Supplementary Information:

Data-driven Approach to Parameterize SCAN+*U* for an Accurate Description of 3*d* Transition Metal Oxide Thermochemistry

Nongnuch Artrith^{1,*}, José Antonio Garrido Torres¹, Alexander Urban¹, and Mark S. Hybertsen^{2,†}

¹Department of Chemical Engineering, Columbia University, New York, NY, USA.

²Center for Functional Nanomaterials, Brookhaven National Laboratory, Upton, NY, USA.

*email: nartrith@atomistic.net †email: mhyberts@bnl.gov

Table S2. Oxide reactions and their corresponding enthalpies of reaction $\Delta_r H$ derived from the experimental enthalpies of formation in **Table S1**.

	$\Delta_r H$ (eV/atom)	Reaction
1	-0.156	$0.5 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + 0.5 \operatorname{Cr} \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{O}_3$
2	0.156	$2 \operatorname{Cr}_2 \operatorname{O}_3 \longrightarrow \operatorname{Cr} \operatorname{O}_2 + \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4$
3	0.033	$Fe_3O_4 \longrightarrow FeO + Fe_2O_3$
4	0.065	$Mn_3O_4 \longrightarrow MnO + Mn_2O_3$
5	-0.011	$0.5 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \mathrm{MnO_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_2O_3}$
6	-0.112	$MnO + MnO_2 \longrightarrow Mn_2O_3$
7	-0.044	$Mn_3O_4 + MnO + 2 MnO_2 \longrightarrow 3 Mn_2O_3$
8	0.011	$2 \operatorname{Mn_2O_3} \longrightarrow \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Mn_3O_4}$
9	-0.144	$2 \operatorname{MnO} + \operatorname{MnO}_2 \longrightarrow \operatorname{Mn}_3 \operatorname{O}_4$
10	-0.104	$Mn_2O_3 + 3 MnO + MnO_2 \longrightarrow 2 Mn_3O_4$
11	0.131	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 \longrightarrow 2MnO_2 + 3MnO$
12	0.144	$Mn_3O_4 \longrightarrow 2MnO + MnO_2$
13	-0.065	$0.5 \mathrm{Ti}_3 \mathrm{O}_5 + 0.5 \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{Ti}_2 \mathrm{O}_3$
14	-0.007	$Ti_3O_5 \longrightarrow TiO_2 + Ti_2O_3$
15	-0.119	$TiO + TiO_2 \longrightarrow Ti_2O_3$
16	-0.083	$Ti_3O_5 + 2TiO + TiO_2 \longrightarrow 3Ti_2O_3$
17	0.065	$2 \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O}_3 \longrightarrow \operatorname{TiO} + \operatorname{Ti}_3 \operatorname{O}_5$
18	-0.067	$TiO + 2TiO_2 \longrightarrow Ti_3O_5$
19	-0.030	$Ti_2O_3 + TiO + 3TiO_2 \longrightarrow 2Ti_3O_5$
20	0.067	$Ti_3O_5 \longrightarrow 2TiO_2 + TiO$
21	0.087	$Ti_2O_3 + Ti_3O_5 \longrightarrow 3TiO_2 + 2TiO$
22		$0.8\mathrm{V}_3\mathrm{O}_5 \longrightarrow 0.2\mathrm{V}_2\mathrm{O}_5 + \mathrm{V}_2\mathrm{O}_3$
23		$0.3333 \mathrm{V_2O_5} + 1.333 \mathrm{VO} \longrightarrow \mathrm{V_2O_3}$
24		$4 \text{ VO}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_5 + \text{V}_2\text{O}_3$
25		$0.5 \mathrm{V}_3\mathrm{O}_5 + 0.5 \mathrm{VO} \longrightarrow \mathrm{V}_2\mathrm{O}_3$
26		$V_3O_5 \longrightarrow VO_2 + V_2O_3$
27		$VO + VO_2 \longrightarrow V_2O_3$
28		$V_2O_5 + V_3O_5 + 5VO \longrightarrow 5V_2O_3$
29		$0.7778 \text{V}_3\text{O}_5 + 0.1111 \text{VO}_2 \longrightarrow 0.2222 \text{V}_2\text{O}_5 + \text{V}_2\text{O}_3$
30		$0.1818 \mathrm{V_2O_5} + 1.182 \mathrm{VO} + 0.4545 \mathrm{VO_2} \longrightarrow \mathrm{V_2O_3}$
31		$V_3O_5 + 2VO + VO_2 \longrightarrow 3V_2O_3$
32		$V_2O_5 + V_3O_5 + 6 VO + VO_2 \longrightarrow 6 V_2O_3$
33	0.028	$4 V_3 O_5 \longrightarrow 5 V_2 O_3 + V_2 O_5$

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                                     Reaction
34
                                             0.262
                                                                    3 \text{ V}_2\text{O}_3 \longrightarrow 4 \text{ VO} + \text{V}_2\text{O}_5
35
                                             0.233 \quad 1.5 \text{ V}_3\text{O}_5 \longrightarrow 2.5 \text{ VO} + \text{V}_2\text{O}_5
 36
                                             0.068 \quad 5 \text{ VO}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5 + \text{V}_2\text{O}_5
 37
                                             0.192 \quad 3 \text{ VO}_2 \longrightarrow \text{VO} + \text{V}_2\text{O}_5
 38
                                             0.244 V_2O_3 + V_3O_5 \longrightarrow 3 VO + V_2O_5
 39
                                             0.057 \quad V_3O_5 + 3 VO_2 \longrightarrow 2 V_2O_3 + V_2O_5
 40
                                             0.222 \quad 0.6667 \, \text{V}_2\text{O}_3 + 2.333 \, \text{VO}_2 \longrightarrow 1.667 \, \text{VO} + \text{V}_2\text{O}_5
41
                                             0.211 0.8333 \text{ V}_3\text{O}_5 + 1.333 \text{ VO}_2 \longrightarrow 1.833 \text{ VO} + \text{V}_2\text{O}_5
 42
                                            0.234 \quad V_2O_3 + V_3O_5 + VO_2 \longrightarrow 3.333 \text{ VO} + 1.333 V_2O_5
 43
                                          -0.028 1.25 V<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.25 V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> \longrightarrow V<sub>3</sub>O<sub>5</sub>
 44
                                            0.075 \quad 2 \text{ V}_2\text{O}_3 \longrightarrow \text{VO} + \text{V}_3\text{O}_5
 45
                                          -0.233 \quad 0.6667 \text{ V}_2\text{O}_5 + 1.667 \text{ VO} \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
 46
                                          -0.088 \quad VO + 2 VO_2 \longrightarrow V_3O_5
 47
                                          -0.094
                                                                   0.8462 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.3846 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.5385 \text{ VO} \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
 48
                                                                   1.167 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.3333 \text{ VO}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
                                          -0.018
 49
                                          -0.043
                                                                    V_2O_3 + VO + 3 VO_2 \longrightarrow 2 V_3O_5
50
                                          -0.187 \quad 0.4545 \, \text{V}_2 \, \text{O}_5 + 1.455 \, \text{VO} + 0.6364 \, \text{VO}_2 \longrightarrow \text{V}_3 \, \text{O}_5
51
                                          -0.083 0.7931 V<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.3103 V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> + 0.5172 VO + 0.2759 VO<sub>2</sub> \longrightarrow V<sub>3</sub>O<sub>5</sub>
 52
                                            0.245 \quad 0.75 \text{ V}_2\text{O}_3 \longrightarrow 0.25 \text{ V}_2\text{O}_5 + \text{VO}
53
                                             0.223 \quad 0.6 \, \text{V}_3 \, \text{O}_5 \longrightarrow 0.4 \, \text{V}_2 \, \text{O}_5 + \text{VO}
 54
                                             0.088 \quad V_3O_5 \longrightarrow 2VO_2 + VO
 55
                                             0.264 \quad 0.3333 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.3333 \text{ V}_3\text{O}_5 \longrightarrow 0.3333 \text{ V}_2\text{O}_5 + \text{VO}
 56
                                             0.252 \quad 0.7222 \, \text{V}_2 \, \text{O}_3 + 0.1111 \, \text{VO}_2 \longrightarrow 0.2778 \, \text{V}_2 \, \text{O}_5 + \text{VO}
 57
                                             0.111 V_2O_3 + V_3O_5 \longrightarrow 3 VO_2 + 2 VO
 58
                                            0.225 \quad 0.5926 \, \text{V}_3 \, \text{O}_5 + 0.03704 \, \text{VO}_2 \longrightarrow 0.4074 \, \text{V}_2 \, \text{O}_5 + \text{VO}_3 \, \text{O}_5 + \text{VO}_4 \, \text{O}_5 + \text{VO}_4 \, \text{O}_5 + \text{VO}_5 + \text{VO}
 59
                                          -0.014 \quad V_2O_3 + V_2O_5 + V_3O_5 \longrightarrow 6 VO_2 + VO
 60
                                          -0.083 \quad 0.25 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ V}_2\text{O}_5 \longrightarrow \text{VO}_2
61
                                          -0.068 \quad 0.2 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.2 \text{ V}_3\text{O}_5 \longrightarrow \text{VO}_2
 62
                                          -0.192 \quad 0.3333 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.3333 \text{ VO} \longrightarrow \text{VO}_2
 63
                                          -0.072 0.07143 V_2O_3 + 0.2143 V_2O_5 + 0.1429 V_3O_5 \longrightarrow VO_2
 64
                                          -0.108 0.1923 V_2O_3 + 0.2692 V_2O_5 + 0.07692 VO \longrightarrow VO_2
 65
                                          -0.078 0.2105 V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> + 0.1842 V<sub>3</sub>O<sub>5</sub> + 0.02632 VO \longrightarrow VO<sub>2</sub>
 66
                                          -0.104
                                                                    V_2O_3 + 3V_2O_5 + V_3O_5 + VO \longrightarrow 12VO_2
67
                                          -0.008 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + NiO \longrightarrow Al<sub>2</sub>NiO<sub>4</sub>
 68
                                          -0.170 0.3333 Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> + 0.6667 Cr<sub>3</sub>O<sub>4</sub> \longrightarrow Cr<sub>2</sub>CoO<sub>4</sub>
 69
                                          -0.081 CoO + Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> \longrightarrow Cr<sub>2</sub>CoO<sub>4</sub>
 70
                                          -0.192 CoO + 0.5 Cr<sub>3</sub>O<sub>4</sub> + 0.5 CrO<sub>2</sub> \longrightarrow Cr<sub>2</sub>CoO<sub>4</sub>
71
                                                                    0.2609 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.2174 \text{ CoO} + 0.2174 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.5217 \text{ Cr}_3\text{O}_4 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CoO}_4
                                          -0.150
 72
                                          -0.173
                                                                   0.28 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.16 \text{ CoO} + 0.64 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.08 \text{ Cr}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CoO}_4
 73
                                          -0.155 CoO + 0.3333 Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.3333 Cr<sub>3</sub>O<sub>4</sub> + 0.3333 CrO<sub>2</sub> \longrightarrow Cr<sub>2</sub>CoO<sub>4</sub>
74
                                                                   Co_3O_4 + 3CoO + Cr_2O_3 + 3Cr_3O_4 + CrO_2 \longrightarrow 6Cr_2CoO_4
                                          -0.162
 75
                                          -0.051
                                                                    Cr_2O_3 + FeO \longrightarrow Cr_2FeO_4
 76
                                          -0.078
                                                                   0.6667 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ Fe}_3\text{O}_4 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
77
                                          -0.163
                                                                    0.5 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + 0.5 \operatorname{Cr} \operatorname{O}_2 + \operatorname{FeO} \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{FeO}_4
 78
                                          -0.089
                                                                    0.6667 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.3333 \text{ Fe}\text{O} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Fe}\text{O}_4
 79
                                                                     0.3333 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.3333 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ Cr}_2\text{O}_2 + \text{FeO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
                                          -0.126
80
                                          -0.083
                                                                    0.1667 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.5556 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.2778 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.4444 \text{ FeO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                                          Reaction
  81
                                               -0.073
                                                                          0.2174 \, \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.5217 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.2609 \, \text{Fe}_3\text{O}_4 + 0.2174 \, \text{FeO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
   82
                                               -0.115
                                                                         Cr_3O_4 + 0.3333 CrO_2 + 0.3333 Fe_2O_3 + FeO \longrightarrow 1.667 Cr_2FeO_4
   83
                                               -0.092
                                                                          0.64 \,\mathrm{Cr}_3 \,\mathrm{O}_4 + 0.08 \,\mathrm{Cr} \,\mathrm{O}_2 + 0.28 \,\mathrm{Fe}_3 \,\mathrm{O}_4 + 0.16 \,\mathrm{FeO} \longrightarrow \mathrm{Cr}_2 \,\mathrm{FeO}_4
   84
                                               -0.082
                                                                          0.6667 \operatorname{Cr}_3 O_4 + 0.1111 \operatorname{Fe}_2 O_3 + 0.2222 \operatorname{Fe}_3 O_4 + 0.2222 
   85
                                               -0.108 Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 3 Cr<sub>3</sub>O<sub>4</sub> + CrO<sub>2</sub> + Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 4 FeO \longrightarrow 6 Cr<sub>2</sub>FeO<sub>4</sub>
   86
                                               -0.102
                                                                          Cr_2O_3 + 3Cr_3O_4 + CrO_2 + Fe_3O_4 + 3FeO \longrightarrow 6Cr_2FeO_4
   87
                                               -0.073
                                                                         0.2075 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.5283 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.01887 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2453 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.2264 \text{ FeO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
   88
                                               -0.089
                                                                         0.6512 \, \text{Cr}_3 \, \text{O}_4 + 0.04651 \, \text{Cr} \, \text{O}_2 + 0.06977 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.2326 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.1628 \, \text{Fe} \, \text{O} \longrightarrow \text{Cr}_2 \, \text{Fe} \, \text{O}_4
   89
                                               -0.098
                                                                          Cr_2O_3 + 5Cr_3O_4 + CrO_2 + Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + 4FeO \longrightarrow 9Cr_2FeO_4
   90
                                                 0.005
                                                                          Cr_2O_3 + NiO \longrightarrow Cr_2NiO_4
   91
                                               -0.106
                                                                          0.5 \operatorname{Cr}_3 O_4 + 0.5 \operatorname{Cr} O_2 + \operatorname{NiO} \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{Ni} O_4
                                                                         0.3333 \, \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.3333 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.3333 \, \text{Cr}_2 + \text{NiO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{NiO}_4
   92
                                               -0.069
   93
                                                 0.005
                                                                         Cr_2O_3 + CuO \longrightarrow Cr_2CuO_4
   94
                                               -0.061
                                                                         0.5 \operatorname{Cr}_2\operatorname{O}_3 + \operatorname{Cr}\operatorname{O}_2 + 0.5 \operatorname{Cu}_2\operatorname{O} \longrightarrow \operatorname{Cr}_2\operatorname{Cu}\operatorname{O}_4
   95
                                               -0.117 0.25 Cr<sub>3</sub>O<sub>4</sub> + 1.25 CrO<sub>2</sub> + 0.5 Cu<sub>2</sub>O \longrightarrow Cr<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub>
   96
                                               -0.106 0.5 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + 0.5 \operatorname{CrO}_2 + \operatorname{CuO} \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{CuO}_4
   97
                                               -0.098
                                                                          Cr_2O_3 + Cr_3O_4 + 7 CrO_2 + 3 Cu_2O \longrightarrow 6 Cr_2CuO_4
   98
                                               -0.069
                                                                         0.3333 \, \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.3333 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.3333 \, \text{Cr}_2 + \text{CuO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4
   99
                                               -0.034
                                                                          0.7 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.6 \text{ Cr}\text{O}_2 + 0.3 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.4 \text{ Cu}\text{O} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Cu}\text{O}_4
100
                                               -0.110
                                                                         0.4 \, \text{Cr}_3 \, \text{O}_4 + 0.8 \, \text{Cr} \, \text{O}_2 + 0.2 \, \text{Cu}_2 \, \text{O} + 0.6 \, \text{Cu} \, \text{O} \longrightarrow \text{Cr}_2 \, \text{Cu} \, \text{O}_4
101
                                               -0.065
                                                                          0.4091 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.6364 \text{ Cr}\text{O}_2 + 0.2273 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.5455 \text{ CuO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4
102
                                               -0.043
                                                                         0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.5 \text{ Fe}_2\text{O}_3 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
103
                                               -0.217 CuO + FeO \longrightarrow FeCuO<sub>2</sub>
104
                                               -0.082
                                                                         0.3333 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.3333 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.3333 \text{ Fe}_3\text{O}_4 \longrightarrow \text{Fe}\text{Cu}_2\text{O}_2
105
                                               -0.069
                                                                          0.3889 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2222 \text{ CuO} + 0.1667 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2222 \text{ Fe}_3\text{O}_4 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
106
                                               -0.078
                                                                         0.4 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2 \text{ CuO} + 0.4 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2 \text{ FeO} \longrightarrow \text{FeCuO}_2
107
                                               -0.116
                                                                         Cu_2O + 2CuO + Fe_3O_4 + FeO \longrightarrow 4FeCuO_2
108
                                               -0.073
                                                                         0.3793 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2414 \text{ CuO} + 0.1724 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2069 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.03448 \text{ FeO} \longrightarrow \text{FeCuO}_2
109
                                               -0.064
                                                                         0.5 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 2.5 \text{ Li}_2\text{O} \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4
110
                                               -0.049
                                                                          2.4 \text{ Li}_2\text{O} + 0.2 \text{ LiFe}_5\text{O}_8 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_4
111
                                               -0.025 2 Li<sub>2</sub>O + LiFeO<sub>2</sub> \longrightarrow Li<sub>5</sub>FeO<sub>4</sub>
112
                                                 0.040 6 LiFeO<sub>2</sub> \longrightarrow LiFe<sub>5</sub>O<sub>8</sub> + Li<sub>5</sub>FeO<sub>4</sub>
113
                                               -0.053 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 17 Li<sub>2</sub>O + LiFe<sub>5</sub>O<sub>8</sub> \longrightarrow 7 Li<sub>5</sub>FeO<sub>4</sub>
114
                                               -0.051 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 7Li<sub>2</sub>O + LiFeO<sub>2</sub> \longrightarrow 3Li<sub>5</sub>FeO<sub>4</sub>
115
                                               -0.029
                                                                         2.067 \text{ Li}_2\text{O} + 0.03333 \text{ LiFe}_5\text{O}_8 + 0.8333 \text{ LiFe}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_2\text{O}_4
116
                                               -0.050 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 19 Li<sub>2</sub>O + LiFe<sub>5</sub>O<sub>8</sub> + LiFeO<sub>2</sub> \longrightarrow 8 Li<sub>5</sub>FeO<sub>4</sub>
117
                                               -0.053
                                                                         2.5 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8
118
                                               -0.044 2.4 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.2 Li<sub>5</sub>FeO<sub>4</sub> \longrightarrow LiFe<sub>5</sub>O<sub>8</sub>
119
                                               -0.025 2 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + LiFeO<sub>2</sub> \longrightarrow LiFe<sub>5</sub>O<sub>8</sub>
120
                                               -0.047
                                                                         17 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + \text{Li}_2\text{O} + \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 \longrightarrow 7 \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8
121
                                               -0.044
                                                                         7 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + \text{Li}_2\text{O} + \text{Li}_2\text{Fe}_2 \longrightarrow 3 \text{Li}_3\text{Fe}_5\text{O}_8
122
                                               -0.029
                                                                          2.067 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.03333 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.8333 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_8
123
                                               -0.044
                                                                          19 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + \text{Li}_2\text{O} + \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2 \longrightarrow 8 \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8
124
                                               -0.098
                                                                          0.5 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}_2\text{O}_2
125
                                                                          0.4 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.2 \, \text{Li}_5 \, \text{Fe}_{04} \longrightarrow \text{Li}_{02} \, \text{Fe}_{02}
                                               -0.066
126
                                                                          0.4 \text{ Li}_2\text{O} + 0.2 \text{ Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_2
                                               -0.060
127
                                               -0.040
                                                                         0.1667 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.1667 \text{ Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_2
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                              Reaction
                            -0.075
128
                                             3 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + \text{Li}_2\text{O} + \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 \longrightarrow 7 \text{Li}\text{Fe}\text{O}_2
129
                            -0.071 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 3Li<sub>2</sub>O + LiFe<sub>5</sub>O<sub>8</sub> \longrightarrow 7LiFeO<sub>2</sub>
130
                            -0.043
                                             0.04706 \,\text{Fe}_2 \,\text{O}_3 + 0.1706 \,\text{Li}_5 \,\text{Fe} \,\text{O}_4 + 0.1471 \,\text{Li} \,\text{Fe}_5 \,\text{O}_8 \longrightarrow \text{Li} \,\text{Fe} \,\text{O}_2
131
                            -0.043
                                             0.04706 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1471 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.1706 \text{ LiFe}_5\text{O}_8 \longrightarrow \text{LiFeO}_2
                                             0.05 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.05 \text{ Li}_2\text{O} + 0.15 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.15 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_8 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2
132
                            -0.046
133
                            -0.188
                                             0.3333 \operatorname{Co}_3 \operatorname{O}_4 + 0.3333 \operatorname{Ti}_3 \operatorname{O}_5 \longrightarrow \operatorname{TiCoO}_3
134
                            -0.053
                                             CoO + TiO_2 \longrightarrow TiCoO_3
135
                            -0.184
                                             0.3333 \, \text{Co}_3 \, \text{O}_4 + 0.3333 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.3333 \, \text{Ti} \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{CoO}_3
136
                            -0.224
                                             0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ TiO} + 0.6667 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
137
                            -0.151
                                             Co_3O_4 + CoO + Ti_2O_3 + 2 TiO_2 \longrightarrow 4 TiCoO_3
138
                            -0.175
                                             0.3 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.1 \text{ CoO} + 0.3 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1 \text{ Ti}\text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{CoO}_3
                                             Co_3O_4 + CoO + TiO + 3 TiO_2 \longrightarrow 4 TiCoO_3
139
                            -0.181
140
                            -0.187
                                             0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2222 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1111 \text{ Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{Co}_3
141
                            -0.204
                                             2 \text{Co}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + 3 \text{TiO}_2 \longrightarrow 6 \text{Ti}\text{Co}\text{O}_3
142
                            -0.194
                                            0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.2778 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05556 \text{ TiO} + 0.1111 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
143
                            -0.181
                                             0.3182 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.04545 \text{ CoO} + 0.09091 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2273 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1364 \text{ Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{CoO}_3
144
                            -0.183
                                             2 \text{Co}_3\text{O}_4 + \text{CoO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + 4 \text{TiO}_2 \longrightarrow 7 \text{TiCoO}_3
145
                            -0.182
                                            0.3099 \, \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.07042 \, \text{CoO} + 0.2817 \, \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.02817 \, \text{TiO} + 0.1268 \, \text{TiO}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
146
                            -0.199
                                             3 \text{Co}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{Ti}\text{O} + 3 \text{Ti}\text{O}_2 \longrightarrow 9 \text{Ti}\text{Co}\text{O}_3
147
                            -0.184
                                             3 \text{Co}_3\text{O}_4 + \text{CoO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + 4 \text{TiO}_2 \longrightarrow 10 \text{TiCoO}_3
148
                            -0.247
                                             0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
149
                            -0.159
                                             0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
150
                            -0.062
                                            MnO + TiO_2 \longrightarrow TiMnO_3
151
                                             MnO_2 + TiO \longrightarrow TiMnO_3
                            -0.662
152
                            -0.025
                                             0.5 \text{ TiO}_2 + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
153
                            -0.189
                                             0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
154
                            -0.279
                                             0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.25 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
155
                            -0.139
                                             0.25 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.25 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
156
                            -0.306
                                             0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
157
                            -0.402
                                             Mn_2O_3 + TiO \longrightarrow TiMn_2O_4
158
                            -0.252
                                            0.25 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
159
                                            0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                            -0.155
160
                            -0.173
                                             Mn_3O_4 + Ti_2O_3 \longrightarrow TiMn_2O_4 + TiMnO_3
161
                            -0.195
                                             0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{TiO} + 0.6667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
162
                            -0.303
                                            0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.5 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
163
                            -0.226
                                             0.6667 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.3333 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
164
                            -0.037
                                             MnO + 2 TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 3 TiMnO_3
165
                            -0.198
                                             0.3333 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.3333 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
166
                            -0.131
                                             0.2 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.4 \,\mathrm{Ti} \,\mathrm{Mn}_2 \,\mathrm{O}_4 \longrightarrow \mathrm{Ti} \,\mathrm{MnO}_3
167
                            -0.169
                                             0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2222 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
168
                            -0.250
                                             0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
169
                                             0.1538 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2308 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1538 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2308 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                            -0.186
170
                            -0.186
                                             0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2222 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3889 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2222 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
171
                            -0.207
                                              Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 2Ti_2O_3 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 3TiMnO_3
172
                            -0.198
                                             0.1613 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2258 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3065 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08065 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
173
                                              0.1429 \,\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3 + 0.1429 \,\mathrm{Mn}_3\mathrm{O}_4 + 0.2857 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.1429 \,\mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4 \longrightarrow \mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_3\mathrm{O}_4
                            -0.147
174
                            -0.239
                                            0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.4 \,\mathrm{TiO} + 0.6 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                            Reaction
175
                           -0.265
                                            0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
176
                           -0.208
                                           Mn_2O_3 + 3MnO + MnO_2 + 2Ti_3O_5 \longrightarrow 6TiMnO_3
177
                           -0.208
                                           0.3889 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2222 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2222 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
178
                           -0.210
                                           0.4 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{MnO} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
179
                           -0.225
                                           0.4 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{MnO} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
180
                           -0.157
                                            Mn_2O_3 + 2MnO + Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 4TiMnO_3
181
                           -0.144
                                           0.2593 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.03704 \,\mathrm{MnO} + 0.2593 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2222 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
182
                           -0.271
                                           0.4286 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + 0.4286 \,\mathrm{TiO} + 0.5714 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
183
                           -0.330
                                           0.4 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
184
                           -0.214
                                           0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2222 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3889 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2222 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
185
                           -0.305
                                            0.4667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.06667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2333 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.3 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
186
                           -0.136
                                           0.1765 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05882 \text{ MnO}_2 + 0.2353 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2941 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
187
                           -0.357
                                           0.4286 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5714 \,\mathrm{TiO} + 0.4286 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
188
                           -0.268
                                           0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1667 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
189
                                           0.2857 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.07143 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2143 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2143 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                           -0.154
190
                           -0.267
                                           0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{TiO} + 0.1667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
191
                           -0.136
                                           0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
192
                           -0.288
                                           3 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + 2 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} \longrightarrow 6 \operatorname{TiMnO_3}
193
                           -0.209
                                           3 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 2 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 8 \text{ TiMnO}_3
194
                           -0.122
                                           0.2143 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2143 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07143 \text{ Ti}_{O_2} + 0.2857 \text{ Ti}_{Mn}\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_{Mn}\text{O}_3
195
                           -0.119
                                           0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3333 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
196
                           -0.269
                                           Mn_3O_4 + MnO + 2MnO_2 + 3Ti_2O_3 \longrightarrow 6TiMnO_3
197
                           -0.170
                                           0.2778 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ MnO} + 0.05556 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
198
                           -0.132
                                            Mn_3O_4 + MnO + Ti_2O_3 + 2TiO_2 \longrightarrow 4TiMnO_3
199
                           -0.149
                                           0.3 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{MnO} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
200
                           -0.161
                                           Mn_3O_4 + MnO + TiO + 3 TiO_2 \longrightarrow 4 TiMnO_3
201
                           -0.189
                                           0.3065 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08065 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1613 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2258 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
202
                           -0.279
                                           0.2333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.06667 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
203
                           -0.194
