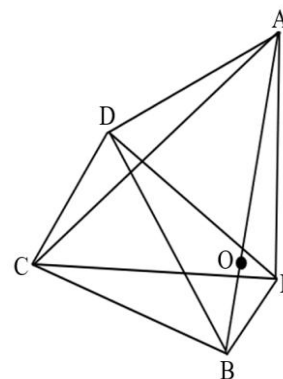


Рис. 1 – Топологічна невизначеність тетраедрації: два чи три тетраедри?

Фактично, парні комбінації сполук у продуктах взаємодії співіснують між собою, а одночасно, у складі трьохфазної комбінації (С – D – E) починають взаємодіяти з утворенням більш термодинамічно вигідної комбінації вихідних сполук (А – В). Детальніше і пізніше встановлено причину такої топологічної невизначеності – поєднання двох твердофазних реакцій типу «2 = 2» (дві вихідні та дві сполуки в продуктах взаємодії) у новий механізм взаємодії, що описується реакцією типу «2 = 3» (дві вихідні та три сполуки в продуктах взаємодії) [11]. Відповідно, розробляються і методологічні прийоми прогнозування фазового складу матеріалів у концентраційних областях чотирикомпонентних діаграм стану, де термодинамічно ймовірне поєднання твердофазних обмінних реакцій [13].

Однак, із поглибленням досліджень з'ясовано, що не всі проблеми вже вирішені. Нова проблема виникла при аналізі одного з можливих варіантів тетраедрації конкретної фізико-хімічної системи $BaO - MgO - TiO_2 - ZrO_2$, яку пропонується обговорити.

Обговорення результатів

Проведення тетраедрації системи $BaO - MgO - TiO_2 - ZrO_2$ було необхідним для розробки перспективних видів електрокераміки різного функціонального призначення. До початку виконання процедури тетраедрації були зібрані необхідні відомості про наявність сполук у дво- та трикомпонентних підсистемах, а також виконана триангуляція потрійних підсистем. Одним із можливих варіантів триангуляції (рис. 2) дозволялося проаналізувати тетраедрацію системи $B - M - T - Z$ (тут і далі прийняті скорочення: $B - BaO$; $M - MgO$; $T - TiO_2$; $Z - ZrO_2$, а для подальшої наочності в варіанті триангуляції враховані лише окремі сполуки).

Як впливає з рис. 2, жодних відхилень у правильності триангуляції підсистем не

спостерігається, і топологічно більш складно триангульована лише підсистема $B - T - Z$, де є «вставний» елементарний трикутник із вершинами, що відповідають точкам складів подвійних сполук (B_2Z , ZT , BT) у всіх його підсистемах, і жодна зі сторін якого не належить сторонам концентраційного трикутника $B - T - Z$.

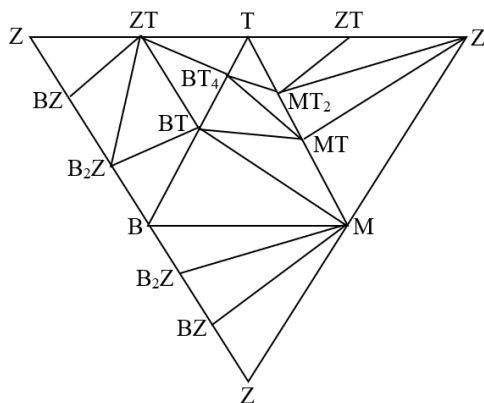


Рис. 2 – Схема триангуляції потрібних підсистем системи $B - M - T - Z$

Об'єднуючи спільні вершини триангуляції підсистем на рис. 2, отримаємо концентраційний тетраедр чотирикомпонентної системи $B - M - T - Z$ (рис. 3).