                                           0.3 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
204
                           -0.219
                                           0.1 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.3 \text{ MnO}_2 + 0.4 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}\text{MnO}_3
205
                           -0.209
                                           0.3 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
206
                           -0.146
                                          0.1757 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09459 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2703 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1892 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
207
                           -0.272
                                           0.2778 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4444 \,\mathrm{TiO} + 0.5556 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
208
                           -0.158
                                           0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1111 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2222 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1111 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
209
                           -0.175
                                          2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + 3 \text{TiO}_2 \longrightarrow 6 \text{ TiMnO}_3
210
                           -0.112 0.2222 Mn<sub>3</sub>O<sub>4</sub> + 0.2222 Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.3889 TiO<sub>2</sub> + 0.1667 TiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub> \longrightarrow TiMnO<sub>3</sub>
211
                           -0.165
                                           0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2778 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05556 \,\mathrm{TiO} + 0.1111 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
212
                           -0.118
                                          0.2308 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2308 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1538 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1538 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
213
                           -0.081
                                           0.1111 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ TiO} + 0.5556 \text{ TiO}_2 + 0.3333 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
214
                           -0.257
                                           0.6 \,\mathrm{MnO} + 0.4 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_2 \,\mathrm{O}_3 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 \longrightarrow \mathrm{Ti} \,\mathrm{MnO}_3
215
                           -0.354
                                           0.4286 \,\mathrm{MnO} + 0.5714 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.4286 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1429 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
216
                           -0.268
                                           0.5714 \,\mathrm{MnO} + 0.4286 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.4286 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1429 \,\mathrm{TiO}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
217
                           -0.240
                                           MnO + 2MnO_2 + 2Ti_2O_3 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 5TiMnO_3
218
                           -0.299
                                           0.5556 \,\mathrm{MnO} + 0.4444 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2778 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.1667 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
219
                           -0.185
                                           3 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO}_2 \longrightarrow 4 \text{ TiMnO}_3
220
                                           0.1111 \text{ MnO} + 0.2222 \text{ MnO}_2 + 0.2222 \text{ Ti}_3 \text{ O}_5 + 0.3333 \text{ Ti}_{\text{Mn}} \text{ O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_{\text{Mn}} \text{ O}_3
                           -0.147
221
                           -0.362
                                           0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiO}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                        Reaction
222
                                                        0.2308 \,\mathrm{MnO_2} + 0.07692 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1538 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.3846 \,\mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4 \longrightarrow \mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3
                                   -0.146
223
                                   -0.314
                                                       2 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + \text{TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 4 \text{TiMnO}_3
224
                                   -0.140
                                                       0.2222 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2222 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3889 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
225
                                   -0.142
                                                       0.2174 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1957 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.02174 \,\mathrm{TiO} + 0.3913 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
226
                                   -0.118
                                                       0.1765 \text{ MnO}_2 + 0.1765 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05882 \text{ TiO}_2 + 0.4118 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
227
                                   -0.152
                                                       0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.4 \,\mathrm{TiO_2} + 0.4 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
228
                                   -0.263
                                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + 2MnO_2 + 4Ti_2O_3 \longrightarrow 8TiMnO_3
229
                                   -0.191
                                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 3MnO + MnO_2 + 3Ti_3O_5 \longrightarrow 9TiMnO_3
230
                                   -0.185
                                                       0.1698 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2075 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.03774 \text{ MnO} + 0.1321 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2453 \text{ Ti}_3\text{O}_5 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
231
                                   -0.183
                                                       0.1724 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2069 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.03448 \,\mathrm{MnO} + 0.3793 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2414 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
232
                                   -0.191
                                                       0.1628 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2093 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04651 \,\mathrm{MnO} + 0.314 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05814 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
233
                                   -0.163
                                                       0.09091 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2273 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1364 \,\mathrm{MnO} + 0.3182 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.04545 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
234
                                   -0.160
                                                       2 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO} + 3 \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiMn_2O_4} \longrightarrow 10 \operatorname{TiMnO_3}
235
                                   -0.210
                                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + 2 TiO + 4 TiO_2 \longrightarrow 6 TiMnO_3
236
                                                       0.1304 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2391 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.02174 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1739 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2174 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                   -0.190
237
                                                       0.1818 \, Mn_2O_3 + 0.1364 \, Mn_3O_4 + 0.2273 \, MnO_2 + 0.4545 \, Ti_2O_3 + 0.09091 \, TiO \longrightarrow TiMnO_3
                                   -0.287
238
                                   -0.198
                                                        0.1364 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2273 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04545 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4091 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1818 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
239
                                   -0.221
                                                       0.1364 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.04545 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.4091 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.4091 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.4091 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.4091 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.4091 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.4091 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.4091 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.4091 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.4091 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_3 + 0.2273 \text{ Mn}_
240
                                   -0.218
                                                       0.1379 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2241 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05172 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2931 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1207 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
241
                                   -0.145
                                                       0.09091 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1364 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04545 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.2727 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1818 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_3
242
                                   -0.283
                                                       0.1538 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1923 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1154 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4615 \,\mathrm{TiO} + 0.5385 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
243
                                   -0.192
                                                       0.1739 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2174 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1304 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2391 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.02174 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
244
                                   -0.182
                                                       0.1321 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2453 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1698 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2075 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.03774 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
245
                                   -0.165
                                                       0.1803 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1475 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08197 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2459 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.09836 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
246
                                   -0.200
                                                       0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.06667 \,\mathrm{TiO} + 0.2667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
247
                                   -0.142
                                                       0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1111 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2778 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2778 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1667 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
248
                                   -0.198
                                                       0.1461 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.236 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2697 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1124 \,\mathrm{TiO} + 0.07865 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
249
                                   -0.195
                                                       3 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Mn_3O_4} + 3 \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO} + \operatorname{TiMn_2O_4} \longrightarrow 11 \operatorname{TiMnO_3}
250
                                   -0.129
                                                       0.09836 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1475 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2459 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08197 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1803 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
251
                                   -0.120
                                                       0.1379 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.03448 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1724 \,\mathrm{TiO} + 0.5172 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3103 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
252
                                   -0.220
                                                       0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2667 \,\mathrm{MnO} + 0.06667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
253
                                   -0.317
                                                       0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.09524 \,\mathrm{MnO} + 0.2381 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4286 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
254
                                   -0.231
                                                       0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2381 \,\mathrm{MnO} + 0.09524 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4286 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
255
                                   -0.242
                                                       Mn_2O_3 + MnO + 2MnO_2 + 3Ti_2O_3 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 7TiMnO_3
256
                                   -0.262
                                                       0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2222 \,\mathrm{MnO} + 0.1111 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2778 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1667 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
257
                                   -0.187
                                                        Mn_2O_3 + 4MnO + MnO_2 + 2Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 7TiMnO_3
258
                                   -0.148
                                                       0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08333 \,\mathrm{MnO} + 0.08333 \,\mathrm{MnO_2} + 0.25 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.25 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
259
                                   -0.325
                                                       0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
260
                                   -0.221
                                                       0.4091 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1818 \,\mathrm{MnO} + 0.1364 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2273 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.04545 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
261
                                   -0.205
                                                       0.3793 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2414 \,\mathrm{MnO} + 0.1724 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2069 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.03448 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
262
                                                       0.2889 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.02222 \,\mathrm{MnO} + 0.06667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2222 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                   -0.156
263
                                   -0.232
                                                       0.4286 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.09524 \,\mathrm{TiO} + 0.2381 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
264
                                   -0.121
                                                       Mn_2O_3 + MnO + Ti_2O_3 + 2TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 5TiMnO_3
265
                                   -0.224
                                                        0.3902 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2195 \,\mathrm{MnO} + 0.2683 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.122 \,\mathrm{TiO} + 0.07317 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
266
                                   -0.204
                                                       4 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + \text{MnO} + 3 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 11 \text{ TiMnO}_3
267
                                                       0.2195 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07317 \text{ MnO} + 0.2195 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09756 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.2439 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
                                   -0.128
268
                                   -0.145
                                                       Mn_2O_3 + MnO + TiO + 3TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 5TiMnO_3
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                           Reaction
269
                           -0.302
                                           0.4545 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ MnO}_2 + 0.1818 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1364 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2273 \text{ TiO} \longrightarrow \text{TiMnO}_3
270
                           -0.160
                                          0.1948 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ MnO}_2 + 0.1169 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1688 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2597 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
271
                           -0.317
                                          0.4286 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2381 \,\mathrm{TiO} + 0.09524 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
272
                           -0.231
                                          0.1724 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2414 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3793 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.03448 \,\mathrm{TiO} + 0.2069 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
273
                                          0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1111 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2778 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2778 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                           -0.157
274
                           -0.342
                                          3 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 3 \text{TiO} + \text{TiO}_2 \longrightarrow 7 \text{ TiMnO}_3
275
                           -0.173
                                          0.191 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1011 \text{ MnO}_2 + 0.2247 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06742 \text{ TiO} + 0.2584 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
276
                           -0.127
                                          0.1739 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.04348 \text{ MnO}_2 + 0.2174 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04348 \text{ TiO}_2 + 0.3043 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
277
                           -0.169
                                          0.09524 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.2381 \text{ TiO} + 0.4286 \text{ TiO}_2 + 0.3333 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_3
278
                           -0.278
                                          4 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + 2 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} \longrightarrow 8 \operatorname{TiMnO_3}
279
                           -0.217
                                           4 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Ti_2O_3} + 2 \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO} + \operatorname{TiMn_2O_4} \longrightarrow 10 \operatorname{TiMnO_3}
280
                           -0.138
                                          0.25 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08333 \,\mathrm{TiO_2} + 0.25 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
281
                           -0.193
                                          2 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{TiO} + 2 \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMn_2O_4} \longrightarrow 6 \operatorname{TiMnO_3}
282
                           -0.135
                                          0.2353 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2059 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.02941 \,\mathrm{TiO} + 0.08824 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2647 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
283
                           -0.194
                                          0.2697 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07865 \text{ MnO} + 0.1124 \text{ MnO}_2 + 0.1461 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.236 \text{ Ti}_3\text{O}_5 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
284
                           -0.325
                                          Mn_3O_4 + MnO + 3MnO_2 + 3Ti_2O_3 + TiO \longrightarrow 7TiMnO_3
285
                           -0.196
                                           0.2683 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07317 \,\mathrm{MnO} + 0.122 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3902 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2195 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
286
                           -0.245
                                          Mn_3O_4 + MnO + 3MnO_2 + 4Ti_2O_3 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 9TiMnO_3
287
                           -0.205
                                          0.2692 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07692 \,\mathrm{MnO} + 0.1154 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3077 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07692 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
288
                           -0.158
                                          0.2817 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1268 \,\mathrm{MnO} + 0.02817 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3099 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07042 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
289
                           -0.150
                                          0.1684 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.03158 \,\mathrm{MnO} + 0.1053 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2737 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1789 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
290
                           -0.270
                                          0.2609 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04348 \,\mathrm{MnO} + 0.1739 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4348 \,\mathrm{TiO} + 0.5652 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
291
                           -0.153
                                          0.3182 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04545 \text{ MnO} + 0.09091 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2273 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1364 \text{ Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
292
                           -0.159
                                          2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + 4 \text{TiO}_2 \longrightarrow 7 \text{ TiMnO}_3
293
                           -0.096
                                          Mn_3O_4 + MnO + Ti_2O_3 + 3TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 6TiMnO_3
                                          0.3099 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07042 \text{ MnO} + 0.2817 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.02817 \text{ TiO} + 0.1268 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
294
                           -0.155
295
                           -0.098
                                           Mn_3O_4 + MnO + Ti_3O_5 + 2TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 6TiMnO_3
296
                           -0.116
                                          Mn_3O_4 + MnO + TiO + 4TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 6TiMnO_3
297
                           -0.211
                                          0.2931 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1207 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1379 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2241 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05172 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
298
                           -0.180
                                          0.314 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05814 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1628 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2093 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.04651 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
299
                           -0.167
                                          0.1842 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1316 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1053 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2105 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1579 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
300
                           -0.233
                                          0.2778 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1667 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ TiO} + 0.2222 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
301
                           -0.283
                                          Mn_3O_4 + 3MnO_2 + 3Ti_2O_3 + TiO + TiMn_2O_4 \longrightarrow 8TiMnO_3
302
                           -0.155
                                          0.1429 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2857 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2143 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2143 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
303
                           -0.202
                                          0.3077 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07692 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2692 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1154 \,\mathrm{TiO} + 0.07692 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
304
                           -0.161
                                          0.1765 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1176 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2647 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.02941 \,\mathrm{TiO} + 0.1765 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
305
                           -0.129
                                          0.18 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06 \,\mathrm{MnO_2} + 0.24 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
306
                                          0.05556 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2222 \,\mathrm{TiO} + 0.4444 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3333 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                           -0.159
307
                           -0.169
                                          3 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO} + 3 \operatorname{TiO_2} \longrightarrow 9 \operatorname{TiMnO_3}
308
                                          0.2453 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.03774 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2075 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1698 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1321 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                           -0.123
309
                           -0.137
                                          2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}\text{O} + 4 \text{Ti}\text{O}_2 + \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 8 \text{Ti}\text{Mn}_3\text{O}_3
310
                           -0.139
                                          2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + 3 \text{TiO}_2 + \text{TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 8 \text{TiMnO}_3
311
                           -0.300
                                          0.5385 \,\mathrm{MnO} + 0.4615 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.1538 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1923 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.1154 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
312
                           -0.224
                                          4 \text{ MnO} + 2 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO}_2 \longrightarrow 6 \text{ TiMnO}_3
313
                           -0.161
                                          0.1071 \text{ MnO} + 0.25 \text{ MnO}_2 + 0.07143 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1786 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3214 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
314
                           -0.322
                                          0.5 \text{ MnO} + 0.5 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1667 \text{ TiO} + 0.1667 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
315
                           -0.310
                                          MnO + 3MnO_2 + 2Ti_2O_3 + TiO + TiMn_2O_4 \longrightarrow 6TiMnO_3
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                                                                                                     Reaction
 316
                                                                                    -0.147
                                                                                                                                      0.07692 \text{ MnO} + 0.2308 \text{ MnO}_2 + 0.2308 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1923 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.3462 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn
317
                                                                                    -0.295
                                                                                                                                     0.5652 \,\mathrm{MnO} + 0.4348 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2609 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.1739 \,\mathrm{TiO} + 0.04348 \,\mathrm{TiO}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
318
                                                                                    -0.266
                                                                                                                                     MnO + 2MnO_2 + Ti_3O_5 + TiO + TiMn_2O_4 \longrightarrow 5 TiMnO_3
 319
                                                                                    -0.131
                                                                                                                                     0.1277 \,\mathrm{MnO} + 0.1915 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.1915 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.08511 \,\mathrm{Ti}\mathrm{O}_2 + 0.3404 \,\mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4 \longrightarrow \mathrm{Ti}\mathrm{MnO}_3
 320
                                                                                    -0.193
                                                                                                                                    MnO + MnO_2 + TiO + 2TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 4TiMnO_3
 321
                                                                                    -0.212
                                                                                                                                     3 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + 3 \text{TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 9 \text{TiMnO}_3
 322
                                                                                    -0.134
                                                                                                                                     0.2075 \,\mathrm{MnO_2} + 0.07547 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1321 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.0566 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3962 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 323
                                                                                    -0.154
                                                                                                                                     0.2414 \text{ MnO}_2 + 0.2069 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.03448 \text{ TiO} + 0.1724 \text{ TiO}_2 + 0.3793 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 324
                                                                                    -0.134
                                                                                                                                     0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.03333 \,\mathrm{TiO} + 0.06667 \,\mathrm{TiO_2} + 0.4 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 325
                                                                                    -0.195
                                                                                                                                     0.1288 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.2045 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.07576 \, \text{MnO} + 0.05303 \, \text{MnO}_2 + 0.1591 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.2273 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 326
                                                                                    -0.308
                                                                                                                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + 3MnO_2 + 4Ti_2O_3 + TiO \longrightarrow 9TiMnO_3
                                                                                                                                     0.1333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.06667 \text{ MnO} + 0.06667 \text{ MnO}_2 + 0.4 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 327
                                                                                    -0.199
 328
                                                                                    -0.246
                                                                                                                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + 3MnO_2 + 5Ti_2O_3 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 11TiMnO_3
 329
                                                                                                                                      0.1333 \, Mn_2O_3 + 0.2 \, Mn_3O_4 + 0.06667 \, MnO + 0.06667 \, MnO_2 + 0.3 \, Ti_3O_5 + 0.1 \, TiO \longrightarrow TiMnO_3
                                                                                    -0.214
 330
                                                                                    -0.178
                                                                                                                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 4MnO + MnO_2 + 3Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 10TiMnO_3
 331
                                                                                    -0.150
                                                                                                                                     0.0922 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1277 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.03546 \,\mathrm{MnO} + 0.05674 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2766 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1702 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 332
                                                                                    -0.281
                                                                                                                                      0.1515 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.0303 \text{ MnO} + 0.1212 \text{ MnO}_2 + 0.4545 \text{ TiO} + 0.5455 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 333
                                                                                    -0.188
                                                                                                                                     0.1746 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2063 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.03175 \text{ MnO} + 0.127 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.246 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.007937 \text{ TiO} \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 334
                                                                                    -0.177
                                                                                                                                     0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2143 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07143 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2143 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07143 \text{ Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 335
                                                                                    -0.174
                                                                                                                                      3 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_2O_3} + 3 \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiMn_2O_4} \longrightarrow 12 \operatorname{TiMnO_3}
 336
                                                                                    -0.190
                                                                                                                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + Ti_2O_3 + TiO + 3 TiO_2 \longrightarrow 6 TiMnO_3
 337
                                                                                    -0.134
                                                                                                                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + 2Ti_2O_3 + 3TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 8TiMnO_3
 338
                                                                                    -0.189
                                                                                                                                     0.1453 \, Mn_2O_3 + 0.2137 \, Mn_3O_4 + 0.06838 \, MnO + 0.2735 \, Ti_3O_5 + 0.08547 \, TiO + 0.09402 \, TiO_2 \longrightarrow TiMnO_3 \, TiMnO_3 + 0.08547 \, TiO_3 + 0.08547 \,
 339
                                                                                    -0.194
                                                                                                                                     4 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + \text{Mn}_3\text{O}_4 + \text{Mn}\text{O} + 4 \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{Ti}\text{O} + \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 14 \text{Ti}\text{Mn}\text{O}_3
 340
                                                                                    -0.131
                                                                                                                                     0.1059 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1412 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.03529 \text{ MnO} + 0.2471 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09412 \text{ Ti}_2 + 0.1647 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 341
                                                                                    -0.163
                                                                                                                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + 2 TiO + 5 TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 8 TiMnO_3
 342
                                                                                    -0.220
                                                                                                                                     0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2143 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07143 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2143 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07143 \text{ Ti
 343
                                                                                    -0.184
                                                                                                                                     0.127 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.246 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.007937 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1746 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2063 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.03175 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 344
                                                                                    -0.170
                                                                                                                                     0.1084 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.1386 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.07831 \, \text{Mn} \text{O}_2 + 0.1205 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.2048 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1446 \, \text{Ti} \text{Mn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \text{Mn} \text{O}_3
 345
                                                                                    -0.243
                                                                                                                                     0.1538 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1923 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.1154 \, \text{Mn}_{2} + 0.3333 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1282 \, \text{TiO} + 0.2051 \, \text{TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 346
                                                                                    -0.234
                                                                                                                                     0.1429 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.04286 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.02857 \,\mathrm{TiO} + 0.1714 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 347
                                                                                    -0.160
                                                                                                                                    0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 348
                                                                                    -0.211
                                                                                                                                     0.1333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2333 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.03333 \text{ Mn}_2 + 0.2667 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1333 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.06667 \text{ Ti}_3\text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_3
 349
                                                                                    -0.173
                                                                                                                                     0.1053 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1316 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07895 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2632 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05263 \,\mathrm{TiO} + 0.1579 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 350
                                                                                    -0.131
                                                                                                                                    0.08219 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1438 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn} \, \text{O}_2 + 0.2466 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.06849 \, \text{Ti} \, \text{O}_2 + 0.1918 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_2 + 0.2466 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_2 + 0.1918 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_2 + 0.2466 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_2 + 0.1918 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_3 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_2 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_3 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_3 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_5 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.02055 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_5 + 0.06849 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.06849 \, \text{O}_5 \, \text{
 351
                                                                                    -0.169
                                                                                                                                     0.08 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.02 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.14 \text{ Mn}_2 + 0.24 \text{ TiO} + 0.44 \text{ TiO}_2 + 0.32 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_4
 352
                                                                                    -0.193
                                                                                                                                     0.1591 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2273 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1288 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2045 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05303 \text{ TiO} + 0.07576 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 353
                                                                                                                                     4 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti_2O_3} + 3 \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO} + \operatorname{TiMn_2O_4} \longrightarrow 13 \operatorname{TiMnO_3}
                                                                                    -0.203
 354
                                                                                    -0.147
                                                                                                                                     0.1346 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.1538 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.09615 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1923 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.09615 \, \text{Ti}_2 \text{O}_2 + 0.1346 \, \text{Ti}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3 \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.09615 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1923 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.09615 \, \text{Ti}_2 \text{O}_2 + 0.1346 \, \text{Ti}_3 \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3 \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.09615 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1923 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.09615 \, \text{Ti}_2 \text{O}_2 + 0.1346 \, \text{Ti}_3 \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3 \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.09615 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1923 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.09615 \, \text{Ti}_2 \text{O}_2 + 0.1346 \, \text{Ti}_3 \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3 \text{O}_4 + 0.09615 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1923 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.09615 \, \text{Ti}_2 \text
 355
                                                                                    -0.161
                                                                                                                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + TiO + 3TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 7TiMnO_3
 356
                                                                                    -0.144
                                                                                                                                     0.1216 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1486 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2365 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03378 \text{ TiO} + 0.1014 \text{ TiO}_2 + 0.1554 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 357
                                                                                    -0.263
                                                                                                                                     0.3333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2051 \text{ MnO} + 0.1282 \text{ MnO}_2 + 0.1538 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1923 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1154 \text{ TiO} \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 358
                                                                                    -0.206
                                                                                                                                     Mn_2O_3 + 3MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 6TiMnO_3
 359
                                                                                                                                     0.1852 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07407 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.1111 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1852 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2222 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1852 \text{ Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_
                                                                                    -0.170
 360
                                                                                    -0.285
                                                                                                                                     0.3333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ MnO} + 0.1667 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ TiO} + 0.1667 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 361
                                                                                    -0.294
                                                                                                                                      Mn_2O_3 + MnO + 3MnO_2 + 3Ti_2O_3 + TiO + TiMn_2O_4 \longrightarrow 8TiMnO_3
 362
                                                                                    -0.160
                                                                                                                                     0.16 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.04 \,\mathrm{MnO} + 0.12 \,\mathrm{MnO_2} + 0.28 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.18 \,\mathrm{TiO_2} + 0.26 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                                   Reaction
                                          -0.258
363
                                                                   0.3333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2319 \text{ MnO} + 0.1014 \text{ MnO}_2 + 0.2609 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1739 \text{ TiO} + 0.04348 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
364
                                          -0.174
                                                                   0.1795 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.06838 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.2393 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05128 \text{ TiO} + 0.2308 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
365
                                          -0.136
                                                                   0.1613 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09677 \text{ MnO} + 0.06452 \text{ MnO}_2 + 0.2258 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06452 \text{ TiO}_2 + 0.2581 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
366
                                          -0.231
                                                                   Mn_2O_3 + MnO + MnO_2 + 2 TiO + 3 TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 6 TiMnO_3
367
                                          -0.220
                                                                  0.4 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{MnO} + 0.1333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06667 \,\mathrm{TiO} + 0.06667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
368
                                          -0.210
                                                                   5 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + \text{MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + 3 \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 13 \text{TiMnO}_3
369
                                          -0.140
                                                                   0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05882 \text{ MnO} + 0.07353 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1765 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1029 \text{ TiO}_2 + 0.2206 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
370
                                          -0.174
                                                                   2 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{TiO} + 3 \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMn_2O_4} \longrightarrow 7 \operatorname{TiMnO_3}
371
                                          -0.132
                                                                   0.2273 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.06818 \text{ MnO} + 0.2159 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.01136 \text{ TiO} + 0.1023 \text{ TiO}_2 + 0.2386 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
372
                                          -0.321
                                                                   4 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + \text{Mn}_2\text{O}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 3 \text{Ti}_2\text{O} + \text{Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow 9 \text{Ti}_3\text{Mn}_3
373
                                          -0.180
                                                                   0.2016 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1129 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.1048 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1694 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04032 \text{ Ti}\text{O} + 0.2419 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_3
374
                                          -0.152
                                                                  0.1923 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07692 \text{ MnO}_2 + 0.1154 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1538 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03846 \text{ TiO}_2 + 0.2692 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
375
                                          -0.187
                                                                  0.1786 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.25 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.07143 \,\mathrm{TiO} + 0.1786 \,\mathrm{TiO_2} + 0.25 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
376
                                          -0.165
                                                                   0.1897 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.08621 \text{ MnO}_2 + 0.1983 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07759 \text{ TiO} + 0.06034 \text{ TiO}_2 + 0.2672 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
377
                                          -0.208
                                                                   3 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMn_2O_4} \longrightarrow 8 \operatorname{TiMnO_3}
378
                                          -0.207
                                                                   0.2667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.06667 \, \text{MnO} + 0.1333 \, \text{MnO}_2 + 0.1333 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.2333 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.03333 \, \text{TiO} \longrightarrow \text{TiMnO}_3
379
                                          -0.182
                                                                   0.2735 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.09402 \text{ MnO} + 0.08547 \text{ MnO}_2 + 0.1453 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2137 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06838 \text{ Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
380
                                          -0.170
                                                                   0.1793 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.02069 \text{ MnO} + 0.1379 \text{ MnO}_2 + 0.1034 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2138 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1517 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}\text{MnO}_3
381
                                          -0.231
                                                                   0.2609 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04348 \text{ MnO} + 0.1739 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1014 \text{ TiO} + 0.2319 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
382
                                          -0.287
                                                                   Mn_3O_4 + MnO + 4MnO_2 + 4Ti_2O_3 + TiO + TiMn_2O_4 \longrightarrow 10TiMnO_3
383
                                          -0.160
                                                                   Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 2Ti_2O_3 + 2TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 7TiMnO_3
384
                                          -0.196
                                                                   0.2727 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.09091 \text{ MnO} + 0.09091 \text{ MnO}_2 + 0.2727 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09091 \text{ TiO} + 0.09091 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
385
                                          -0.162
                                                                   0.1707 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.02439 \, \text{MnO} + 0.122 \, \text{MnO}_2 + 0.2683 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.02439 \, \text{TiO} + 0.1707 \, \text{TiMn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
386
                                          -0.133
                                                                   0.1694 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04839 \text{ MnO} + 0.07258 \text{ MnO}_2 + 0.2419 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08871 \text{ Ti}_2 + 0.1855 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.04839 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04839 \text{ MnO}_3 + 
387
                                          -0.194
                                                                   Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 2 TiO + 4 TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 7 TiMnO_3
388
                                          -0.159
                                                                   3 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + 4 \text{TiO}_2 \longrightarrow 10 \text{ TiMnO}_3
389
                                          -0.117
                                                                   2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 3 \text{Ti}_2\text{O}_2 + \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 9 \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_3
390
                                          -0.129
                                                                   2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + 5 \text{TiO}_2 + \text{TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 9 \text{TiMnO}_3
391
                                          -0.130
                                                                   2 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + \text{MnO} + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + \text{TiO} + 4 \text{TiO}_2 + \text{TiMn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow 9 \text{TiMnO}_3
392
                                          -0.204
                                                                   0.3 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06667 \,\mathrm{TiO} + 0.06667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
393
                                          -0.247
                                                                   Mn_3O_4 + 2MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiMn_2O_4 \longrightarrow 7 TiMnO_3
394
                                          -0.151
                                                                  0.1883 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.0974 \text{ MnO}_2 + 0.1039 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07792 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1688 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4
395
                                          -0.173
                                                                   0.1444 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1667 \text{ MnO}_2 + 0.2667 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.04444 \text{ TiO} + 0.2222 \text{ TiO}_2 + 0.2 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
396
                                          -0.151
                                                                  0.1818 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.09091 \, \text{MnO}_2 + 0.2273 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.04545 \, \text{TiO} + 0.09091 \, \text{TiO}_2 + 0.1818 \, \text{TiMn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
397
                                          -0.143
                                                                  3 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO} + 4 \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMn_2O_4} \longrightarrow 11 \operatorname{TiMnO_3}
398
                                          -0.297
                                                                   0.5455 \text{ MnO} + 0.4545 \text{ MnO}_2 + 0.1515 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1212 \text{ TiO} + 0.0303 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
399
                                          -0.240
                                                                   MnO + 3MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + 2TiMn_2O_4 \longrightarrow 8TiMnO_3
400
                                          -0.145
                                                                  0.1233 \,\mathrm{MnO} + 0.2192 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.06849 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1507 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.08219 \,\mathrm{Ti}\mathrm{O}_2 + 0.3288 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
401
                                          -0.157
                                                                  0.07317 \,\mathrm{MnO} + 0.2439 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2195 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.02439 \,\mathrm{TiO} + 0.1951 \,\mathrm{Ti}\mathrm{O}_2 + 0.3415 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
402
                                                                  0.125 \text{ MnO} + 0.2 \text{ MnO}_2 + 0.1875 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.0125 \text{ TiO} + 0.0875 \text{ TiO}_2 + 0.3375 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                          -0.137
403
                                          -0.139
                                                                  0.2143 \text{ MnO}_2 + 0.07143 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.131 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.0119 \text{ TiO} + 0.05952 \text{ TiO}_2 + 0.3929 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
404
                                                                  0.1389 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1944 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.05556 \, \text{MnO} + 0.08333 \, \text{MnO}_2 + 0.1389 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.2222 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.05556 \, \text{TiO} \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                          -0.217
405
                                          -0.185
                                                                   0.1228 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2105 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08772 \text{ MnO} + 0.03509 \text{ MnO}_2 + 0.1579 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2105 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05263 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
406
                                          -0.173
                                                                  0.109 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1327 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.0237 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.08531 \, \text{Mn} \, \text{O}_2 + 0.1185 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.2085 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1374 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn} \, \text{O}_3 + 0.1374 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.0237 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 \, \text
407
                                          -0.241
                                                                  0.1515 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.0303 \text{ MnO} + 0.1212 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1212 \text{ TiO} + 0.2121 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
408
                                          -0.280
                                                                   Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO_7 + 5Ti_2O_3 + TiO_7 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 12TiMnO_3
409
                                          -0.179
                                                                   Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 3Ti_2O_3 + 2TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 9TiMnO_3
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                                                                                                                                                              Reaction
410
                                                                                                                        -0.206
                                                                                                                                                                                              0.127 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2063 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07937 \,\mathrm{MnO} + 0.04762 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2698 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1111 \,\mathrm{TiO} + 0.07937 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
411
                                                                                                                        -0.173
                                                                                                                                                                                            0.1048 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1266 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.02183 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.08297 \, \text{Mn} \, \text{O}_2 + 0.2664 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.04803 \, \text{Ti} \, \text{O} + 0.1528 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1266 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.02183 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.08297 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_2 + 0.2664 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.04803 \, \text{Ti} \, \text{O} + 0.1528 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1266 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.02183 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.08297 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_2 + 0.2664 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.04803 \, \text{Ti} \, \text{O}_4 + 0.1528 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.02183 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 \, \text{
412
                                                                                                                        -0.135
                                                                                                                                                                                            0.08287 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1326 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04972 \,\mathrm{MnO} + 0.03315 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2486 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07735 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1768 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
413
                                                                                                                        -0.219
                                                                                                                                                                                              Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 3 TiO + 5 TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 9 TiMnO_3
                                                                                                                                                                                              414
                                                                                                                        -0.186
415
                                                                                                                        -0.201
                                                                                                                                                                                               5 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + \text{Mn}_3\text{O}_4 + \text{Mn}_3\text{O}_4 + \text{Mn}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{Ti}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_3\text{Nn}_3\text{O}_4 + \text{Mn}_3\text{O}_4 + \text{
416
                                                                                                                        -0.147
                                                                                                                                                                                              0.1367 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1511 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.01439 \,\mathrm{MnO} + 0.09353 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1942 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1007 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1295 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
417
                                                                                                                        -0.149
                                                                                                                                                                                              Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + Ti_2O_3 + TiO + 4TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 8TiMnO_3
418
                                                                                                                        -0.142
                                                                                                                                                                                              0.1222 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1444 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.02222 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.2389 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.02778 \, \text{Ti} \, \text{O} + 0.1056 \, \text{Ti} \, \text{O}_2 + 0.15 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1444 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.02222 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.02778 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 \, \text{O
419
                                                                                                                        -0.214
                                                                                                                                                                                              0.1389 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2222 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05556 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.1389 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1944 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08333 \text{ Ti}\text{O} + 0.05556 \text{ Ti}\text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}\text{O}_3
420
                                                                                                                        -0.181
                                                                                                                                                                                              0.1136 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1364 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09091 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1136 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2045 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.02273 \,\mathrm{TiO} + 0.1364 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
421
                                                                                                                        -0.156
                                                                                                                                                                                              0.1 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1455 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05455 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.1182 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06364 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.1545 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06364 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.1545 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06364 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.1545 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06364 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.1545 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{
422
                                                                                                                        -0.187
                                                                                                                                                                                            0.1129 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.09677 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.129 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2742 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.06452 \,\mathrm{TiO} + 0.2097 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1774 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
423
                                                                                                                        -0.163
                                                                                                                                                                                              0.09836 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1393 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05738 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2295 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06557 \,\mathrm{TiO} + 0.08197 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1639 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
424
                                                                                                                        -0.160
                                                                                                                                                                                              Mn_2O_3 + 2Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + 3TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 10TiMnO_3
425
                                                                                                                        -0.260