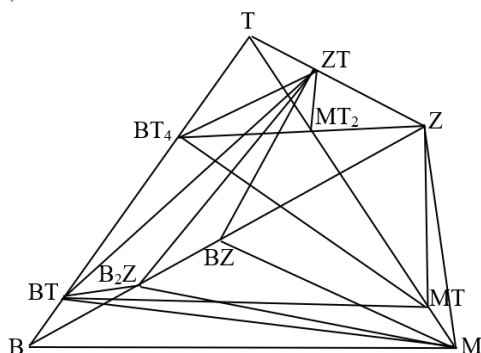


Рис. 3 – Схема концентраційного тетраедра системи $B - M - T - Z$

У сформованому концентраційному тетраедрі системи автоматично замкнулися елементарні тетраедри (рис. 3):

1. $T - BT_4 - MT_2 - ZT$,
2. $B - M - BT - B_2Z$.

Неважко помітити, що подальший розподіл системи $B - M - T - Z$ на окремі елементарні тетраедри можливий лише за рахунок участі у їх побудові «внутрішніх» коннод, які об'єднують у співіснуючі парні комбінації титанати магнію (MT , MT_2) та цирконати барію (BZ , B_2Z) і проходять через концентраційний простір системи. Будемо послідовно будувати на рис. 3 ці «внутрішні» конноди та

позначати утворювані елементарні тетраедри. Коннода $MT - BZ$:

3. $MT - BZ - M - Z$.

Коннода $MT - B_2Z$:

4. $MT - B_2Z - M - BZ$,
5. $MT - B_2Z - M - BT$.

Коннода $MT_2 - BZ$:

6. $MT_2 - BZ - Z - ZT$,
7. $MT_2 - BZ - Z - MT$.

Коннода $MT_2 - B_2Z$:

8. $MT_2 - B_2Z - MT - BZ$,
9. $MT_2 - B_2Z - BZ - ZT$.

Виконані побудови призводять до вигляду тетраедрації діаграми, яка представлена на рис. 4.

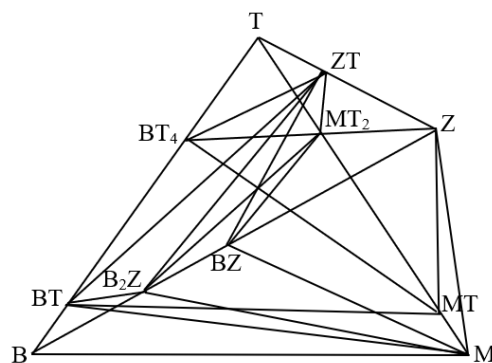


Рис. 4 – Схема тетраедрації системи $B - M - T - Z$

Усі можливості подальшої тетраедрації вичерпані, а на діаграмі присутні сингулярні площини ($BT - BT_4 - MT$, $BT_4 - MT - MT_2$, $BT - B_2Z - MT$, $B_2Z - MT - MT_2$, $B_2Z - MT_2 - ZT$, $MT_2 - ZT - BT_4$, $ZT - BT_4 - BT$, $ZT - BT - B_2Z$), які не є гранями елементарних тетраедрів. Фактично, концентраційна область системи в межах точок складів сполук BT_4 , ZT , MT_2 , MT , B_2Z і BT залишається не тетраедрованою. Для трикомпонентних систем не ставилося під сумнів твердження про можливість їх триангуляції за будь-якої кількості подвійних і потрібних сполук, тобто будь-яка трикомпонентна система може бути триангульована. Питання про повну тетраедрацію чотирикомпонентних систем до теперішнього часу не піднімалося і в топологічному сенсі не досліджувалося.

Виявивши чотирикомпонентну систему, для якої остаточна тетраедрація не виконана, доведено методом від супротивного існування чотирикомпонентних діаграм, які не можна тетраедрувати. При цьому зауважимо, що цей висновок стосується будь-яких типів чотирикомпонентних фізико-хімічних систем (метали, солі тощо), оскільки у вище представленому аналізі не розглядалися властивості компонентів B , M , T , Z та їхніх сполук, а враховувалися лише топологічні особливості їхнього розташування та взаємозв'язків у подвійних і потрібних підсистемах.