                                                                                                                                                                                              0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2121 \,\mathrm{MnO} + 0.1212 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1515 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1818 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1212 \,\mathrm{TiO} + 0.0303 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3} + 0.1212 \,\mathrm{MnO_3} + 0.1212 \,\mathrm{MnO_3
426
                                                                                                                        -0.180
                                                                                                                                                                                              0.1902 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.06748 \,\mathrm{MnO} + 0.1227 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1043 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.184 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.02454 \,\mathrm{TiO} + 0.2147 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3} + 0.0143 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0
427
                                                                                                                        -0.158
                                                                                                                                                                                              0.1799 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.08633 \text{ MnO} + 0.09353 \text{ MnO}_2 + 0.1079 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1655 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05755 \text{ Ti}_2 + 0.2302 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2 \longrightarrow 
428
                                                                                                                        -0.187
                                                                                                                                                                                              0.1733 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.02667 \,\mathrm{MnO} + 0.1467 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2533 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.06667 \,\mathrm{TiO} + 0.1867 \,\mathrm{TiO_2} + 0.24 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
429
                                                                                                                        -0.165
                                                                                                                                                                                            0.1757 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.08108 \, \text{MnO} + 0.09459 \, \text{MnO}_2 + 0.2095 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.06081 \, \text{TiO} + 0.07432 \, \text{TiO}_2 + 0.2365 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \, \text{TiO}_2 + 0.2365 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \, \text{TiO}_4 + 0.08108 \, \text{TiO
430
                                                                                                                        -0.191
                                                                                                                                                                                              3 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO} + 2 \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMn_2O_4} \longrightarrow 9 \operatorname{TiMnO_3}
431
                                                                                                                        -0.173
                                                                                                                                                                                            0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.15 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05 \,\mathrm{TiO} + 0.05 \,\mathrm{TiO_2} + 0.25 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
432
                                                                                                                        -0.199
                                                                                                                                                                                              0.2698 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07937 \,\mathrm{MnO} + 0.1111 \,\mathrm{MnO_2} + 0.127 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2063 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.04762 \,\mathrm{TiO} + 0.07937 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
433
                                                                                                                        -0.247
                                                                                                                                                                                              Mn_3O_4 + MnO + 2.5 MnO_2 + Ti_2O_3 + 1.5 Ti_3O_5 + TiO + TiMn_2O_4 \longrightarrow 8.5 TiMnO_3
434
                                                                                                                        -0.153
                                                                                                                                                                                              0.1799 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.03704 \, \text{MnO} + 0.1058 \, \text{MnO}_2 + 0.1005 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1852 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.08466 \, \text{TiO}_2 + 0.1587 \, \text{Ti} \text{Mn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \text{MnO}_3
435
                                                                                                                        -0.177
                                                                                                                                                                                              Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + TiO + 3TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 7TiMnO_3
436
                                                                                                                        -0.151
                                                                                                                                                                                              0.1731 \, \text{Mn}_3 \text{O4} + 0.03846 \, \text{MnO} + 0.09615 \, \text{MnO}_2 + 0.2308 \, \text{Ti}_3 \text{O5} + 0.03846 \, \text{TiO} + 0.09615 \, \text{TiO}_2 + 0.1731 \, \text{TiMn}_2 \text{O4} \longrightarrow \text{TiMnO}_3
437
                                                                                                                        -0.136
                                                                                                                                                                                              3 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + 5 \text{Ti}_2\text{O}_2 + \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 12 \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_3
438
                                                                                                                        -0.158
                                                                                                                                                                                            0.1885 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1066 \,\mathrm{MnO_2} + 0.09836 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1803 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.01639 \,\mathrm{TiO} + 0.08197 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1639 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
439
                                                                                                                        -0.197
                                                                                                                                                                                              MnO + 3MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + 3TiMn_2O_4 \longrightarrow 10TiMnO_3
440
                                                                                                                        -0.209
                                                                                                                                                                                              0.1333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.06667 \text{ MnO} + 0.06667 \text{ MnO}_2 + 0.1333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06667 \text{ TiO} + 0.06667 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
441
                                                                                                                        -0.181
                                                                                                                                                                                            0.1132 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1321 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.01887 \text{ MnO} + 0.09434 \text{ MnO}_2 + 0.1132 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2075 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.01887 \text{ TiO} + 0.1321 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \longrightarrow 
442
                                                                                                                        -0.159
                                                                                                                                                                                              0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.137 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.03704 \,\mathrm{MnO} + 0.06296 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1148 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1852 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07037 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1444 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
443
                                                                                                                        -0.206
                                                                                                                                                                                              Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 2TiO + 4TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 9TiMnO_3
444
                                                                                                                        -0.163
                                                                                                                                                                                              0.09722\,Mn_{2}O_{3} + 0.1319\,Mn_{3}O_{4} + 0.03472\,MnO + 0.0625\,MnO_{2} + 0.2326\,Ti_{3}O_{5} + 0.05903\,TiO + 0.08681\,TiO_{2} + 0.1563\,TiMn_{2}O_{4} \longrightarrow TiMnO_{3}O_{4} + 0.0625\,MnO_{2} + 0.0625\,MnO_{2} + 0.0625\,MnO_{3} + 0.06681\,TiO_{2} + 0.06681\,TiO_{2} + 0.06681\,TiO_{3} + 0.06681\,
445
                                                                                                                      -0.151
                                                                                                                                                                                              Mn_2O_3 + 2Mn_3O_4 + MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + 4TiO_2 + TiMn_2O_4 \longrightarrow 11TiMnO_3
                                                                                                                        -0.172
446
                                                                                                                                                                                            0.1071 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07143 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.1071 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1786 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03571 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.07143 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2 \longrightarrow 
447
                                                                                                                        -0.172
                                                                                                                                                                                           0.1863 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07843 \text{ MnO} + 0.1078 \text{ MnO}_2 + 0.09804 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1618 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03431 \text{ TiO} + 0.06373 \text{ TiO}_2 + 0.2206 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                                                                                                                                                           448
                                                                                                                        -0.158
449
                                                                                                                                                                                            0.1061\,Mn_2O_3 + 0.1364\,Mn_3O_4 + 0.0303\,MnO + 0.07576\,MnO_2 + 0.1061\,Ti_2O_3 + 0.1818\,Ti_3O_5 + 0.0303\,TiO + 0.07576\,TiO_2 + 0.1364\,TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3
                                                                                                                        -0.171
450
                                                                                                                        -0.038
                                                                                                                                                                                            NiO + TiO_2 \longrightarrow TiNiO_3
451
                                                                                                                                                                                              2 \text{ MnO} + \text{TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                                                                                                        -0.053
452
                                                                                                                        -0.009
                                                                                                                                                                                              MnO + TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4
453
                                                                                                                        -0.185
                                                                                                                                                                                              0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + \mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
454
                                                                                                                        -0.144
                                                                                                                                                                                            0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.333 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
455
                                                                                                                        -0.247
                                                                                                                                                                                              Mn_2O_3 + Ti_2O_3 \longrightarrow 2 TiMnO_3
456
                                                                                                                        -0.153
                                                                                                                                                                                           0.5 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                        Reaction
457
                         -0.122
                                        0.3333 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + \text{MnO} + 0.3333 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 \longrightarrow \text{Ti}_{10} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4
458
                         -0.409
                                       0.5 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
459
                         -0.214
                                       0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
460
                         -0.230
                                       0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
461
                         -0.159
                                       Mn_3O_4 + Ti_3O_5 \longrightarrow 3 TiMnO_3
462
                         -0.242
                                       0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.6667 \,\mathrm{TiO} + 0.3333 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
463
                         -0.173
                                       0.5 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
464
                         -0.225
                                       1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.5 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
465
                         -0.170
                                       1.667 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.3333 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
466
                         -0.481
                                       MnO + MnO_2 + TiO \longrightarrow TiMn_2O_4
467
                         -0.031
                                       3 \text{ MnO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 2 \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 3MnO + 2Ti_2O_3 \longrightarrow 4TiMn_2O_4
468
                         -0.169
469
                         -0.133
                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7MnO + 2Ti_3O_5 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
470
                         -0.407
                                       0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                       0.1667\,Mn_2O_3 + 0.5556\,Mn_3O_4 + 0.2778\,Ti_2O_3 + 0.4444\,TiO \longrightarrow TiMn_2O_4
471
                         -0.245
472
                         -0.252
                                       0.129 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5806 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1452 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5645 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
473
                         -0.274
                                       0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.7333 \,\mathrm{TiO} + 0.2667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
474
                         -0.206
                                       0.1429 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.4286 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5714 \,\mathrm{TiO} + 0.4286 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
475
                         -0.205
                                       Mn_2O_3 + 5MnO + MnO_2 + 2Ti_2O_3 \longrightarrow 4TiMn_2O_4
476
                         -0.157
                                       Mn_2O_3 + 9MnO + MnO_2 + 2Ti_3O_5 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
477
                         -0.428
                                       0.6667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
478
                         -0.160
                                       2 \operatorname{Mn_2O_3} + 6 \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} \longrightarrow 5 \operatorname{TiMn_2O_4}
479
                         -0.272
                                       0.7 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6 \,\mathrm{MnO} + 0.3 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.4 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
480
                         -0.141
                                       Mn_2O_3 + 4MnO + Ti_2O_3 + TiO_2 \longrightarrow 3TiMn_2O_4
481
                         -0.126
                                       0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + \mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
482
                         -0.273
                                       0.6667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6667 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
483
                         -0.121
                                        Mn_2O_3 + 6MnO + Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 4TiMn_2O_4
484
                         -0.076
                                       0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.167 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
485
                         -0.302
                                       0.7143 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5714 \text{ MnO} + 0.7143 \text{ TiO} + 0.2857 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
486
                         -0.205
                                       0.5 \,\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3 + 0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiMnO}_3 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
487
                         -0.189
                                       Mn_3O_4 + 4MnO + MnO_2 + 2Ti_2O_3 \longrightarrow 4TiMn_2O_4
488
                         -0.146
                                       Mn_3O_4 + 8MnO + MnO_2 + 2Ti_3O_5 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
489
                         -0.433
                                        Mn_3O_4 + MnO + 2MnO_2 + 3TiO \longrightarrow 3TiMn_2O_4
490
                         -0.149
                                       0.4783 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5652 \,\mathrm{MnO} + 0.4348 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.04348 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
491
                         -0.189
                                       0.6 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2 \,\mathrm{MnO} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
492
                         -0.119
                                       Mn_3O_4 + 3MnO + Ti_2O_3 + TiO_2 \longrightarrow 3TiMn_2O_4
493
                         -0.132
                                       0.4286 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5714 \,\mathrm{MnO} + 0.4286 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
494
                         -0.195
                                       0.56 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.32 \,\mathrm{MnO} + 0.22 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.34 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
495
                         -0.105
                                       Mn_3O_4 + 5MnO + Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 4TiMn_2O_4
496
                         -0.101
                                       0.2727 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.2727 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1818 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
497
                         -0.219
                                       0.5833 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \,\mathrm{MnO} + 0.5833 \,\mathrm{TiO} + 0.4167 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
498
                         -0.149
                                       0.4286 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + 0.4286 \,\mathrm{TiO} + 0.5714 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
499
                         -0.284
                                       Mn_3O_4 + 0.3333 MnO_2 + 0.3333 Ti_2O_3 + TiO \longrightarrow 1.667 TiMn_2O_4
500
                         -0.279
                                        Mn_3O_4 + 0.2 MnO_2 + 0.2 Ti_3O_5 + TiO \longrightarrow 1.6 TiMn_2O_4
501
                         -0.309
                                       3 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO}_2 + 4 \text{ TiO} + \text{TiO}_2 \longrightarrow 5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
502
                                       2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO}_2 + 3 \text{ TiO} + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 4 \text{TiMn}_2\text{O}_4
                         -0.291
503
                         -0.219
                                       0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2222 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.05556 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.3889 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                     Reaction
504
                       -0.228
                                     4 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + 3 \text{ TiO} + \text{TiO}_2 \longrightarrow 6 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
505
                       -0.198
                                     0.6 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.4 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
506
                       -0.234
                                     6 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti_3O_5} + 5 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} \longrightarrow 9 \operatorname{TiMn_2O_4}
507
                       -0.204
                                     0.5909 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09091 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.2273 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
508
                       -0.187
                                     0.5333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5333 \,\mathrm{TiO} + 0.06667 \,\mathrm{TiO_2} + 0.4 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
509
                       -0.214
                                     1.533 \text{ MnO} + 0.4667 \text{ MnO}_2 + 0.4 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.06667 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
510
                       -0.335
                                     1.286 \,\mathrm{MnO} + 0.7143 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2857 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.4286 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
511
                       -0.167
                                     5 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO}_2 \longrightarrow 3 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
512
                       -0.070
                                     1.143 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.7143 \text{ Ti}_3\text{MnO}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
513
                       -0.326
                                     1.333 \text{ MnO} + 0.6667 \text{ MnO}_2 + 0.1667 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.5 \text{ TiO} \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
514
                       -0.141
                                     7 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + \text{TiO}_2 \longrightarrow 4 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
515
                       -0.041
                                     1.133 \text{ MnO} + 0.06667 \text{ MnO}_2 + 0.06667 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.8 \text{ Ti} \text{MnO}_3 \longrightarrow \text{Ti} \text{Mn}_2 \text{O}_4
516
                       -0.374
                                     1.25 \text{ MnO} + 0.75 \text{ MnO}_2 + 0.75 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
517
                       -0.166
                                     MnO + 0.3333 MnO_2 + 0.3333 TiO + 0.6667 TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4
518
                       -0.187
                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 6MnO + MnO_2 + 3Ti_2O_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
519
                       -0.145
                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 12 MnO + MnO_2 + 3 Ti_3O_5 \longrightarrow 9 TiMn_2O_4
520
                       -0.425
                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + 2MnO_2 + 4TiO \longrightarrow 4TiMn_2O_4
521
                       -0.147
                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 5MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
522
                       -0.223
                                     0.2069 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.4483 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2414 \,\mathrm{MnO} + 0.3448 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3103 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
523
                       -0.146
                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 5MnO + 2Ti_2O_3 + TiO_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
524
                       -0.137
                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 4MnO + 2Ti_2O_3 + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
525
                       -0.219
                                     0.1395 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.4651 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3256 \,\mathrm{MnO} + 0.1977 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.407 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
526
                       -0.121
                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 9MnO + 2Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
527
                       -0.115
                                     Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 8MnO + 2Ti_3O_5 + TiMnO_3 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
528
                       -0.251
                                     0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.45 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \,\mathrm{MnO} + 0.65 \,\mathrm{TiO} + 0.35 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
529
                       -0.184
                                     0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
530
                       -0.310
                                     Mn_2O_3 + 3Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + 4TiO \longrightarrow 6TiMn_2O_4
531
                       -0.289
                                     Mn_2O_3 + 5Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_3O_5 + 6TiO \longrightarrow 9TiMn_2O_4
532
                       -0.325
                                     Mn_2O_3 + 3Mn_3O_4 + MnO_2 + 5TiO + TiO_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
533
                       -0.313
                                     Mn_2O_3 + 2Mn_3O_4 + MnO_2 + 4TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
534
                       -0.245
                                     0.1522 \, Mn_2O_3 + 0.5652 \, Mn_3O_4 + 0.2391 \, Ti_2O_3 + 0.02174 \, Ti_3O_5 + 0.4565 \, TiO \longrightarrow TiMn_2O_4
535
                       -0.253
                                     Mn_2O_3 + 4Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + 4TiO + TiO_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
536
                       -0.223
                                     0.1154 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5385 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1923 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.4615 \,\mathrm{TiO} + 0.1538 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
537
                       -0.251
                                     Mn_2O_3 + 6Mn_3O_4 + Ti_3O_5 + 6TiO + TiO_2 \longrightarrow 10TiMn_2O_4
538
                       -0.223
                                     0.09589 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5342 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08219 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5479 \,\mathrm{TiO} + 0.2055 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
539
                       -0.210
                                     0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.4583 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.5833 \text{ TiO} + 0.04167 \text{ TiO}_2 + 0.375 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
540
                       -0.176
                                     Mn_2O_3 + 7MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
541
                       -0.282
                                     0.6667 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.619 \text{ MnO} + 0.04762 \text{ MnO}_2 + 0.2857 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.4286 \text{ TiO} \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
542
                       -0.174
                                     Mn_2O_3 + 7MnO + MnO_2 + 2Ti_2O_3 + TiO_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
543
                       -0.166
                                     Mn_2O_3 + 6MnO + MnO_2 + 2Ti_2O_3 + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
544
                       -0.321
                                     Mn_2O_3 + MnO + 0.2 MnO_2 + 0.2 Ti_3O_5 + TiO \longrightarrow 1.6 TiMn_2O_4
545
                       -0.142
                                     Mn_2O_3 + 11 MnO + MnO_2 + 2 Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4
546
                       -0.136
                                     Mn_2O_3 + 10MnO + MnO_2 + 2Ti_3O_5 + TiMnO_3 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
547
                       -0.321
                                     0.6667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5833 \,\mathrm{MnO} + 0.08333 \,\mathrm{MnO_2} + 0.75 \,\mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
548
                       -0.297
                                     Mn_2O_3 + 2MnO + MnO_2 + 2TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 3TiMn_2O_4
549
                                     0.6818 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6364 \,\mathrm{MnO} + 0.2273 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.04545 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.4091 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                       -0.268
550
                       -0.142
                                     2 \operatorname{Mn_2O_3} + 8 \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO_2} \longrightarrow 6 \operatorname{TiMn_2O_4}
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                             Reaction
551
                            -0.135
                                             2 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 7 \text{ MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{Ti}_3\text{MnO}_3 \longrightarrow 6 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
552
                            -0.206
                                            2 \operatorname{Mn_2O_3} + 4 \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} \longrightarrow 4 \operatorname{TiMn_2O_4}
553
                            -0.213
                                             0.5333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6 \,\mathrm{MnO} + 0.1333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.4 \,\mathrm{TiO} + 0.3333 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
554
                            -0.108
                                             Mn_2O_3 + 5MnO + Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 4TiMn_2O_4
555
                                             2 \operatorname{Mn_2O_3} + 6 \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} \longrightarrow 5 \operatorname{TiMn_2O_4}
                            -0.177
556
                            -0.211
                                             0.5128 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5897 \,\mathrm{MnO} + 0.05128 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.4615 \,\mathrm{TiO} + 0.3846 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
557
                            -0.098
                                             Mn_2O_3 + 7MnO + Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
558
                            -0.154
                                             Mn_2O_3 + 3MnO + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 3TiMn_2O_4
559
                            -0.163
                                             Mn_3O_4 + 6MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
560
                            -0.213
                                             0.561 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2439 \,\mathrm{MnO} + 0.07317 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3659 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2683 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                             Mn_3O_4 + 6MnO + MnO_2 + 2Ti_2O_3 + TiO_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
561
                            -0.161
562
                            -0.153
                                             Mn_3O_4 + 5MnO + MnO_2 + 2Ti_2O_3 + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
563
                            -0.340
                                             Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 0.25 Ti_3O_5 + 1.75 TiO \longrightarrow 2.5 TiMn_2O_4
564
                            -0.133
                                             Mn_3O_4 + 10MnO + MnO_2 + 2Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
565
                            -0.126
                                             Mn_3O_4 + 9MnO + MnO_2 + 2Ti_3O_5 + TiMnO_3 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
566
                            -0.232
                                             0.5652 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2609 \,\mathrm{MnO} + 0.04348 \,\mathrm{MnO_2} + 0.6087 \,\mathrm{TiO} + 0.3913 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
567
                            -0.172
                                             0.4118 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1765 \,\mathrm{MnO} + 0.05882 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4706 \,\mathrm{TiO} + 0.5294 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
568
                            -0.189
                                             0.5676 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2973 \,\mathrm{MnO} + 0.1892 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1216 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2568 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
569
                            -0.121
                                             2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 6 \text{ MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO}_2 \longrightarrow 6 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
570
                            -0.113
                                             2 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 5 \text{ MnO} + \text{Ti}_2 \text{O}_3 + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + \text{Ti} \text{MnO}_3 \longrightarrow 6 \text{Ti} \text{Mn}_2 \text{O}_4
571
                            -0.190
                                            0.5833 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{TiO} + 0.08333 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
572
                            -0.163
                                             0.5 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.25 \text{ MnO} + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
573
                            -0.092
                                            Mn_3O_4 + 4MnO + Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 4TiMn_2O_4