Безумовно, зіткнення з нететраедровою чотириконтентною діаграмою вимагає додаткового аналізу та перевірки правильності триангуляції підсистем, особливо для складних варіантів. Зокрема, якщо «вставний» трикутник у підсистемі В – Т – Z буде відсутній (за умови перебудови конноди ВТ – ZT на конноду ВТ₄ – В₂Z), то вся вищезгадана нететраедрована концентраційна область автоматично розбивається на елементарні тетраедри. Однак це не єдиний варіант рішення, оскільки при перебудові конноди ВТ₄ – МТ на конноду ВТ – МТ₂ також буде досягнута повна тетраедрація системи (рис. 4). Потрібний системний теоретичний аналіз і подальша експериментальна перевірка фазових рівноваг із додатковою увагою до зазначених коннод.

Зауважимо, що з загальних фізико-хімічних позицій узагальненого правила про «дотичні простори (або області) станів» у нететраедрованій концентраційній області будь-яка фігуральна точка відповідає умові співіснування з шістьма раніше зазначеними сполуками (ВТ₄, ZT, МТ₂, МТ, В₂Z і ВТ), а максимально допустима кількість суміжних фазових об'ємів дорівнює восьми. Тобто принципів протиріч із фізико-хімічними та топологічними закономірностями нететраедрована концентраційна область не становить. Очевидно, що при цьому концентраційна область повинна бути опуклою для запобігання топологічним перешкодам у співіснуванні певних сполук системи, що обмежують нететраедровану область.

Висновки

Аналіз тетраедрації фізико-хімічної системи BaO – MgO – TiO₂ – ZrO₂ вказав на наявність топологічної невизначеності в концентраційній області, обмеженій точками складів сполук BaTi₄O₉, ZrTiO₄, MgTi₂O₅, MgTiO₃, Ba₂ZrO₄ і BaTiO₃. Цю область неможливо розбити на елементарні тетраедри, вершини яких відповідають точкам складів сполук у термодинамічно рівноважних чотирьохфазних комбінаціях. Нететраедрованість цієї чотириконтентної системи має прикладне й фундаментальне значення. В прикладному аспекті: неможливо прогнозувати чотирьохфазні комбінації в синтезованому матеріалі, якщо вихідний склад належить до нететраедрованої концентраційної області системи, оскільки в ній рівноймовірна наявність шести раніше зазначених сполук. В фундаментальному аспекті: виявлена неможливість тетраедрації проаналізованої системи не є частковим випадком, оскільки враховувалися лише топологічні особливості, пов'язані з наявністю сполук у підсистемах та їх взаємозв'язками у складі елементарних трикутників. Відповідно, існують чотириконтентні діаграми стану, які не можна

тетраедрувати повністю. Згідно з узагальненим правилом суміжних фазових просторів – будь-яка фігуральна точка в нететраедрованій області може бути точкою дотику, де одночасно можуть присутні вісім фаз для чотириконтентної системи.

Подяка: дослідження здійснювались за рахунок грантової підтримки Національного фонду досліджень України в рамках проєкту 2025.06/0063 «Технологія виготовлення термостабільної керамічної основи смугових фільтрів для систем сучасної радіокерованої техніки».