574
                            -0.221
                                             5 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 4 \text{TiO} + \text{Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow 8 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
575
                                            0.4918 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3115 \,\mathrm{MnO} + 0.1475 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.3443 \,\mathrm{TiO} + 0.2131 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                            -0.172
576
                            -0.085
                                             Mn_3O_4 + 6MnO + Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
577
                            -0.163
                                             0.45 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.25 \text{ MnO} + 0.45 \text{ TiO} + 0.15 \text{ TiO}_2 + 0.4 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
578
                            -0.258
                                            7 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Mn}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 6 \text{Ti}_2 \longrightarrow 11 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
579
                            -0.273
                                             5 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_2O_3} + 5 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} \longrightarrow 8 \operatorname{TiMn_2O_4}
580
                            -0.258
                                             4 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Mn}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + 4 \text{Ti}_2\text{O} + \text{Ti}_2\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 7 \text{Ti}_2\text{Mn}_2\text{O}_4
581
                            -0.266
                                             7 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_3O_5} + 7 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} \longrightarrow 11 \operatorname{TiMn_2O_4}
582
                            -0.254
                                             6 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 6 \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 10 \text{TiMn}_2\text{O}_4
583
                            -0.270
                                             4 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Mn}_2 + 5 \text{ TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMn}_3 \longrightarrow 7 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
584
                            -0.229
                                             8 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + 6 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} \longrightarrow 12 \operatorname{TiMn_2O_4}
585
                            -0.215
                                             7 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 5 \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 11 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
586
                            -0.214
                                             5 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + 4 \text{Ti}\text{O} + \text{Ti}\text{O}_2 + \text{Ti}\text{Mn}\text{O}_3 \longrightarrow 8 \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4
587
                            -0.223
                                            7 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 6 \text{Ti}_0 + \text{Ti}_{02} + \text{Ti}_{03} \longrightarrow 11 \text{ Ti}_{02}
588
                            -0.327
                                             1.308 \,\mathrm{MnO} + 0.6923 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2308 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.03846 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.4231 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
589
                            -0.169
                                             10 \text{ MnO} + 2 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO}_2 \longrightarrow 6 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
590
                            -0.161
                                             9 \text{ MnO} + 2 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{Ti}_3\text{MnO}_3 \longrightarrow 6 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
591
                            -0.246
                                             6 \text{ MnO} + 2 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + \text{TiO}_2 \longrightarrow 4 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
592
                            -0.235
                                             5 \text{ MnO} + 2 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 4 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
593
                            -0.128
                                             6 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 4 \text{TiMn}_2\text{O}_4
594
                            -0.209
                                             8 \text{ MnO} + 2 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiO}_2 \longrightarrow 5 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
595
                            -0.200
                                             7 \text{ MnO} + 2 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
596
                            -0.114
                                             8 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 5 \text{TiMn}_2\text{O}_4
597
                            -0.181
                                             4 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 3 \text{TiMn}_2 O_4
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                  Reaction
598
                     -0.156
                                  Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 10 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 2 Ti_3O_5 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4
599
                     -0.351
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 0.5 Ti_2O_3 + 2.5 TiO \longrightarrow 3.5 TiMn_2O_4
600
                     -0.168
                                  Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 8MnO + MnO_2 + 3Ti_2O_3 + TiO_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
601
                     -0.162
                                  Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7MnO + MnO_2 + 3Ti_2O_3 + TiMnO_3 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
602
                     -0.358
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 0.25 Ti_3O_5 + 2.75 TiO \longrightarrow 3.5 TiMn_2O_4
603
                     -0.136
                                  Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 14MnO + MnO_2 + 3Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 10TiMn_2O_4
604
                     -0.132
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 13 MnO + MnO_2 + 3 Ti_3O_5 + TiMnO_3 \longrightarrow 10 TiMn_2O_4
605
                     -0.364
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 3 TiO + 0.5 TiO_2 \longrightarrow 3.5 TiMn_2O_4
606
                     -0.307
                                  Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 3 TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 4 TiMn_2O_4
607
                     -0.215
                                 0.1587 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.4603 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.3016 \, \text{Mn} \text{O} + 0.2063 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.0873 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.3254 \, \text{Ti} \text{O} \longrightarrow \text{Ti} \text{Mn}_2 \text{O}_4
608
                     -0.131
                                  Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
609
                     -0.124
                                  Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 6MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiMnO_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
                     -0.222
610
                                 0.2 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.45 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.25 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.3167 \text{ TiO} + 0.01667 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                     -0.192
611
                                  0.1463 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.4146 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2683 \text{ MnO} + 0.2439 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.3171 \text{ TiO} + 0.1951 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
612
                     -0.123
                                  Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 6MnO + 2Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
613
                     -0.164
                                  Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 5MnO + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
614
                     -0.193
                                  0.1089 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.4257 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.3168 \, \text{MnO} + 0.1386 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.396 \, \text{TiO} + 0.1881 \, \text{TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
615
                     -0.107
                                  Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 10 MnO + 2 Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4
616
                     -0.186
                                 0.125 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.375 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.125 \,\mathrm{TiO_2} + 0.375 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
617
                     -0.270
                                  Mn_2O_3 + 7Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 7TiO \longrightarrow 12TiMn_2O_4
618
                     -0.288
                                  Mn_2O_3 + 5Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + 6TiO + TiO_2 \longrightarrow 9TiMn_2O_4
619
                     -0.276
                                 Mn_2O_3 + 4Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + 5TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 8TiMn_2O_4
620
                     -0.277
                                  Mn_2O_3 + 7Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_3O_5 + 8TiO + TiO_2 \longrightarrow 12TiMn_2O_4
621
                     -0.268
                                  Mn_2O_3 + 6Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_3O_5 + 7TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 11TiMn_2O_4
622
                     -0.287
                                  Mn_2O_3 + 4Mn_3O_4 + MnO_2 + 6TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 8TiMn_2O_4
623
                     -0.242
                                 Mn_2O_3 + 8Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 7TiO + TiO_2 \longrightarrow 13TiMn_2O_4
624
                     -0.231
                                  Mn_2O_3 + 7Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 6TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 12TiMn_2O_4
625
                     -0.235
                                 Mn_2O_3 + 5Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + 5TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 9TiMn_2O_4
626
                     -0.238
                                 Mn_2O_3 + 7Mn_3O_4 + Ti_3O_5 + 7TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 12TiMn_2O_4
627
                     -0.274
                                  0.6667 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.641 \text{ MnO} + 0.02564 \text{ MnO}_2 + 0.2308 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.03846 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.4231 \text{ TiO} \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
628
                     -0.155
                                  Mn_2O_3 + 9MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
629
                     -0.148
                                  Mn_2O_3 + 8MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiMnO_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
630
                     -0.226
                                  Mn_2O_3 + 5MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + TiO + TiO_2 \longrightarrow 4TiMn_2O_4
631
                     -0.215
                                  Mn_2O_3 + 4MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 4TiMn_2O_4
632
                     -0.147
                                 Mn_2O_3 + 8MnO + MnO_2 + 2Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
633
                     -0.193
                                  Mn_2O_3 + 7MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
634
                     -0.184
                                  Mn_2O_3 + 6MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
635
                     -0.125
                                 Mn_2O_3 + 12MnO + MnO_2 + 2Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 8TiMn_2O_4
636
                     -0.236
                                 Mn_2O_3 + 4MnO + MnO_2 + 2TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 4TiMn_2O_4
637
                     -0.179
                                 3 \operatorname{Mn_2O_3} + 8 \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} \longrightarrow 7 \operatorname{TiMn_2O_4}
638
                     -0.173
                                 3 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 7 \text{ MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 7 \text{TiMn}_2\text{O}_4
639
                     -0.123
                                 2 \operatorname{Mn_2O_3} + 9 \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMnO_3} \longrightarrow 7 \operatorname{TiMn_2O_4}
640
                     -0.167
                                 2 \operatorname{Mn_2O_3} + 5 \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMnO_3} \longrightarrow 5 \operatorname{TiMn_2O_4}
641
                     -0.149
                                 2 \operatorname{Mn_2O_3} + 7 \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMnO_3} \longrightarrow 6 \operatorname{TiMn_2O_4}
642
                     -0.216
                                 Mn_3O_4 + 7MnO + 2MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO \longrightarrow 6TiMn_2O_4
643
                     -0.145
                                  Mn_3O_4 + 8MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
644
                     -0.137
                                 Mn_3O_4 + 7MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiMnO_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                    Reaction
                      -0.204
645
                                    0.5652 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2609 \text{ MnO} + 0.04348 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2754 \text{ TiO} + 0.05797 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
646
                      -0.183
                                    Mn_3O_4 + MnO + 0.3333 MnO_2 + 0.3333 Ti_2O_3 + TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 2.667 TiMn_2O_4
647
                      -0.136
                                    Mn_3O_4 + 7MnO + MnO_2 + 2Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
648
                      -0.180
                                    Mn_3O_4 + 6MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
649
                                   Mn_3O_4 + MnO + 0.2 MnO_2 + 0.2 Ti_3O_5 + TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 2.6 TiMn_2O_4
                      -0.174
650
                      -0.117
                                    Mn_3O_4 + 11 MnO + MnO_2 + 2 Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4
651
                      -0.220
                                    Mn_3O_4 + 3MnO + MnO_2 + 2TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 4TiMn_2O_4
652
                      -0.219
                                    7 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 5 \text{TiO} + \text{TiO}_2 \longrightarrow 11 \text{TiMn}_2\text{O}_4
653
                      -0.169
                                    0.5056 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.2921 \, \text{MnO} + 0.1685 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.06742 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.2697 \, \text{TiO} + 0.191 \, \text{TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
654
                      -0.105
                                   2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 7 \text{ MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{Ti}_2\text{O}_2 + \text{Ti}_3\text{MnO}_3 \longrightarrow 7 \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
655
                      -0.197
                                    4 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + \text{MnO} + \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 3 \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 7 \text{TiMn}_2 \text{O}_4
656
                      -0.211
                                    6 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + \text{MnO} + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 5 \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 10 \text{TiMn}_2 \text{O}_4
657
                      -0.255
                                   9 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2 \text{O}_3 + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 8 \text{TiO} + \text{TiO}_2 \longrightarrow 14 \text{TiMn}_2 \text{O}_4
658
                      -0.245
                                    8 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 7 \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 13 \text{TiMn}_2\text{O}_4
659
                      -0.253
                                   6 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + 6 \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 10 \text{TiMn}_2\text{O}_4
660
                      -0.251
                                    8 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_3O_5} + 8 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMnO_3} \longrightarrow 13 \operatorname{TiMn_2O_4}
661
                      -0.221
                                    9 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + 7 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMnO_3} \longrightarrow 14 \operatorname{TiMn_2O_4}
662
                      -0.213
                                    11 \text{ MnO} + 3 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiO}_2 \longrightarrow 7 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
663
                      -0.207
                                    10 \text{ MnO} + 3 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 7 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
664
                      -0.146
                                    11 \text{ MnO} + 2 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 7 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
665
                      -0.198
                                    7 \text{ MnO} + 2 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
666
                      -0.175
                                    9 \text{ MnO} + 2 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 6 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
667
                      -0.203
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 6MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO \longrightarrow 6TiMn_2O_4
668
                      -0.144
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 12MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 2Ti_3O_5 + TiO_2 \longrightarrow 9TiMn_2O_4
669
                      -0.139
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 11 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 2 Ti_3O_5 + TiMnO_3 \longrightarrow 9 TiMn_2O_4
670
                      -0.248
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 4MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 2TiO + TiO_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
671
                      -0.239
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 3MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 2TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
672
                      -0.148
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 9MnO + MnO_2 + 3Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 8TiMn_2O_4
673
                      -0.217
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 6MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 2TiO + TiO_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
674
                      -0.210
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 5MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 2TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
675
                      -0.124
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 15 MnO + MnO_2 + 3 Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 11 TiMn_2O_4
676
                      -0.256
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 3MnO + MnO_2 + 3TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
677
                      -0.234
                                    Mn_2O_3 + 7Mn_3O_4 + MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 6TiO + TiO_2 \longrightarrow 12TiMn_2O_4
678
                      -0.194
                                    0.131 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.4276 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2966 \text{ MnO} + 0.1862 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.04828 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3241 \text{ TiO} + 0.1586 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
679
                      -0.114
                                   Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 8MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
680
                      -0.154
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 4MnO + Ti_2O_3 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
681
                      -0.138
                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 6MnO + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
682
                      -0.264
                                    Mn_2O_3 + 9Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 9TiO + TiO_2 \longrightarrow 15TiMn_2O_4
683
                      -0.256
                                    Mn_2O_3 + 8Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 8TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 14TiMn_2O_4
684
                      -0.267
                                    Mn_2O_3 + 6Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + 7TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 11TiMn_2O_4
685
                      -0.262
                                    Mn_2O_3 + 8Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_3O_5 + 9TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 14TiMn_2O_4
686
                      -0.233
                                   Mn_2O_3 + 9Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 8TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 15TiMn_2O_4
687
                      -0.202
                                   Mn_2O_3 + 10MnO + 2MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
688
                      -0.196
                                    Mn_2O_3 + 9MnO + 2MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
689
                      -0.134
                                    Mn_2O_3 + 10MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
690
                      -0.182
                                    Mn_2O_3 + 6MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
691
                      -0.162
                                   Mn_2O_3 + 8MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                       Reaction
692
                        -0.158
                                       3 \operatorname{Mn_2O_3} + 9 \operatorname{MnO} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMnO_3} \longrightarrow 8 \operatorname{TiMn_2O_4}
693
                        -0.193
                                       Mn_3O_4 + 9MnO + 2MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
694
                        -0.186
                                       Mn_3O_4 + 8MnO + 2MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
695
                        -0.125
                                       Mn_3O_4 + 9MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
696
                        -0.170
                                       Mn_3O_4 + 5MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
697
                        -0.151
                                       Mn_3O_4 + 7MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
698
                        -0.212
                                       8 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + \text{MnO} + \text{Ti}_2 \text{O}_3 + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 6 \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 13 \text{TiMn}_2 \text{O}_4
699
                        -0.244
                                       10 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO_2} + \mathrm{Ti_2O_3} + \mathrm{Ti_3O_5} + 9 \,\mathrm{TiO} + \mathrm{TiO_2} + \mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow 16 \,\mathrm{TiMn_2O_4}
700
                        -0.188
                                       12 \text{ MnO} + 3 \text{ MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 \longrightarrow 8 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
701
                        -0.181
                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 8 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4
702
                        -0.175
                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiMnO_3 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
703
                        -0.131
                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 13 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 2 Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 10 TiMn_2O_4
704
                        -0.208
                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 5MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 2TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
705
                        -0.187
                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 2TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
706
                        -0.226
                                       Mn_2O_3 + 8Mn_3O_4 + MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 7TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 14TiMn_2O_4
707
                        -0.254
                                       Mn_2O_3 + 10Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 10TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 17TiMn_2O_4
708
                        -0.178
                                       Mn_2O_3 + 11MnO + 2MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 8TiMn_2O_4
709
                        -0.170
                                       Mn_3O_4 + 10 MnO + 2 MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4
                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 9 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4
710
                        -0.160
711
                        -0.263
                                       3 \text{ CoO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Co}_3 \text{O}_4
712
                        -0.247
                                       0.6667 \, \text{Cr}_3 \, \text{O}_4 + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2 \, \text{O}_3
713
                        -0.205
                                      0.5909 \, \text{Cr}_3 \, \text{O}_4 + 0.2273 \, \text{Cr} \, \text{O}_2 + 0.09091 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2 \, \text{O}_3
714
                        -0.097
                                      0.5 \operatorname{Cr}_2 \operatorname{O}_3 + 0.25 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr} \operatorname{O}_2
715
                        -0.303
                                      0.3333 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + 0.3333 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{CrO}_2
716
                        -0.225
                                      0.1887 \operatorname{Cr}_2 \operatorname{O}_3 + 0.2075 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + 0.3019 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr} \operatorname{O}_2
717
                        -0.379
                                      0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{CuO}
718
                        -0.163
                                       0.6667 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Fe}_2\text{O}_3
719
                        -0.581
                                       2 \text{ FeO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Fe}_2 \text{O}_3
720
                        -0.199
                                       0.6098 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1707 \text{ FeO} + 0.1951 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Fe}_2\text{O}_3
721
                                       3 \text{ FeO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Fe}_3 \text{O}_4
                        -0.448
722
                        -0.309
                                       Fe_2O_3 + 7 FeO + O_2 \longrightarrow 3 Fe_3O_4
723
                        -0.070
                                      0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_2O_3}
724
                        -0.391
                                       2 \text{ MnO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Mn}_2 \text{O}_3
725
                        -0.097
                                       0.6098 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1707 \,\mathrm{MnO} + 0.1951 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_2O_3}
726
                        -0.043
                                      0.5909 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2273 \,\mathrm{MnO_2} + 0.09091 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_2O_3}
727
                        -0.298
                                       5 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 3 \text{ Mn}_2\text{O}_3
728
                        -0.070
                                       0.54 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.16 \,\mathrm{MnO} + 0.22 \,\mathrm{MnO_2} + 0.12 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_2O_3}
729
                        -0.344
                                       3 \text{ MnO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Mn}_3 \text{O}_4
730
                        -0.251
                                       Mn_2O_3 + 7MnO + O_2 \longrightarrow 3Mn_3O_4
731
                        -0.277
                                       8 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 3 \text{ Mn}_3 \text{O}_4
732
                        -0.224
                                       Mn_2O_3 + 9MnO + MnO_2 + O_2 \longrightarrow 4Mn_3O_4
733
                        -0.140
                                       0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{MnO_2}
734
                        -0.198
                                       0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{MnO_2}
735
                        -0.466
                                       MnO + 0.5 O_2 \longrightarrow MnO_2
736
                        -0.176
                                       0.1887 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2075 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3019 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{MnO_2}
737
                                       0.4286 \,\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3 + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + 0.2857 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{MnO}_2
                        -0.186
738
                        -0.211
                                      0.3171 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04878 \,\mathrm{MnO} + 0.3415 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{MnO_2}
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                            Reaction
739
                                            0.1864 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2034 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.01695 \,\mathrm{MnO} + 0.3051 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{MnO_2}
                            -0.181
740
                            -0.998
                                           2 \text{ TiO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2 \text{O}_3
741
                            -0.532 Ti<sub>3</sub>O<sub>5</sub> + 5 TiO + O<sub>2</sub> \longrightarrow 4 Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub>
742
                            -0.705 5 TiO + TiO<sub>2</sub> + O<sub>2</sub> \longrightarrow 3 Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub>
743
                            -0.449 Ti<sub>3</sub>O<sub>5</sub> + 6TiO + TiO<sub>2</sub> + O<sub>2</sub> \longrightarrow 5Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub>
744
                            -0.231
                                           1.5 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{O}_5
745
                           -1.166 3 TiO + O<sub>2</sub> \longrightarrow Ti<sub>3</sub>O<sub>5</sub>
746
                            -0.394
                                           1.238 \, \text{Ti}_2\text{O}_3 + 0.5238 \, \text{TiO} + 0.381 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{O}_5
747
                            -0.084
                                           1.19 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.619 \text{ Ti}_{O_2} + 0.09524 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{O}_5
748
                           -0.311 1.444 TiO + 1.556 TiO<sub>2</sub> + 0.2222 O<sub>2</sub> \longrightarrow Ti<sub>3</sub>O<sub>5</sub>
749
                            -0.237 Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.4444 TiO + 0.5556 TiO<sub>2</sub> + 0.2222 O<sub>2</sub> \longrightarrow Ti<sub>3</sub>O<sub>5</sub>
750
                            -0.634 0.5 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{O}_2
751
                            -0.429 \quad 0.3333 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{O}_2
752
                           -1.466 TiO + 0.5 O<sub>2</sub> \longrightarrow TiO<sub>2</sub>
753
                            -0.483 0.1321 Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.2453 Ti<sub>3</sub>O<sub>5</sub> + 0.1887 O<sub>2</sub> \longrightarrow TiO<sub>2</sub>
754
                            -0.753 0.4286 Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.1429 TiO + 0.2857 O<sub>2</sub> \longrightarrow TiO<sub>2</sub>
755
                                           0.3182 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04545 \text{ TiO} + 0.1818 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiO}_2
                            -0.476
756
                            -0.499
                                           0.129 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2419 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.01613 \text{ TiO} + 0.1935 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiO}_2
757
                            -0.736 	 2 \text{ VO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2 \text{O}_3
758
                            -0.451 \quad V_2O_5 + 8 VO + O_2 \longrightarrow 5 V_2O_3
759
                            -0.406 \quad V_3O_5 + 5 VO + O_2 \longrightarrow 4 V_2O_3
760
                            -0.540 5 VO + VO<sub>2</sub> + O<sub>2</sub> \longrightarrow 3 V<sub>2</sub>O<sub>3</sub>
761
                            -0.344 \quad V_2O_5 + V_3O_5 + 9 \text{ VO} + O_2 \longrightarrow 7 V_2O_3
762
                            -0.401 V_2O_5 + 9 VO + VO_2 + O_2 \longrightarrow 6 V_2O_3
763
                            -0.354 \quad V_3O_5 + 6 VO + VO_2 + O_2 \longrightarrow 5 V_2O_3
                            -0.319 \quad V_2O_5 + V_3O_5 + 10 \text{ VO} + VO_2 + O_2 \longrightarrow 8 V_2O_3
764
765
                            -0.491 V_2O_3 + O_2 \longrightarrow V_2O_5
766
                            -0.388 \quad 0.6667 \, \text{V}_3 \, \text{O}_5 + 0.8333 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{V}_2 \, \text{O}_5
767
                           -1.017 	 2 \text{ VO} + 1.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2 \text{O}_5
768
                            -0.174 	 2 \text{ VO}_2 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2 \text{O}_5
769
                            -0.409 0.2075 V_2O_3 + 0.5283 V_3O_5 + 0.8679 O_2 \longrightarrow V_2O_5
770
                            -0.541 0.9048 V<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.1905 VO + 1.048 O<sub>2</sub> \longrightarrow V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>
771
                            -0.401 0.7143 V<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.5714 VO<sub>2</sub> + 0.8571 O<sub>2</sub> \longrightarrow V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>
772
                            -0.545 V_3O_5 + VO + 2O_2 \longrightarrow 2V_2O_5
773
                            -0.354 0.561 V<sub>3</sub>O<sub>5</sub> + 0.3171 VO<sub>2</sub> + 0.7805 O<sub>2</sub> \longrightarrow V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>
774
                           -0.502 0.7778 VO + 1.222 VO<sub>2</sub> + 0.8889 O<sub>2</sub> \longrightarrow V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>
775
                            -0.527
                                           V_2O_3 + V_3O_5 + VO + 3O_2 \longrightarrow 3V_2O_5
776
                            -0.375
                                           0.1695 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.4576 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.2881 \text{ VO}_2 + 0.8136 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_5
777
                           -0.432 0.6667 V_2O_3 + 0.1111 VO + 0.5556 VO_2 + 0.8889 O_2 \longrightarrow V_2O_5
778
                            -0.485
                                           V_3O_5 + VO + VO_2 + 2.25O_2 \longrightarrow 2.5V_2O_5
779
                                           V_2O_3 + V_3O_5 + VO + VO_2 + 3.25 O_2 \longrightarrow 3.5 V_2O_5
                            -0.487
780
                            -0.136 \quad 1.5 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
781
                            -0.826 \quad 3 \text{ VO} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
782
                            -0.082 \quad 11 \text{ V}_2\text{O}_3 + \text{V}_2\text{O}_5 + \text{O}_2 \longrightarrow 8 \text{ V}_3\text{O}_5
783
                            -0.256 1.238 V<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.5238 VO + 0.381 O<sub>2</sub> \longrightarrow V<sub>3</sub>O<sub>5</sub>
784
                                           1.19 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.619 \text{ VO}_2 + 0.09524 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
                            -0.050
785
                            -0.470 \quad V_2O_5 + 5.5 \text{ VO} + O_2 \longrightarrow 2.5 V_3O_5
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                          Reaction
786
                          -0.252
                                          1.444 \text{ VO} + 1.556 \text{ VO}_2 + 0.2222 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_3 \text{O}_5
787
                          -0.376 V_2O_3 + V_2O_5 + 5 VO + O_2 \longrightarrow 3 V_3O_5
788
                          -0.073
                                         12 \text{ V}_2 \text{ O}_3 + \text{ V}_2 \text{ O}_5 + \text{ V}_2 + \text{ O}_2 \longrightarrow 9 \text{ V}_3 \text{ O}_5
789
                          -0.161 V_2O_3 + 0.4444 VO + 0.5556 VO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow V_3O_5