Список літератури

1. Odetola P. I., Babalola B. J., Afolabi A. E., Anamu U. S., Olorundaisi E., Umba M. C., Phahlane T., Ayodele O. O., Olubambi P. A. Exploring high entropy alloys: A review on thermodynamic design and computational modeling strategies for advanced materials applications. *Heliyon*. 2024. Vol. 10, No. 22. P. e39660. doi: 10.1016/j.heliyon.2024.e39660.
2. Chang I., Cai Q. From simple binary to complex multicomponent eutectic alloys. *Progress in Materials Science*. 2022. Vol. 123. P. 100779. doi: 10.1016/j.pmatsci.2021.100779.
3. Gao Y., Han J., Ge F., Zhang X., Cai Y., Cui Y. Design of eutectic high-entropy alloys in the Co-Cr-Ni-V-Ti-Al system using Scheil solidification path optimization. *Journal of Alloys and Compounds*. 2024. Vol. 1002. P. 175327. doi: 10.1016/j.jallcom.2024.175327.
4. Thomas S. L., Patala S. Vacancy diffusion in multi-principal element alloys: the role of chemical disorder in the ordered lattice. *Acta Materialia*. 2020. Vol. 196. P. 144–153. doi: 10.1016/j.actamat.2020.06.022.
5. King D. J. M., Middleburgh S. C., McGregor A. G., Cortie M. B. Predicting the formation and stability of single phase high-entropy alloys. *Acta Materialia*. 2016. Vol. 104. P. 172–179. doi: 10.1016/j.actamat.2015.11.040.
6. Decterov S. A. Thermodynamic database for multicomponent oxide systems. *Chimica Techno Acta*. 2018. Vol. 5, No. 1. P. 16–48. doi: 10.15826/chimtech.2018.5.1.02.
7. Zaman T., Jiang Y., Mofarah S. S., Bhattacharyya S. K., Koshy P., Daniels J. E., Sorrell C. C. Phase equilibria in the system BaO–TiO₂. *Journal of the American Ceramic Society*. 2025. Vol. 108, No. 1. P. e20143. doi: 10.1111/jace.20143.
8. Zaman T., Koshy P., Daniels J. E., Sorrell C. C. Review of phase equilibria of the system BaO–TiO₂. *Journal of the American Ceramic Society*. 2025. Vol. 108, No. 6. P. e20408. doi: 10.1111/jace.20408.
9. Fabrichnaya O., Saxena S. K., Richet P., Westrum E. F. *Thermodynamic data, models, and phase diagrams in multicomponent oxide systems : an assessment for materials and planetary scientists based on calorimetric, volumetric and phase equilibrium data*. 2004. doi: 10.1007/978-3-662-10504-7.
10. Saenko I., Tsukrenko V., Ilatovskaia M., Pavlyuchkov D., Savinykh G., Fabrichnaya O. Experimental investigation of phase equilibria in the ZrO₂–TiO₂–MgO system. *Advanced Engineering Materials*. 2018. Vol. 21, No. 5. P. 1800655. doi: 10.1002/adem.201800655.
11. Логвінков С. М., Борисенко О. Н., Цапко Н. С., Шабанова Г. Н., Корогодская А. Н., Шумейко В. Н.,

Гапонова Е. А. Расчетная оценка степени сложности субсолидусного строения трехкомпонентных физико-химических систем. *Вісник Національного технічного університету «ХПІ»*. Серія: Хімія, хімічна технологія та екологія. 2020. № 2 (4). С. 57–67. doi: 10.20998/2079-0821.2020.02.08.

12. Бережной А. С. *Многокомпонентные системы окислов*. Киев: Наукова думка, 1970. 544 с.
13. Logvinkov S. M., Tsapko N. S., Shabanova H. M., Borysenko O. M., Ivashchenko M. Yu. Analysis of thermodynamic conjugation of solid-phase exchange reactions in three- and four-component systems. *Issues of Chemistry & Chemical Technology*. 2025. No. 5. P. 63–68. doi: 10.32434/0321-4095-2025-162-5-63-68.

References (transliterated)

1. Odetola P. I., Babalola B. J., Afolabi A. E., Anamu U. S., Olorundaisi E., Umba M. C., Phahlane T., Ayodele O. O., Olubambi P. A. Exploring high entropy alloys: A review on thermodynamic design and computational modeling strategies for advanced materials applications. *Heliyon*, 2024, Vol. 10, no. 22, pp. e39660, doi: 10.1016/j.heliyon.2024.e39660.
2. Chang I., Cai Q. From simple binary to complex multicomponent eutectic alloys. *Progress in Materials Science*, 2022, Vol. 123, pp. 100779, doi: 10.1016/j.pmatsci.2021.100779.
3. Gao Y., Han J., Ge F., Zhang X., Cai Y., Cui Y. Design of eutectic high-entropy alloys in the Co-Cr-Ni-V-Ti-Al system using Scheil solidification path optimization. *Journal of Alloys and Compounds*, 2024, Vol. 1002, pp. 175327, doi: 10.1016/j.jallcom.2024.175327.
4. Thomas S. L., Patala S. Vacancy diffusion in multi-principal element alloys: the role of chemical disorder in the ordered lattice. *Acta Materialia*, 2020, Vol. 196, pp. 144–153, doi: 10.1016/j.actamat.2020.06.022.
5. King D. J. M., Middleburgh S. C., McGregor A. G., Cortie M. B. Predicting the formation and stability of single phase high-entropy alloys. *Acta Materialia*, 2016, Vol. 104, pp. 172–179, doi: 10.1016/j.actamat.2015.11.040.
6. Decterov S. A. Thermodynamic database for multicomponent oxide systems. *Chimica Techno Acta*, 2018, Vol. 5, no. 1, pp. 16–48, doi: 10.15826/chimtech.2018.5.1.02.
7. Zaman T., Jiang Y., Mofarah S. S., Bhattacharyya S. K., Koshy P., Daniels J. E., Sorrell C. C. Phase equilibria in the system BaO–TiO₂. *Journal of the American Ceramic Society*, 2025, Vol. 108, no. 1, pp. e20143, doi: 10.1111/jace.20143.
8. Zaman T., Koshy P., Daniels J. E., Sorrell C. C. Review of phase equilibria of the system BaO–TiO₂. *Journal of the American Ceramic Society*, 2025, Vol. 108, no. 6, pp. e20408, doi: 10.1111/jace.20408.
9. Fabrichnaya O., Saxena S. K., Richet P., Westrum E. F. *Thermodynamic data, models, and phase diagrams in multicomponent oxide systems : an assessment for materials and planetary scientists based on calorimetric, volumetric and phase equilibrium data*, 2004, doi: 10.1007/978-3-662-10504-7.
10. Saenko I., Tsukrenko V., Ilatovskaia M., Pavlyuchkov D., Savinykh G., Fabrichnaya O. Experimental investigation of phase equilibria in the ZrO₂–TiO₂–MgO system. *Advanced Engineering Materials*, 2018, Vol. 21, no. 5, pp. 1800655, doi: 10.1002/adem.201800655.
11. Logvinkov S. M., Borysenko O. N., Tsapko N. S., Shabanova G. N., Korohodska A. N., Shumejko V. N., Gaponova O. O. Raschetnaia otsenka stepeny slozhnosti subsolidusnoho stroeniya trekhkomponentnykh fizyko-khymicheskikh system [Calculated evaluation of the degree of subsolidus structure complexity of the physico-chemical three-component systems]. *Visnyk Natsional'noho tekhnichnoho universytetu «KHPI». Seriya: Khimiya, khimichna tekhnolohiya ta ekolohiya [Bulletin of the National Technical University «KhPI». Series: Chemistry, Chemical Technology and Ecology]*, 2021, no. 2 (4), pp. 57–67, doi: 10.20998/2079-0821.2020.02.08.
12. Berezhnoy A. S. *Mnogokomponentnyye sistemy okislov [Multicomponent oxide systems]*. Kyiv. Naukova dumka, 1970, 544 p.
13. Logvinkov S. M., Tsapko N. S., Shabanova H. M., Borysenko O. M., Ivashchenko M. Yu. Analysis of thermodynamic conjugation of solid-phase exchange reactions in three- and four-component systems. *Issues of Chemistry & Chemical Technology*, 2025, no. 5, pp. 63–68, doi: 10.32434/0321-4095-2025-162-5-63-68.

Відомості про авторів (About authors)

Логвінков Сергій Михайлович – доктор технічних наук, професор, Харківський національний університет міського господарства імені О.М. Бекетова, професор кафедри охорони праці та безпеки життєдіяльності; м. Харків, Україна; ORCID: 0000-0001-5957-2386; e-mail: Serhii.Lohvinkov@kname.edu.ua.

Sergey Logvinkov – Doctor of Technical Sciences, Professor, Professor, Department of Occupational Health and Safety, O.M. Beketov National University of Urban Economy in Kharkiv, Kharkiv, Ukraine; ORCID: 0000-0001-5957-2386; e-mail: Serhii.Lohvinkov@kname.edu.ua.