790
                          -0.406 \quad V_2O_5 + 6 VO + VO_2 + O_2 \longrightarrow 3 V_3O_5
791
                          -0.335
                                         V_2O_3 + V_2O_5 + 5.5 VO + VO_2 + O_2 \longrightarrow 3.5 V_3O_5
792
                          -0.370 \quad 0.5 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
793
                          -0.249
                                         0.3333 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.1667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
794
                          -0.983
                                         VO + 0.5 O_2 \longrightarrow VO_2
795
                          -0.226 \quad 3 \text{ V}_2\text{O}_3 + \text{V}_2\text{O}_5 + \text{O}_2 \longrightarrow 8 \text{ VO}_2
796
                          -0.281
                                         0.1321 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.2453 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.1887 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
797
                          -0.457
                                         0.4286 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ VO} + 0.2857 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
798
                          -0.096
                                         0.1688 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.2208 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.02597 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
799
                          -0.509
                                         V_2O_5 + 3VO + O_2 \longrightarrow 5VO_2
800
                          -0.282 0.3182 V<sub>3</sub>O<sub>5</sub> + 0.04545 VO + 0.1818 O<sub>2</sub> \longrightarrow VO<sub>2</sub>
801
                          -0.133 0.1 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.1545 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.1636 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.05455 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
802
                          -0.152 0.2097 V<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.2419 V<sub>2</sub>O<sub>5</sub> + 0.09677 VO + 0.03226 O<sub>2</sub> \longrightarrow VO<sub>2</sub>
803
                          -0.292
                                         0.129 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.2419 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.01613 \text{ VO} + 0.1935 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
804
                          -0.134
                                        0.1702 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.2021 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.05319 \text{ VO} + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
805
                          -0.153
                                         0.09375 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.1562 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.1562 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.03125 \text{ VO} + 0.0625 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
806
                          -0.257
                                         CoO + 0.6667 Cr_3O_4 + 0.1667 O_2 \longrightarrow Cr_2CoO_4
807
                          -0.178
                                         0.3008 \, \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.09756 \, \text{CoO} + 0.6667 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.01626 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CoO}_4
808
                          -0.201
                                         CoO + 0.3208 Cr_2O_3 + 0.4528 Cr_3O_4 + 0.1132 O_2 \longrightarrow Cr_2CoO_4
809
                          -0.228
                                         CoO + 0.5909 Cr_3O_4 + 0.2273 CrO_2 + 0.09091 O_2 \longrightarrow Cr_2CoO_4
810
                          -0.213
                                         Co_3O_4 + 7CoO + Cr_2O_3 + 6Cr_3O_4 + O_2 \longrightarrow 10Cr_2CoO_4
811
                          -0.222
                                         Co_3O_4 + 8CoO + 7Cr_3O_4 + CrO_2 + O_2 \longrightarrow 11Cr_2CoO_4
812
                          -0.185
                                         CoO + 0.2903 Cr_2O_3 + 0.4194 Cr_3O_4 + 0.1613 CrO_2 + 0.06452 O_2 \longrightarrow Cr_2CoO_4
813
                          -0.210
                                         Co_3O_4 + 9CoO + Cr_2O_3 + 7Cr_3O_4 + CrO_2 + O_2 \longrightarrow 12Cr_2CoO_4
814
                          -0.228
                                         0.6667 \operatorname{Cr}_3 O_4 + \operatorname{FeO} + 0.1667 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{FeO}_4
815
                          -0.171
                                         0.3208 \,\mathrm{Cr}_2\mathrm{O}_3 + 0.4528 \,\mathrm{Cr}_3\mathrm{O}_4 + \mathrm{FeO} + 0.1132 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Cr}_2\mathrm{FeO}_4
816
                          -0.198
                                         0.5909 \, \text{Cr}_3 \, \text{O}_4 + 0.2273 \, \text{Cr} \, \text{O}_2 + \text{FeO} + 0.09091 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2 \, \text{FeO}_4
817
                          -0.167
                                         Cr_3O_4 + 0.25 Fe_2O_3 + FeO + 0.125 O_2 \longrightarrow 1.5 Cr_2 FeO_4
818
                          -0.093
                                         0.6667 \, \text{Cr}_3 \, \text{O}_4 + 0.3008 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.09756 \, \text{FeO} + 0.01626 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2 \, \text{FeO}_4
819
                          -0.156
                                         0.2903 \, \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.4194 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.1613 \, \text{Cr}_{\text{O}_2} + \text{FeO} + 0.06452 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
820
                          -0.169
                                         Cr_2O_3 + 6Cr_3O_4 + Fe_2O_3 + 8FeO + O_2 \longrightarrow 10Cr_2FeO_4
821
                          -0.165
                                         Cr_2O_3 + 6Cr_3O_4 + Fe_3O_4 + 7FeO + O_2 \longrightarrow 10Cr_2FeO_4
822
                          -0.178
                                         7 \operatorname{Cr}_3 O_4 + \operatorname{Cr} O_2 + \operatorname{Fe}_2 O_3 + 9 \operatorname{Fe} O + O_2 \longrightarrow 11 \operatorname{Cr}_2 \operatorname{Fe} O_4
823
                          -0.175
                                         7 \operatorname{Cr}_3 O_4 + \operatorname{Cr} O_7 + \operatorname{Fe}_3 O_4 + 8 \operatorname{Fe} O_7 + O_7 \longrightarrow 11 \operatorname{Cr}_7 \operatorname{Fe} O_4
824
                          -0.156
                                         8 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + \operatorname{Fe}_2 \operatorname{O}_3 + \operatorname{Fe}_3 \operatorname{O}_4 + 7 \operatorname{FeO} + \operatorname{O}_2 \longrightarrow 12 \operatorname{Cr}_2 \operatorname{FeO}_4
825
                                         Cr_2O_3 + 7Cr_3O_4 + CrO_2 + Fe_2O_3 + 10FeO + O_2 \longrightarrow 12Cr_2FeO_4
                          -0.168
826
                                         Cr_2O_3 + 7Cr_3O_4 + CrO_2 + Fe_3O_4 + 9FeO + O_2 \longrightarrow 12Cr_2FeO_4
                          -0.165
827
                          -0.148
                                         Cr_2O_3 + 8Cr_3O_4 + Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + 8FeO + O_2 \longrightarrow 13Cr_2FeO_4
828
                          -0.157
                                         9 \text{ Cr}_3 \text{O}_4 + \text{Cr}_2 + \text{Fe}_2 \text{O}_3 + \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 9 \text{ Fe} \text{O} + \text{O}_2 \longrightarrow 14 \text{ Cr}_2 \text{Fe} \text{O}_4
829
                                         Cr_2O_3 + 9Cr_3O_4 + CrO_2 + Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + 10FeO + O_2 \longrightarrow 15Cr_2FeO_4
                          -0.150
830
                          -0.171
                                         0.6667 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + \text{NiO} + 0.1667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{NiO}_4
831
                                         0.3208 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.4528 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + \text{NiO} + 0.1132 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{NiO}_4
                          -0.114
832
                          -0.141
                                         0.5909 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.2273 \, \text{CrO}_2 + \text{NiO} + 0.09091 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{NiO}_4
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                            Reaction
833
                           -0.099
                                            0.2903 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.4194 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.1613 \text{ Cr}\text{O}_2 + \text{NiO} + 0.06452 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{NiO}_4
834
                           -0.103
                                           Cr_2O_3 + 0.5 Cu_2O + 0.25 O_2 \longrightarrow Cr_2CuO_4
835
                           -0.279
                                           0.6667 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.4167 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Cu}\text{O}_4
836
                           -0.171
                                           0.6667 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + \text{CuO} + 0.1667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4
837
                           -0.217
                                          0.3491 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.434 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.3585 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4
838
                           -0.114
                                           0.3208 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.4528 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + \text{CuO} + 0.1132 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4
839
                           -0.085
                                          0.7857 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.4286 \text{ Cr}\text{O}_2 + 0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Cu}\text{O}_4
840
                           -0.077
                                           Cr_2O_3 + 0.381 Cu_2O + 0.2381 CuO + 0.1905 O_2 \longrightarrow Cr_2CuO_4
841
                           -0.241
                                           0.5682 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.2955 \, \text{Cr}_{\text{O}_2} + 0.5 \, \text{Cu}_2\text{O} + 0.3182 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Cu}_{\text{O}_4}
842
                           -0.141
                                           0.5909 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.2273 \, \text{Cr}\text{O}_2 + \text{CuO} + 0.09091 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4
843
                           -0.250
                                           0.6667 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.3651 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2698 \text{ CuO} + 0.3492 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4
844
                           -0.196
                                           0.3065 \operatorname{Cr}_2 \operatorname{O}_3 + 0.3871 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + 0.2258 \operatorname{Cr} \operatorname{O}_2 + 0.5 \operatorname{Cu}_2 \operatorname{O} + 0.2903 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{Cu} \operatorname{O}_4
845
                           -0.099
                                           0.2903 \, \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.4194 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.1613 \, \text{Cr}\text{O}_2 + \text{CuO} + 0.06452 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4
846
                           -0.191
                                           0.3417 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.4388 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.3705 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.259 \text{ CuO} + 0.295 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4
847
                                          0.7909 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.4182 \text{ Cr}\text{O}_2 + 0.3909 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2182 \text{ Cu}\text{O} + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Cu}\text{O}_4
                           -0.062
848
                                          0.5739 \, \text{Cr}_3 \text{O}_4 + 0.2783 \, \text{Cr} \text{O}_2 + 0.3739 \, \text{Cu}_2 \text{O} + 0.2522 \, \text{CuO} + 0.2609 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2 \text{CuO}_4
                           -0.216
                                           0.3025 \, Cr_2O_3 + 0.3951 \, Cr_3O_4 + 0.2099 \, CrO_2 + 0.3765 \, Cu_2O + 0.2469 \, CuO + 0.2346 \, O_2 \longrightarrow Cr_2CuO_4 \, O_2
849
                           -0.172
850
                           -0.145
                                           0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.3333 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
851
                           -0.406
                                           0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + \text{FeO} + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
852
                           -0.106
                                           0.3968 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2063 \text{ CuO} + 0.3333 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.03175 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
853
                           -0.361
                                           0.381 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2381 \text{ CuO} + \text{FeO} + 0.1905 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
854
                           -0.112 0.5 Cu<sub>2</sub>O + 0.1604 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.2264 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> + 0.0566 O<sub>2</sub> \longrightarrow FeCuO<sub>2</sub>
855
                           -0.112 0.5 Cu<sub>2</sub>O + 0.4048 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 0.1905 FeO + 0.04762 O<sub>2</sub> \longrightarrow FeCuO<sub>2</sub>
856
                           -0.167
                                           0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.3049 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.08537 \text{ FeO} + 0.09756 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
857
                           -0.075
                                          0.3993 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2014 \text{ CuO} + 0.1547 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2302 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.007194 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Fe}\text{CuO}_2
858
                           -0.275
                                           3 \text{Cu}_2\text{O} + \text{CuO} + \text{Fe}_2\text{O}_3 + 5 \text{FeO} + \text{O}_2 \longrightarrow 7 \text{FeCuO}_2
859
                           -0.130
                                           0.3953 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2093 \text{ CuO} + 0.3023 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.09302 \text{ FeO} + 0.04651 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
860
                           -0.129
                                           0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.1525 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2119 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.05932 \text{ Fe}\text{O} + 0.0678 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Fe}\text{Cu}\text{O}_2
861
                           -0.095
                                           0.3981 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2039 \text{ CuO} + 0.1456 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2136 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.06796 \text{ FeO} + 0.01942 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
862
                           -0.104
                                           0.3333 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 2.5 \text{ Li}_2\text{O} + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4
863
                           -0.209
                                          FeO + 2.5 \text{ Li}_2O + 0.25 O_2 \longrightarrow \text{Li}_5FeO_4
864
                           -0.091
                                          0.1604 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.2264 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 2.5 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.0566 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \, \text{Fe}_{04}
865
                           -0.091
                                           0.4048 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.1905 \, \text{Fe} \, \text{O} + 2.5 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.04762 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \, \text{Fe} \, \text{O}_4
866
                           -0.113
                                          0.3049 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.08537 \, \text{FeO} + 2.5 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.09756 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \, \text{FeO}_4
867
                           -0.070
                                          Fe_3O_4 + 19.5 Li_2O + LiFe_5O_8 + 0.25 O_2 \longrightarrow 8 Li_5FeO_4
868
                           -0.085
                                          Fe_3O_4 + 9.5 Li_2O + LiFeO_2 + 0.25 O_2 \longrightarrow 4 Li_5FeO_4
869
                           -0.121
                                          Fe_3O_4 + LiFeO_2 + 0.25O_2 \longrightarrow 0.7917 LiFe_5O_8 + 0.04167 Li_5FeO_4
870
                                          FeO + 14.5 \text{ Li}_2O + \text{Li}_5Fe_5O_8 + 0.25 O_2 \longrightarrow 6 \text{Li}_5FeO_4
                           -0.075
871
                           -0.117
                                          FeO + 4.5 Li_2O + LiFeO_2 + 0.25 O_2 \longrightarrow 2 Li_5FeO_4
872
                           -0.237 FeO + LiFeO<sub>2</sub> + 0.25 O<sub>2</sub> \longrightarrow 0.375 LiFe<sub>5</sub>O<sub>8</sub> + 0.125 Li<sub>5</sub>FeO<sub>4</sub>
873
                           -0.098
                                           0.1525 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2119 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.05932 \text{ Fe}\text{O} + 2.5 \text{ Li}_2\text{O} + 0.0678 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4
874
                           -0.068
                                           Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + 24.5 \text{ Li}_2O + \text{Li}_5Fe_5O_8 + 0.25 O_2 \longrightarrow 10 \text{ Li}_5Fe_6O_4
875
                           -0.078
                                           Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + 14.5 Li_2O + LiFeO_2 + 0.25 O_2 \longrightarrow 6 Li_5FeO_4
876
                                           Fe_2O_3 + FeO + 19.5 Li_2O + LiFe_5O_8 + 0.25 O_2 \longrightarrow 8 Li_5FeO_4
                           -0.073
877
                           -0.090
                                           Fe_2O_3 + FeO + 9.5 Li_2O + LiFeO_2 + 0.25 O_2 \longrightarrow 4 Li_5FeO_4
878
                                           Fe_2O_3 + FeO + LiFeO_2 + 0.25O_2 \longrightarrow 0.7917 LiFe_5O_8 + 0.04167 Li_5FeO_4
                           -0.140
879
                           -0.085
                                          Fe_3O_4 + FeO + 22 Li_2O + LiFe_5O_8 + 0.5 O_2 \longrightarrow 9 Li_5FeO_4
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                                                       Reaction
880
                                                                                       Fe_3O_4 + FeO + 12 Li_2O + LiFeO_2 + 0.5 O_2 \longrightarrow 5 Li_5FeO_4
                                                       -0.109
881
                                                       -0.065
                                                                                      Fe_3O_4 + 21.5 Li_2O + LiFe_5O_8 + LiFeO_2 + 0.25 O_2 \longrightarrow 9 Li_5FeO_4
882
                                                       -0.068
                                                                                      FeO + 16.5 Li_2O + LiFe_5O_8 + LiFeO_2 + 0.25 O_2 \longrightarrow 7 Li_5FeO_4
883
                                                       -0.081
                                                                                      Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + FeO + 27 Li_2O + LiFe_5O_8 + 0.5 O_2 \longrightarrow 11 Li_5FeO_4
884
                                                                                      Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + FeO + 17 Li_2O + LiFeO_2 + 0.5 O_2 \longrightarrow 7 Li_5FeO_4
                                                       -0.096
885
                                                       -0.065
                                                                                      Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + 26.5 \text{ Li}_2O + \text{Li}_2Fe_2O_3 + \text{Li}_2Fe_2O_2 + 0.25 O_2 \longrightarrow 11 \text{ Li}_2Fe_2O_3 - 0.25 O_2 \longrightarrow 11 \text{ Li}_2Fe_2O_3 - 0.25 O_2 \longrightarrow 11 \text{ Li}_
886
                                                                                      Fe_2O_3 + FeO + 21.5 Li_2O + LiFe_5O_8 + LiFeO_2 + 0.25 O_2 \longrightarrow 9 Li_5FeO_4
                                                       -0.067
887
                                                       -0.079
                                                                                      Fe_3O_4 + FeO + 24 Li_2O + LiFe_5O_8 + LiFeO_2 + 0.5 O_2 \longrightarrow 10 Li_5FeO_4
888
                                                       -0.077
                                                                                      Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + FeO + 29 Li_2O + LiFe_5O_8 + LiFeO_2 + 0.5 O_2 \longrightarrow 12 Li_5FeO_4
889
                                                       -0.199
                                                                                       1.667 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} + 0.4167 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}_5\text{O}_8
890
                                                       -0.184
                                                                                       1.6 \text{ Fe}_3 \text{O}_4 + 0.2 \text{ Li}_5 \text{Fe} \text{O}_4 + 0.4 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{Fe}_5 \text{O}_8
891
                                                       -0.142
                                                                                     1.333 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + \text{LiFeO}_2 + 0.3333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
892
                                                       -0.572
                                                                                      5 \text{ FeO} + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} + 1.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
893
                                                                                      4.8 \text{ FeO} + 0.2 \text{Li}_5 \text{FeO}_4 + 1.2 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{Fe}_5 \text{O}_8
                                                       -0.542
894
                                                       -0.440
                                                                                     4 \text{ FeO} + \text{LiFeO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
895
                                                                                      0.8019 \, \text{Fe}_2\text{O}_3 + 1.132 \, \text{Fe}_3\text{O}_4 + 0.5 \, \text{Li}_2\text{O} + 0.283 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}_5\text{O}_8
                                                       -0.152
896
                                                       -0.139
                                                                                       0.7698 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 1.087 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.2 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.2717 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8
897
                                                       -0.105
                                                                                      0.6415 \, \text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.9057 \, \text{Fe}_3\text{O}_4 + \text{Li} \text{Fe}\text{O}_2 + 0.2264 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li} \text{Fe}_5\text{O}_8
898
                                                       -0.152
                                                                                      2.024 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.9524 \text{ FeO} + 0.5 \text{Li}_2\text{O} + 0.2381 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
899
                                                       -0.139
                                                                                       1.943 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.9143 \, \text{Fe} \, \text{O} + 0.2 \, \text{Li}_5 \, \text{Fe} \, \text{O}_4 + 0.2286 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \, \text{Fe}_5 \, \text{O}_8
900
                                                       -0.104
                                                                                       1.619 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.7619 \text{ Fe}\text{O} + \text{Li}\text{Fe}\text{O}_2 + 0.1905 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}\text{Fe}_5\text{O}_8
901
                                                       -0.231
                                                                                       1.524 \text{ Fe}_3 \text{O}_4 + 0.4268 \text{ FeO} + 0.5 \text{Li}_2 \text{O} + 0.4878 \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5 \text{O}_8
902
                                                       -0.214
                                                                                       1.463 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.4098 \text{ FeO} + 0.2 \text{Li}_5\text{FeO}_4 + 0.4683 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8
903
                                                       -0.167
                                                                                      1.22 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.3415 \text{ FeO} + \text{LiFeO}_2 + 0.3902 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
904
                                                       -0.188
                                                                                      11.33 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + \text{Li}_2\text{O} + \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 2.833 \text{ O}_2 \longrightarrow 7 \text{ Li}\text{Fe}_5\text{O}_8
905
                                                       -0.164
                                                                                       1.462 \text{ Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1929 \text{ Li}_2 \text{O} + 0.6142 \text{ Li} \text{Fe} \text{O}_2 + 0.3655 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li} \text{Fe}_5 \text{O}_8
906
                                                       -0.165
                                                                                      1.482 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1116 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.4422 \text{ Li}_6\text{Fe}\text{O}_2 + 0.3705 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_6\text{Fe}\text{O}_8
907
                                                       -0.551
                                                                                      34 \text{ FeO} + \text{Li}_2\text{O} + \text{Li}_5\text{FeO}_4 + 8.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 7 \text{ LiFe}_5\text{O}_8
908
                                                       -0.528
                                                                                      14 \text{ FeO} + \text{Li}_2\text{O} + \text{Li}_5\text{FeO}_2 + 3.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 3 \text{ Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8
909
                                                       -0.525
                                                                                      28 \text{ FeO} + \text{Li}_5 \text{FeO}_4 + \text{Li}_7 \text{FeO}_2 + 7 \text{ O}_2 \longrightarrow 6 \text{Li}_7 \text{Fe}_5 \text{O}_8
910
                                                       -0.177
                                                                                      0.7627 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 1.059 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.2966 \, \text{FeO} + 0.5 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.339 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2 \, \text{Fe}_5 \, \text{O}_8
911
                                                                                      0.7322 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 1.017 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.2847 \text{ Fe}\text{O} + 0.2 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.3254 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_8
                                                       -0.163
912
                                                       -0.124
                                                                                      0.6102 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.8475 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.2373 \text{ FeO} + \text{LiFe}\text{O}_2 + 0.2712 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
913
                                                       -0.180
                                                                                      Fe_2O_3 + 10.67 Fe_3O_4 + Li_2O + Li_5FeO_4 + 2.667 O_2 \longrightarrow 7 LiFe_5O_8
914
                                                       -0.129
                                                                                      0.7234 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 1.021 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.2553 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.4894 \, \text{Li}_2 \, \text{Fe}_2 + 0.2553 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.2553 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.4894 \, \text{Li}_3 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_2 + 0.2553 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_3 \, \text{Ci}_3 \, \text{Ci}
915
                                                      -0.128
                                                                                      0.7289 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 1.029 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1362 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.3188 \text{ Li}_6\text{Fe}\text{O}_2 + 0.2573 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_6\text{Fe}\text{O}_8
916
                                                       -0.521
                                                                                      Fe_2O_3 + 32 FeO + Li_2O + Li_5FeO_4 + 8 O_2 \longrightarrow 7 LiFe_5O_8
917
                                                                                      1.672 \text{ Fe}_{2}\text{ O}_{3} + 0.7869 \text{ Fe}\text{ O} + 0.06557 \text{ Li}_{2}\text{ O} + 0.8689 \text{ Li}_{5}\text{ Fe}\text{ O}_{2} + 0.1967 \text{ O}_{2} \longrightarrow \text{Li}_{5}\text{ Fe}_{5}\text{ O}_{8}
                                                       -0.111
918
                                                       -0.115
                                                                                      1.717 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.8078 \, \text{FeO} + 0.06026 \, \text{Li}_5 \, \text{FeO}_4 + 0.6987 \, \text{Li}_7 \, \text{FeO}_2 + 0.202 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_7 \, \text{Fe}_5 \, \text{O}_8
919
                                                       -0.519
                                                                                      Fe_3O_4 + 31 FeO + Li_2O + Li_5FeO_4 + 8O_2 \longrightarrow 7 LiFe_5O_8
920
                                                       -0.193
                                                                                      1.345 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.3767 \text{ Fe}_3\text{O} + 0.2063 \text{ Li}_2\text{O} + 0.5874 \text{ Li}_3\text{Fe}_3\text{O}_2 + 0.4305 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_3\text{Fe}_3\text{O}_4
921
                                                       -0.195
                                                                                      1.362 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.3814 \text{ Fe}\text{O} + 0.1169 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.4156 \text{ Li}_6\text{Fe}\text{O}_2 + 0.4359 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_6\text{Fe}\text{O}_8
922
                                                       -0.182
                                                                                      12.67 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + \text{Li}_2\text{O} + \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + \text{Li}_7\text{Fe}\text{O}_2 + 3.167 \text{ O}_2 \longrightarrow 8 \text{Li}_7\text{Fe}\text{O}_8
923
                                                       -0.537
                                                                                       38 \text{ FeO} + \text{Li}_2\text{O} + \text{Li}_5\text{FeO}_4 + \text{Li}_5\text{FeO}_2 + 9.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 8 \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8
924
                                                       -0.489
                                                                                      Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + 29 FeO + Li_2O + Li_5FeO_4 + 7.5 O_2 \longrightarrow 7 LiFe_5O_8
925
                                                                                      0.6901 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.9585 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.2684 \text{ Fe}\text{O} + 0.262 \text{ Li}_2\text{O} + 0.476 \text{ Li}_2\text{Fe}\text{O}_2 + 0.3067 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}_2\text{O}_3
                                                       -0.152
926
                                                       -0.151
                                                                                      0.6949 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.9651 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.2702 \, \text{Fe} \, \text{O} + 0.1389 \, \text{Li}_5 \, \text{Fe} \, \text{O}_4 + 0.3057 \, \text{Li}_7 \, \text{Fe} \, \text{O}_2 + 0.3088 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_7 \, \text{Fe}_5 \, \text{O}_8
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                            Reaction
927
                                      -0.175
                                                            Fe_2O_3 + 12Fe_3O_4 + Li_2O + Li_5FeO_4 + LiFeO_2 + 3O_2 \longrightarrow 8LiFe_5O_8
928
                                      -0.511 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + 36 FeO + Li<sub>2</sub>O + Li<sub>5</sub>FeO<sub>4</sub> + LiFeO<sub>2</sub> + 9 O<sub>2</sub> \longrightarrow 8 LiFe<sub>5</sub>O<sub>8</sub>
929
                                      -0.509
                                                           Fe_3O_4 + 35 FeO + Li_2O + Li_5FeO_4 + LiFeO_2 + 9O_2 \longrightarrow 8 LiFe_5O_8
930
                                      -0.483
                                                           Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + 33 FeO + Li_2O + Li_5FeO_4 + LiFeO_2 + 8.5 O_2 \longrightarrow 8 LiFe_5O_8
931
                                                           0.3333 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}\text{O}_2
                                      -0.200
932
                                      -0.147
                                                            0.2667 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.2 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.06667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2
933
                                                           FeO + 0.5 Li_2O + 0.25 O_2 \longrightarrow LiFeO_2
                                      -0.461
934
                                      -0.356
                                                           0.8 \, \text{FeO} + 0.2 \, \text{Li}_5 \, \text{FeO}_4 + 0.2 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2
935
                                      -0.167
                                                           0.1604 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2264 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} + 0.0566 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}_2\text{O}_2
936
                                      -0.121
                                                           0.1283 \, \text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.1811 \, \text{Fe}_3\text{O}_4 + 0.2 \, \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.04528 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2
937
                                                            0.4048 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.1905 \, \text{FeO} + 0.5 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.04762 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2
                                      -0.167
938
                                      -0.121
                                                           0.3238 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.1524 \text{ FeO} + 0.2 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.0381 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_2
939
                                      -0.222
                                                           0.3049 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.08537 \text{ FeO} + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} + 0.09756 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2
940
                                      -0.165
                                                           0.2439 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.06829 \text{ FeO} + 0.2 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.07805 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_2
941
                                                           0.2714 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.03582 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1857 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.06786 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2
                                      -0.151
942
                                      -0.113
                                                           Fe_3O_4 + 3.5 Li_2O + LiFe_5O_8 + 0.25 O_2 \longrightarrow 8 LiFeO_2
943
                                                            0.05674 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1738 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.1312 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_8 + 0.01418 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2
                                      -0.063
944
                                      -0.386
                                                            6 \text{ FeO} + \text{Li}_2\text{O} + \text{Li}_5\text{FeO}_4 + 1.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 7 \text{ Li}_5\text{FeO}_2
945
                                      -0.238
                                                            FeO + Li<sub>2</sub>O + 0.25 LiFe<sub>5</sub>O<sub>8</sub> + 0.25 O<sub>2</sub> \longrightarrow 2.25 LiFeO<sub>2</sub>