Борисенко Оксана Миколаївна – доктор технічних наук, професор, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», професор кафедри технології кераміки, вогнетривів, скла та емалей; м. Харків, Україна; ORCID: 0000-0002-2746-6797; e-mail: onborisenko@ukr.net.

Oksana Borysenko – Doctor of Technical Sciences, Professor, Professor, Department of Ceramics, Refractory Materials, Glass and Enamels Technology, National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", Kharkiv, Ukraine; ORCID: 0000-0002-2746-6797; e-mail: onborisenko@ukr.net.

Шабанова Галина Миколаївна – доктор технічних наук, професор, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», професор кафедри технології кераміки, вогнетривів, скла та емалей; м. Харків, Україна; ORCID: 0000-0001-7204-940X; e-mail: gala-shabanova@ukr.net.

Halyna Shabanova – Doctor of Technical Sciences, Professor, Professor, Department of Ceramics, Refractory Materials, Glass and Enamels Technology, National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", Kharkiv, Ukraine; ORCID: 0000-0001-7204-940X; e-mail: gala-shabanova@ukr.net.

Корогодська Алла Миколаївна – доктор технічних наук, старший дослідник, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», завідувачка кафедри загальної та неорганічної хімії; м. Харків, Україна; ORCID: 0000-0002-1534-2180; e-mail: all-korogodskaya@ukr.net.

Alla Korohodska – Doctor of Technical Sciences, Senior Researcher, Head of Department, Department of General and Inorganic Chemistry, National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", Kharkiv, Ukraine; ORCID: 0000-0002-1534-2180; e-mail: all-korogodskaya@ukr.net.

Шумейко Віта Миколаївна – кандидат технічних наук, Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», старший науковий співробітник кафедри технології кераміки, вогнетривів, скла та емалей; м. Харків, Україна; ORCID: 0000-0003-0567-0946; e-mail: shum-vita@ukr.net.

Vita Shumejko – Candidate of Technical Sciences (Ph. D.), Senior Researcher, Department of Ceramics, Refractory Materials, Glass and Enamels Technology, National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", Kharkiv, Ukraine; ORCID: 0000-0003-0567-0946; e-mail: shum-vita@ukr.net.

Цапко Наталія Сергіївна – кандидат технічних наук, доцент, науково-дослідна установа «Український науково-дослідний інститут екологічних проблем», перший заступник директора, м. Харків, Україна; ORCID: 0000-0003-2480-3636, e-mail: tsapkonatali@gmail.com.

Tsapko Nataliia – Candidate of Technical Sciences (Ph. D.), Associate Professor, Scientific Research Institution "Ukrainian Scientific Research Institute of Ecological Problems", First Deputy Director, Kharkiv, Ukraine; ORCID: 0000-0003-2480-3636, e-mail: tsapkonatali@gmail.com.

Будь ласка, посилайтесь на цю статтю наступним чином:

Логвінков С. М., Борисенко О. М., Шабанова Г. М., Корогодська А. М., Шумейко В. М., Цапко Н. С. Топологічна невизначеність тетраедрації чотирикомпонентних фізико-хімічних систем. *Вісник Національного технічного університету «ХПІ»*. Серія: Нові рішення в сучасних технологіях. – Харків: НТУ «ХПІ». 2025. № 4 (26). С. 30-36. doi:10.20998/2413-4295.2025.04.05.

Please cite this article as:

Logvinkov S., Borysenko O., Shabanova H., Korohodska A., Shumejko V., Tsapko N. Topological uncertainty of the tetrahedration of four-component physico-chemical systems. *Bulletin of the National Technical University "KhPI". Series: New solutions in modern technology*. – Kharkiv: NTU "KhPI", 2025, no. 4 (26), pp. 30-36, doi:10.20998/2413-4295.2025.04.05.

Надійшла (received) 09.11.2025

Прийнята (accepted) 19.12.2025