946
                                      -0.050
                                                            0.02508 \, \text{FeO} + 0.1677 \, \text{Li}_5 \, \text{FeO}_4 + 0.1614 \, \text{LiFe}_5 \, \text{O}_8 + 0.00627 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2
947
                                      -0.184
                                                            0.1525 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2119 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.05932 \text{ FeO} + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} + 0.0678 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2
948
                                      -0.135
                                                           0.122 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.1695 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.04746 \text{ FeO} + 0.2 \text{Li}_5\text{FeO}_4 + 0.05424 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_2
949
                                      -0.125
                                                           0.1313 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.1853 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.04633 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1815 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.04633 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2
950
                                      -0.110
                                                           Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + 4.5 \text{ Li}_2O + \text{Li}_3Fe_5O_8 + 0.25 O_2 \longrightarrow 10 \text{ Li}_3FeO_2
951
                                      -0.062
                                                           0.03555 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.05018 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1759 \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.1205 \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8 + 0.01255 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2
952
                                      -0.122
                                                           0.3259 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.1534 \text{ FeO} + 0.01278 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1949 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.03834 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_2
953
                                      -0.120
                                                           Fe_2O_3 + FeO + 3.5 Li_2O + LiFe_5O_8 + 0.25 O_2 \longrightarrow 8 LiFeO_2
954
                                      -0.051
                                                           0.04542 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.02138 \, \text{FeO} + 0.1713 \, \text{Li}_5 \, \text{FeO}_4 + 0.1433 \, \text{Li}_5 \, \text{Fe}_5 \, \text{O}_8 + 0.005344 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \, \text{FeO}_2
955
                                      -0.170
                                                           0.2486 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.06959 \, \text{FeO} + 0.03811 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.1848 \, \text{Li}_5 \, \text{FeO}_4 + 0.07954 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2
956
                                      -0.151
                                                            Fe_3O_4 + FeO + 4Li_2O + LiFe_5O_8 + 0.5O_2 \longrightarrow 9LiFeO_2
957
                                      -0.068
                                                           0.05467 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.01531 \, \text{FeO} + 0.1741 \, \text{Li}_5 \, \text{FeO}_4 + 0.1293 \, \text{Li} \, \text{Fe}_5 \, \text{O}_8 + 0.0175 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li} \, \text{FeO}_2
958
                                                            0.06045 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.05239 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1524 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.1332 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_8 + 0.01511 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2
                                      -0.067
959
                                      -0.053
                                                            0.02658 \, \text{FeO} + 0.04784 \, \text{Li}_2\text{O} + 0.1478 \, \text{Li}_5\text{FeO}_4 + 0.1651 \, \text{LiFe}_5\text{O}_8 + 0.006645 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2
960
                                      -0.140
                                                            0.1249 \, \text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.1735 \, \text{Fe}_3\text{O}_4 + 0.04858 \, \text{FeO} + 0.04743 \, \text{Li}_2\text{O} + 0.181 \, \text{Li}_5\text{FeO}_4 + 0.05552 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_2
961
                                      -0.141
                                                           Fe_2O_3 + Fe_3O_4 + FeO + 5Li_2O + LiFe_5O_8 + 0.5O_2 \longrightarrow 11LiFeO_2
962
                                      -0.067
                                                           0.0349 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.04847 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.01357 \text{ Fe}\text{O} + 0.1762 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.119 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_8 + 0.01551 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2
963
                                      -0.067
                                                            0.03795 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.05357 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.05402 \text{Li}_2\text{O} + 0.154 \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.1219 \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_8 + 0.01339 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2
964
                                      -0.055
                                                           0.0483 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.02273 \text{ FeO} + 0.05057 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1506 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.146 \text{ Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8 + 0.005682 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_2
965
                                      -0.072
                                                           0.05828 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.01632 \, \text{FeO} + 0.05268 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.1527 \, \text{Li}_5 \, \text{FeO}_4 + 0.1312 \, \text{Li} \, \text{Fe}_5 \, \text{O}_8 + 0.01865 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li} \, \text{FeO}_2
966
                                      -0.072
                                                           0.03727 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.05176 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.01449 \, \text{Fe} \, \text{O} + 0.05424 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.1542 \, \text{Li}_5 \, \text{Fe} \, \text{O}_4 + 0.1203 \, \text{Li} \, \text{Fe}_5 \, \text{O}_8 + 0.01656 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li} \, \text{Fe} \, \text{O}_2 + 0.01656 \, \text{O}_3 + 0.01666 \, \text{O
967
                                                           0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.5 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{CoO}_3
                                      -0.311
968
                                                          0.3333 \,\mathrm{Co}_3\mathrm{O}_4 + \mathrm{TiO} + 0.3333 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiCoO}_3
                                      -0.810
                                                           CoO + 0.5 Ti_2O_3 + 0.25 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
969
                                      -0.434
970
                                      -0.311
                                                           CoO + 0.3333 Ti_3O_5 + 0.1667 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
971
                                      -0.933
                                                           CoO + TiO + 0.5 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
972
                                      -0.322
                                                           0.3049 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.08537 \text{ CoO} + 0.5 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.09756 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{CoO}_3
973
                                      -0.200
                                                           0.3008 \, \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.09756 \, \text{CoO} + 0.3333 \, \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.01626 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{CoO}_3
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                          Reaction
  974
                                     -0.816
                                                         0.3171 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.04878 \text{ CoO} + \text{TiO} + 0.3415 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
  975
                                     -0.225
                                                         0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.1509 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2327 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.02516 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
  976
                                     -0.398
                                                         0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.4127 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1746 \text{ TiO} + 0.127 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
  977
                                     -0.233
                                                         0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.3968 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2063 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.03175 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{Co}_3
  978
                                                         0.3333 \, \text{Co}_3 \, \text{O}_4 + 0.303 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.09091 \, \text{TiO} + 0.0303 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
                                     -0.245
  979
                                     -0.354
                                                         0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.4815 \text{ TiO} + 0.5185 \text{ TiO}_2 + 0.07407 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
  980
                                     -0.343
                                                         CoO + 0.1321 Ti_2O_3 + 0.2453 Ti_3O_5 + 0.1887 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
  981
                                     -0.505
                                                         CoO + 0.4286 Ti_2O_3 + 0.1429 TiO + 0.2857 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
  982
                                     -0.343
                                                         CoO + 0.381 Ti_2O_3 + 0.2381 TiO_2 + 0.1905 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
  983
                                     -0.339
                                                         CoO + 0.3182 Ti_3O_5 + 0.04545 TiO + 0.1818 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
  984
                                                         CoO + 0.2927 Ti_3O_5 + 0.122 TiO_2 + 0.1463 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
                                     -0.279
  985
                                     -0.444
                                                         CoO + 0.4444 TiO + 0.5556 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
  986
                                     -0.236
                                                         0.302 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.09392 \text{ CoO} + 0.1492 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2339 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04052 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{CoO}_3
  987
                                     -0.407
                                                         0.307 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.07907 \text{ CoO} + 0.414 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1721 \text{ TiO} + 0.1395 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
  988
                                     -0.243
                                                         0.3023 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.09302 \text{ CoO} + 0.3953 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2093 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.04651 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{CoO}_3
  989
                                     -0.253
                                                         0.3022 \, \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.09333 \, \text{CoO} + 0.3044 \, \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.08667 \, \text{TiO} + 0.04444 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
  990
                                     -0.248
                                                         Co_3O_4 + 7CoO + 3Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 10TiCoO_3
  991
                                     -0.362
                                                         0.3043 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.08696 \text{ CoO} + 0.4783 \text{ TiO} + 0.5217 \text{ TiO}_2 + 0.08696 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
  992
                                     -0.259
                                                         0.3333 \, \text{Co}_3 \, \text{O}_4 + 0.1398 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.2204 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.05914 \, \text{TiO} + 0.04301 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
  993
                                     -0.204
                                                         0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.1412 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2147 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07345 \text{ Ti}_{O_2} + 0.0113 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{COO_3}
  994
                                     -0.315
                                                         0.3333 \, \text{Co}_3 \, \text{O}_4 + 0.3333 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1481 \, \text{TiO} + 0.1852 \, \text{TiO}_2 + 0.07407 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
  995
                                     -0.218
                                                        0.3333 \, \text{Co}_3 \, \text{O}_4 + 0.2733 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.08667 \, \text{TiO} + 0.09333 \, \text{TiO}_2 + 0.01333 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
  996
                                     -0.352
                                                        CoO + 0.129 Ti_2O_3 + 0.2419 Ti_3O_5 + 0.01613 TiO + 0.1935 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
  997
                                     -0.314
                                                         CoO + 0.1186 Ti_2O_3 + 0.2203 Ti_3O_5 + 0.1017 TiO_2 + 0.1695 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
  998
                                     -0.405
                                                         CoO + 0.3333 Ti_2O_3 + 0.1111 TiO + 0.2222 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
  999
                                     -0.305
                                                         CoO + 0.28 Ti_3O_5 + 0.04 TiO + 0.12 TiO_2 + 0.16 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
1000
                                     -0.268
                                                         0.3028 \, \text{Co}_3\text{O4} + 0.09148 \, \text{CoO} + 0.1388 \, \text{Ti}_2\text{O3} + 0.2224 \, \text{Ti}_3\text{O5} + 0.05521 \, \text{TiO} + 0.05678 \, \text{O2} \longrightarrow \text{TiCoO}_3
1001
                                     -0.214
                                                         0.3013 \, \text{Co}_3 \, \text{O}_4 + 0.09603 \, \text{CoO} + 0.1391 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.2152 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.07616 \, \text{Ti}_{O_2} + 0.02649 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{COO}_3 \, \text{Ti}_{O_3} + 0.02649 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{O_3} + 0.02649 \, \text{O}_3 + 0.02649 \, \text
1002
                                     -0.322
                                                         0.3043 \, \text{Co}_3 \, \text{O}_4 + 0.08696 \, \text{CoO} + 0.3333 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1449 \, \text{TiO} + 0.1884 \, \text{TiO}_2 + 0.08696 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
1003
                                     -0.226
                                                         0.3014 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.09589 \text{ CoO} + 0.274 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08219 \text{ TiO} + 0.09589 \text{ TiO}_2 + 0.0274 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
1004
                                     -0.238
                                                         0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.1304 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2029 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05797 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.07246 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.02899 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{Co}_3
1005
                                     -0.322
                                                         CoO + 0.1159 Ti_2O_3 + 0.2174 Ti_3O_5 + 0.01449 TiO + 0.1014 TiO_2 + 0.1739 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
1006
                                     -0.246
                                                         0.3021 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.09362 \text{ CoO} + 0.1291 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2043 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.0539 \text{ TiO} + 0.07518 \text{ TiO}_2 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
1007
                                     -0.746
                                                         0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + \mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1008
                                     -0.282
                                                        0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1009
                                     -0.781
                                                         0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{TiO} + 0.3333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1010
                                     -0.442
                                                         MnO + 0.5 Ti_2O_3 + 0.25 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1011
                                     -0.319
                                                         MnO + 0.3333 Ti_3O_5 + 0.1667 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1012
                                     -0.941
                                                         MnO + TiO + 0.5 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1013
                                     -0.215
                                                         0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1014
                                                         0.1667 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                     -0.154
1015
                                                         0.5 \text{ TiO} + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                     -0.465
1016
                                     -0.271
                                                         0.1604 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2264 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.0566 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1017
                                     -0.768
                                                         0.1887 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2075 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{TiO} + 0.3019 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1018
                                     -0.284
                                                         0.4048 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1905 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.04762 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1019
                                     -0.276
                                                         Mn_2O_3 + 7MnO + 3Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 9TiMnO_3
1020
                                     -0.774
                                                         0.4286 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + \mathrm{TiO} + 0.2857 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                          Reaction
1021
                           -0.726
                                          0.381 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2381 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + \text{TiO} + 0.1905 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_3
1022
                           -0.342
                                          0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.4048 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1905 \,\mathrm{TiO} + 0.04762 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1023
                           -0.226
                                          0.1757 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.3378 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3243 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.08108 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1024
                           -0.435
                                          Mn_2O_3 + 0.3333 Ti_3O_5 + TiO + 0.1667 O_2 \longrightarrow 2 TiMnO_3
1025
                                          0.2125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2375 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2875 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.0125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3
                           -0.141
1026
                           -0.599
                                          3 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 5 \text{ TiO} + \text{TiO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 6 \text{ TiMnO}_3
1027
                           -0.605
                                          Mn_2O_3 + 3 TiO + TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 4 TiMnO_3
1028
                           -0.296
                                          0.3049 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08537 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.09756 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1029
                           -0.174
                                          0.3008 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09756 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.01626 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1030
                           -0.789
                                          0.3171 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04878 \,\mathrm{MnO} + \mathrm{TiO} + 0.3415 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1031
                           -0.268
                                          0.2955 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1136 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.04545 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1032
                           -0.759
                                          0.2727 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1818 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.2727 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1033
                           -0.196
                                          0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1509 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2327 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.02516 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1034
                           -0.369
                                          0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.4127 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1746 \,\mathrm{TiO} + 0.127 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1035
                           -0.203
                                          0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3968 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2063 \,\mathrm{TiO_2} + 0.03175 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1036
                           -0.245
                                          0.151 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.3633 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2735 \text{ Ti} \text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.1061 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \text{Mn}_3\text{O}_3
1037
                           -0.215
                                          0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.303 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.09091 \,\mathrm{TiO} + 0.0303 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1038
                           -0.157
                                          0.193 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2632 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2105 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.03509 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1039
                           -0.325
                                          0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.4815 \,\mathrm{TiO} + 0.5185 \,\mathrm{TiO_2} + 0.07407 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1040
                           -0.654
                                          Mn_3O_4 + 4 TiO + TiMn_2O_4 + 1.5 O_2 \longrightarrow 5 TiMnO_3
1041
                           -0.396
                                          5 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 6 \text{ TiMnO}_3
1042
                           -0.288
                                          8 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + \text{O}_2 \longrightarrow 9 \text{ TiMnO}_3
1043
                           -0.786
                                          0.4444 \text{ MnO} + 0.5556 \text{ MnO}_2 + \text{TiO} + 0.2222 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1044
                           -0.352
                                          MnO + 0.1321 Ti_2O_3 + 0.2453 Ti_3O_5 + 0.1887 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1045
                           -0.514
                                          MnO + 0.4286 Ti_2O_3 + 0.1429 TiO + 0.2857 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1046
                           -0.352
                                          MnO + 0.381 Ti_2O_3 + 0.2381 TiO_2 + 0.1905 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1047
                           -0.245
                                          0.1294 \text{ MnO} + 0.2824 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.4353 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1412 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1048
                           -0.348
                                          MnO + 0.3182 Ti_3O_5 + 0.04545 TiO + 0.1818 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1049
                           -0.288
                                          MnO + 0.2927 Ti_3O_5 + 0.122 TiO_2 + 0.1463 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1050
                           -0.181
                                          0.1676 \,\mathrm{MnO} + 0.1946 \,\mathrm{Ti}_{3} \,\mathrm{O}_{5} + 0.4162 \,\mathrm{TiMn}_{2} \,\mathrm{O}_{4} + 0.0973 \,\mathrm{O}_{2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_{3}
1051
                           -0.453
                                          MnO + 0.4444 TiO + 0.5556 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1052
                           -0.624
                                          MnO + 2 TiO + TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 3 TiMnO_3
1053
                           -0.207
                                          0.1613 \text{ MnO}_2 + 0.2903 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.4194 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.06452 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1054
                           -0.134
                                          0.177 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1962 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.4115 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.009569 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1055
                           -0.473
                                          0.04 \,\mathrm{MnO_2} + 0.52 \,\mathrm{TiO} + 0.48 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.24 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1056
                           -0.170
                                          0.06604 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1226 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.09434 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1057
                           -0.251
                                          0.2143 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.07143 \text{ TiO} + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1058
                           -0.170
                                          0.1905 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.119 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.09524 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1059
                           -0.168
                                          0.1591 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.02273 \text{ TiO} + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1060
                           -0.138
                                          0.1463 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06098 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.5 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.07317 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_3\text{O}_3
1061
                           -0.220
                                          0.2222 \text{ TiO} + 0.2778 \text{ TiO}_2 + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1062
                           -0.281
                                          0.1525 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2119 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05932 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.0678 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1063
                           -0.247
                                          Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7 MnO + 4 Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 12 TiMnO_3
1064
                           -0.771
                                          0.1864 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2034 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.01695 \,\mathrm{MnO} + \mathrm{TiO} + 0.3051 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1065
                           -0.262
                                          0.1452 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2097 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08065 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.03226 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1066
                           -0.752
                                          0.1613 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1774 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1452 \text{ MnO}_2 + \text{TiO} + 0.2581 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1067
                           -0.256
                                          Mn_2O_3 + 5Mn_3O_4 + 7Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 17TiMnO_3
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                          Reaction
1068
                           -0.360
                                          0.1655 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.223 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.4101 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1799 \,\mathrm{TiO} + 0.1007 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1069
                           -0.194
                                          0.1547 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2302 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3993 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2014 \,\mathrm{TiO_2} + 0.007194 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1070
                           -0.242
                                          0.08683 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1078 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3743 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2515 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.08982 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1071
                           -0.209
                                          0.1546 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2302 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3007 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.09794 \,\mathrm{TiO} + 0.006873 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1072
                                          0.09871 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1445 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2718 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1845 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.01431 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                           -0.150
1073
                           -0.319
                                          0.1597 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2269 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.4874 \,\mathrm{TiO} + 0.5126 \,\mathrm{TiO_2} + 0.05042 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1074
                           -0.681
                                          Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 6 TiO + TiMn_2O_4 + 2 O_2 \longrightarrow 7 TiMnO_3
1075
                           -0.358
                                          Mn_2O_3 + 5MnO + MnO_2 + 4Ti_2O_3 + O_2 \longrightarrow 8TiMnO_3
1076
                           -0.263
                                          Mn_2O_3 + 9MnO + MnO_2 + 4Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 12TiMnO_3
1077
                           -0.749
                                          0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1111 \,\mathrm{MnO} + 0.2222 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.2222 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1078
                           -0.271
                                          Mn_2O_3 + MnO + Ti_2O_3 + 0.3333 Ti_3O_5 + 0.1667 O_2 \longrightarrow 3 TiMnO_3
                                          0.4091 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1818 \,\mathrm{MnO} + 0.4091 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1818 \,\mathrm{TiO} + 0.09091 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1079
                           -0.373
1080
                           -0.332
                                          Mn_2O_3 + 5MnO + 3Ti_2O_3 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7TiMnO_3
                           -0.238
                                          0.1609 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05747 \text{ MnO} + 0.3448 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.3103 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.09195 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1081
1082
                           -0.396
                                          Mn_2O_3 + MnO + 0.6667 Ti_3O_5 + TiO + 0.3333 O_2 \longrightarrow 3 TiMnO_3
1083
                           -0.254
                                          Mn_2O_3 + 8MnO + 3Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 10TiMnO_3
1084
                           -0.157
                                          0.1914 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.08895 \text{ MnO} + 0.2453 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2642 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02695 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{MnO}_3
1085
                           -0.334
                                          0.4043 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1915 \,\mathrm{MnO} + 0.4894 \,\mathrm{TiO} + 0.5106 \,\mathrm{TiO_2} + 0.04255 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1086
                           -0.673
                                          Mn_2O_3 + MnO + 4 TiO + TiMn_2O_4 + 1.5 O_2 \longrightarrow 5 TiMnO_3
1087
                           -0.591
                                          3 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_2O_3} + 5 \operatorname{TiO} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 7 \operatorname{TiMnO_3}
1088
                           -0.220
                                          0.1484 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08791 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3462 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3077 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.05495 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1089
                           -0.529
                                          4 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_3O_5} + 6 \operatorname{TiO} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 9 \operatorname{TiMnO_3}
                                          Mn_2O_3 + MnO_2 + 4Ti_3O_5 + 9TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 21TiMnO_3
1090
                           -0.145
1091
                           -0.608
                                          3 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + \text{MnO}_2 + 6 \text{ TiO} + \text{TiO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 7 \text{ TiMnO}_3
1092
                           -0.617
                                          Mn_2O_3 + MnO_2 + 4 TiO + TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 5 TiMnO_3
1093
                           -0.459
                                          5 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + 5 \operatorname{TiO} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 10 \operatorname{TiMnO_3}
1094
                           -0.167
                                          0.2261 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1087 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1696 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2739 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.02609 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1095
                           -0.511
                                          4 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Ti_2O_3} + 5 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 8 \operatorname{TiMnO_3}
1096
                           -0.286
                                          0.1915 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2872 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.117 \text{ TiO} + 0.3085 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1064 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1097
                           -0.172
                                          0.1875 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2708 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1458 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3125 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.04167 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1098
                           -0.471
                                          5 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 6 \text{Ti}\text{O} + \text{Ti}\text{O}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 10 \text{ Ti}\text{Mn}\text{O}_3
1099
                           -0.179
                                          0.2188 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2188 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.0625 \text{ TiO} + 0.2813 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.03125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1100
                           -0.136
                                          Mn_2O_3 + 3Ti_3O_5 + TiO_2 + 8TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 18TiMnO_3
1101
                           -0.239
                                          0.1087 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2826 \,\mathrm{TiO} + 0.3261 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3913 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.08696 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1102
                           -0.282
                                          0.27 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08 \,\mathrm{MnO} + 0.11 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.06 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1103
                           -0.256
                                          Mn_3O_4 + 8MnO + MnO_2 + 4Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 12TiMnO_3
1104
                           -0.766
                                          0.26 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04 \,\mathrm{MnO} + 0.18 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.28 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1105
                                          0.302 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09392 \,\mathrm{MnO} + 0.1492 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.2339 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.04052 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
                           -0.211
1106
                           -0.380
                                          0.307 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07907 \,\mathrm{MnO} + 0.414 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1721 \,\mathrm{TiO} + 0.1395 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
1107
                           -0.217
                                          0.3023 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09302 \,\mathrm{MnO} + 0.3953 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2093 \,\mathrm{TiO_2} + 0.04651 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1108
                           -0.251
                                          0.1439 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.02952 \,\mathrm{MnO} + 0.3653 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2694 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.1107 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1109
                           -0.228
                                          0.3022 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 0.09333 \text{ MnO} + 0.3044 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.08667 \text{ TiO} + 0.04444 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1110
                           -0.245
                                          Mn_3O_4 + 7MnO + 3Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 10TiMnO_3
1111
                           -0.165
                                          0.1809 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05319 \,\mathrm{MnO} + 0.266 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2021 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.04255 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1112
                           -0.336
                                          0.3043 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08696 \text{ MnO} + 0.4783 \text{ TiO} + 0.5217 \text{ TiO}_2 + 0.08696 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1113
                           -0.702
                                          Mn_3O_4 + MnO + 5 TiO + TiMn_2O_4 + 2 O_2 \longrightarrow 6 TiMnO_3
1114
                           -0.256
                                          6 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + \text{Mn}_2 + 8 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + \text{O}_2 \longrightarrow 19 \text{ Ti}_3 \text{Mn}_3
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                           Reaction
                                      -0.358
1115
                                                           0.2913 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1261 \text{ MnO}_2 + 0.4087 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1826 \text{ TiO} + 0.08696 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1116
                                      -0.256
                                                          6 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO_2} + 9 \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 19 \operatorname{TiMnO_3}
1117
                                      -0.238
                                                          0.1327 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07143 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3673 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2653 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.08163 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1118
                                      -0.497
                                                           2 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_3O_5} + 4 \operatorname{TiO} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 7 \operatorname{TiMnO_3}
1119
                                      -0.149
                                                          0.1764 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06311 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2654 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2039 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.01294 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1120
                                      -0.319
                                                          0.2959 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1122 \text{ MnO}_2 + 0.4898 \text{ TiO} + 0.5102 \text{ TiO}_2 + 0.04082 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1121
                                      -0.656
                                                          Mn_3O_4 + MnO_2 + 5 TiO + TiMn_2O_4 + 1.5 O_2 \longrightarrow 6 TiMnO_3
1122
                                      -0.230
                                                          0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1398 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2204 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05914 \,\mathrm{TiO} + 0.04301 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1123
                                      -0.175
                                                          0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1412 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2147 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07345 \,\mathrm{TiO_2} + 0.0113 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1124
                                      -0.186
                                                          0.2054 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1184 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1905 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1918 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.0517 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                          0.3333 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1481 \text{ TiO} + 0.1852 \text{ TiO}_2 + 0.07407 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1125
                                      -0.285
1126
                                      -0.309
                                                          0.164 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3119 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1222 \,\mathrm{TiO} + 0.254 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.135 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1127
                                      -0.187
                                                          0.1656 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.293 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1624 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2516 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.06369 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1128
                                      -0.189
                                                           0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2733 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08667 \,\mathrm{TiO} + 0.09333 \,\mathrm{TiO_2} + 0.01333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1129
                                                          0.1974 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2443 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06311 \text{ TiO} + 0.2039 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.05502 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3
                                      -0.196
1130
                                      -0.135
                                                          0.1959 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2371 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08247 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.2062 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02062 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}\text{O}_3
1131
                                      -0.248
                                                           0.08861 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2911 \,\mathrm{TiO} + 0.3418 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3671 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.1013 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1132
                                      -0.313
                                                          4 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 5 \text{ TiMnO}_3
1133
                                      -0.395
                                                          0.4894 \text{ MnO} + 0.5106 \text{ MnO}_2 + 0.4043 \text{ Ti}_2 \text{ O}_3 + 0.1915 \text{ TiO} + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1134
                                      -0.348
                                                          6 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + \text{TiO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 7 \text{ TiMnO}_3
1135
                                      -0.231
                                                          0.1008 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.3109 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.3782 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.08403 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1136
                                      -0.491
                                                          MnO + MnO_2 + 0.3333 Ti_3O_5 + TiO + 0.1667 O_2 \longrightarrow 2 TiMnO_3
1137
                                      -0.266
                                                          9 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + \text{Ti}_{2} + \text{O}_2 \longrightarrow 10 \text{ TiMnO}_3
1138
                                      -0.159
                                                          0.1385 \,\mathrm{MnO} + 0.1538 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2154 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.3538 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4 + 0.03077 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}_3\mathrm{Mn}_3\mathrm{O}_3
1139
                                      -0.652
                                                          3 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ TiO} + \text{TiO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 4 \text{ TiMnO}_3
1140
                                      -0.633
                                                          MnO + MnO_2 + 3 TiO + TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 4 TiMnO_3
                                      -0.361
1141
                                                          MnO + 0.129 Ti_2O_3 + 0.2419 Ti_3O_5 + 0.01613 TiO + 0.1935 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1142
                                      -0.322
                                                          MnO + 0.1186 Ti_2O_3 + 0.2203 Ti_3O_5 + 0.1017 TiO_2 + 0.1695 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1143
                                      -0.201
                                                          0.1734 \text{ MnO} + 0.07749 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1439 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.4133 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1107 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1144
                                                          MnO + 0.3333 Ti_2O_3 + 0.1111 TiO + 0.2222 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
                                      -0.413
1145
                                      -0.286
                                                          0.1351 \text{ MnO} + 0.2432 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.08108 \text{ TiO} + 0.4324 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1622 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1146
                                      -0.196
                                                          0.1455 \text{ MnO} + 0.2182 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1364 \text{ TiO}_2 + 0.4273 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1147
                                      -0.313
                                                           MnO + 0.28 Ti_3O_5 + 0.04 TiO + 0.12 TiO_2 + 0.16 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1148
                                      -0.198
                                                          0.1681 \text{ MnO} + 0.1858 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.02655 \text{ TiO} + 0.4159 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.1062 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1149
                                      -0.164
                                                          0.1714 \,\mathrm{MnO} + 0.1714 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.07143 \,\mathrm{TiO}_2 + 0.4143 \,\mathrm{TiMn}_2 \,\mathrm{O}_4 + 0.08571 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
1150
                                      -0.239
                                                          0.08 \,\mathrm{MnO} + 0.24 \,\mathrm{TiO} + 0.3 \,\mathrm{TiO}_2 + 0.46 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 + 0.12 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
1151
                                      -0.154
                                                          0.1881 \,\mathrm{MnO_2} + 0.08911 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1386 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.4059 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 + 0.0198 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
1152
                                      -0.256
                                                          0.1765 \text{ MnO}_2 + 0.2437 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1008 \text{ TiO} + 0.4118 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.08403 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1153
                                      -0.160
                                                          0.1639 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2295 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.123 \,\mathrm{Ti}\mathrm{O}_2 + 0.418 \,\mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4 + 0.03279 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}\mathrm{MnO}_3
1154
                                      -0.165
                                                          0.184 \,\mathrm{MnO_2} + 0.18 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.052 \,\mathrm{TiO} + 0.408 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.024 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1155
                                      -0.134
                                                           MnO_2 + 3 Ti_3O_5 + TiO_2 + 9 TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 19 TiMnO_3
1156
                                      -0.226
                                                          0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.2593 \text{ TiO} + 0.2963 \text{ TiO}_2 + 0.4444 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.07407 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1157
                                      -0.175
                                                          0.06452 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.121 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.008065 \, \text{TiO} + 0.5 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 + 0.09677 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3 \, \text{TiMn}_3 \, \text{O}_4 + 0.09677 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3 \, \text{O}_3 + 0.008065 \, \text{TiO}_4 + 0.008065 \, \text{TiO}_4 + 0.008065 \, \text{TiO}_5 + 0
1158
                                      -0.155
                                                          0.05932 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1102 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05085 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.5 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.08475 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_3
1159
                                      -0.201
                                                          0.1667 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.05556 \text{ TiO} + 0.1111 \text{ TiO}_2 + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1160
                                      -0.151
                                                          0.14 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.02 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.06 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.5 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.08 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3
1161
                                      -0.272
                                                          0.1377 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1957 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05797 \,\mathrm{MnO} + 0.07971 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.04348 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                        Reaction
                          -0.242
1162
                                        Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 9MnO + MnO_2 + 5Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 15TiMnO_3
1163
                          -0.755
                                       0.1594 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1739 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.01449 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.1449 \, \text{Mn} \, \text{O}_2 + \text{TiO} + 0.2609 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1164
                          -0.197
                                        0.1447 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.2138 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.06914 \, \text{MnO} + 0.1524 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.2318 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.0128 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1165
                          -0.368
                                        0.1586 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2104 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05178 \,\mathrm{MnO} + 0.411 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.178 \,\mathrm{TiO} + 0.11 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                          -0.205
                                        0.1456 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2136 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.06796 \text{ MnO} + 0.3981 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2039 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.01942 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1166
1167
                          -0.246
                                        0.08493 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1041 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.01918 \text{ Mn}_2\text{O} + 0.3753 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2493 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.09315 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3
1168
                          -0.218
                                       0.1455 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2136 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06811 \,\mathrm{MnO} + 0.3019 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.09443 \,\mathrm{TiO} + 0.01858 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1169
                          -0.232
                                        Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 8 MnO + 4 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 13 TiMnO_3
1170
                          -0.157
                                        0.09474 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1368 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04211 \text{ MnO} + 0.2737 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1789 \text{ Ti} \text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02105 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \text{MnO}_3
1171
                          -0.327
                                        0.1515 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2121 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.06061 \text{ MnO} + 0.4848 \text{ TiO} + 0.5152 \text{ TiO}_2 + 0.06061 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1172
                          -0.713
                                        Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + 7 TiO + TiMn_2O_4 + 2.5 O_2 \longrightarrow 8 TiMnO_3
1173
                          -0.255
                                        Mn_2O_3 + 6Mn_3O_4 + MnO_2 + 9Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 21TiMnO_3
1174
                          -0.353
                                       0.1481 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2037 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.09259 \text{ MnO}_2 + 0.4074 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1852 \text{ TiO} + 0.07407 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1175
                          -0.255
                                        Mn_2O_3 + 6Mn_3O_4 + MnO_2 + 10Ti_2O_3 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 21TiMnO_3
1176
                          -0.237
                                       0.07732 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.09794 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.0567 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3763 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2474 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.07216 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1177
                          -0.438
                                        Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3TiO + 0.5O_2 \longrightarrow 6TiMnO_3
1178
                          -0.147
                                        Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO_2 + 5Ti_3O_5 + 9TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 24TiMnO_3
1179
                          -0.315
                                        0.1449 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2101 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07971 \text{ Mn}_2 + 0.4928 \text{ TiO} + 0.5072 \text{ TiO}_2 + 0.02899 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_3
1180
                          -0.678
                                        Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO_2 + 7 TiO + TiMn_2O_4 + 2O_2 \longrightarrow 8 TiMnO_3
1181
                          -0.224
                                        0.1561 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2293 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1415 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2171 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06585 \text{ TiO} + 0.01951 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1182
                          -0.241
                                        Mn_2O_3 + 6Mn_3O_4 + 8Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 20TiMnO_3
1183
                          -0.180
                                        0.1073 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1535 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1254 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1956 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1625 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03009 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1184
                          -0.279
                                        0.1597 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2269 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1541 \text{ TiO} + 0.1793 \text{ TiO}_2 + 0.05042 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1185
                          -0.310
                                        0.09739 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1164 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3207 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1306 \,\mathrm{TiO} + 0.228 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.1188 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1186
                                        0.08879 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1215 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3037 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1636 \,\mathrm{TiO_2} + 0.229 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.04673 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                          -0.183
1187
                          -0.429
                                        Mn_2O_3 + 2Mn_3O_4 + Ti_3O_5 + 4TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 8TiMnO_3
1188
                          -0.194
                                        0.1039 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.147 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2509 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07168 \text{ TiO} + 0.1756 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.03584 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3
1189
                          -0.139
                                        Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 4Ti_3O_5 + TiO_2 + 8TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 21TiMnO_3
1190
                          -0.249
                                        0.0553 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05991 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2995 \text{ TiO} + 0.3456 \text{ TiO}_2 + 0.3548 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.09217 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1191
                          -0.281
                                        Mn_2O_3 + 8MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 11TiMnO_3
1192
                          -0.358
                                        0.3333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.156 \text{ MnO} + 0.1773 \text{ MnO}_2 + 0.4043 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1915 \text{ TiO} + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1193
                          -0.326
                                        Mn_2O_3 + 6MnO + MnO_2 + 4Ti_2O_3 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 9TiMnO_3
1194
                          -0.231
                                        0.1362 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05164 \text{ MnO} + 0.08451 \text{ MnO}_2 + 0.3521 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2958 \text{ Ti} \text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.06573 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \text{MnO}_3
1195
                          -0.519
                                        Mn_2O_3 + 3MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3TiO + O_2 \longrightarrow 6TiMnO_3
1196
                          -0.248
                                        Mn_2O_3 + 10MnO + MnO_2 + 4Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 13TiMnO_3
1197
                          -0.153
                                        Mn_2O_3 + MnO + MnO_2 + 4Ti_3O_5 + 8TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 20TiMnO_3
1198
                          -0.554
                                        Mn_2O_3 + MnO + MnO_2 + 3 TiO + TiO_2 + 0.5 O_2 \longrightarrow 4 TiMnO_3
1199
                          -0.671
                                        Mn_2O_3 + MnO + MnO_2 + 5 TiO + TiMn_2O_4 + 1.5 O_2 \longrightarrow 6 TiMnO_3
1200
                          -0.240
                                        0.4012 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1975 \,\mathrm{MnO} + 0.142 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.216 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.0679 \,\mathrm{TiO} + 0.01235 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1201
                          -0.252
                                        Mn_2O_3 + 4MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 + 0.5O_2 \longrightarrow 6TiMnO_3
1202
                          -0.184
                                        0.2045 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09193 \text{ MnO} + 0.1107 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1764 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2495 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.04128 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1203
                          -0.295
                                        0.4043 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1915 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.156 \text{ TiO} + 0.1773 \text{ TiO}_2 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1204
                          -0.298
                                        0.1765 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05882 \text{ MnO} + 0.2941 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1176 \text{ TiO} + 0.2941 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.1176 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{MnO}_3
1205
                          -0.184
                                        0.1696 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07143 \text{ MnO} + 0.2768 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1518 \text{ TiO}_2 + 0.2946 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.05357 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1206
                          -0.311
                                        Mn_2O_3 + MnO + 0.3333 Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + 0.1667 O_2 \longrightarrow 3 TiMnO_3
1207
                                        0.1978 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.08764 \text{ MnO} + 0.227 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06067 \text{ TiO} + 0.2584 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.04494 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                          -0.194
1208
                          -0.138
                                        0.1924 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09264 \text{ MnO} + 0.2209 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07601 \text{ TiO}_2 + 0.2613 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.01425 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                                                                              Reaction
1209
                                                                       -0.244
                                                                                                              0.1009 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.02752 \text{ MnO} + 0.2844 \text{ TiO} + 0.3303 \text{ TiO}_2 + 0.3853 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.09174 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1210
                                                                       -0.478
                                                                                                              5 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + 6 \operatorname{TiO} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 11 \operatorname{TiMnO_3}
1211
                                                                       -0.157
                                                                                                              Mn_2O_3 + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3Ti_3O_5 + 8TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 19TiMnO_3
1212
                                                                       -0.528
                                                                                                              4 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_2O_3} + 6 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 9 \operatorname{TiMnO_3}
                                                                                                              0.1616\,Mn_2O_3 + 0.1004\,MnO_2 + 0.2926\,Ti_2O_3 + 0.1266\,TiO + 0.2882\,TiMn_2O_4 + 0.0786\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.1004\,MnO_2 + 0.0000\,MnO_3 + 0.000
1213
                                                                       -0.283
1214
                                                                       -0.166
                                                                                                              0.161 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.08475 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.2797 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1441 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.2966 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.01695 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3
1215
                                                                       -0.489
                                                                                                              5 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_3O_5} + 7 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 11 \operatorname{TiMnO_3}
1216
                                                                       -0.177
                                                                                                              0.1898 \, Mn_2O_3 + 0.09595 \, MnO_2 + 0.2217 \, Ti_3O_5 + 0.07249 \, TiO + 0.2623 \, TiMn_2O_4 + 0.004264 \, O_2 \longrightarrow TiMnO_3 \, O_3 + 0.004264 \, O_4 + 0.004264 \, O_4 + 0.004264 \, O_5 + 0.004264 \, O_5 + 0.004264 \, O_6 + 0.004264 \, O_7 + 0.004264 \, O_8 + 0.004264 \, O_8
1217
                                                                       -0.135
                                                                                                              Mn_2O_3 + MnO_2 + 4Ti_3O_5 + TiO_2 + 10TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 23TiMnO_3
1218
                                                                       -0.239
                                                                                                              0.0885 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.06195 \text{ MnO}_2 + 0.292 \text{ TiO} + 0.3274 \text{ TiO}_2 + 0.3805 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.0708 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1219
                                                                       -0.434
                                                                                                              6 \operatorname{Mn_2O_3} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + 6 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 12 \operatorname{TiMnO_3}
                                                                                                              0.2293 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1015 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1617 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.04135 \, \text{TiO} + 0.2707 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 + 0.03759 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1220
                                                                       -0.191
1221
                                                                       -0.151
                                                                                                              0.2266 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1016 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1562 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05469 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2734 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.01562 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1222
                                                                       -0.227
                                                                                                              0.2 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1 \text{ TiO} + 0.1333 \text{ TiO}_2 + 0.3 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.06667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3
1223
                                                                       -0.160
                                                                                                              0.2202 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1972 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05963 \text{ TiO} + 0.06881 \text{ TiO}_2 + 0.2798 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.01835 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1224
                                                                       -0.200
                                                                                                              0.2723 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08926 \,\mathrm{MnO} + 0.0938 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1528 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2315 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.009077 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1225
                                                                       -0.369
                                                                                                              0.2682 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.0728 \,\mathrm{MnO} + 0.1226 \,\mathrm{MnO_2} + 0.41 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1801 \,\mathrm{TiO} + 0.09962 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1226
                                                                       -0.207
                                                                                                              0.272 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08812 \text{ MnO} + 0.09579 \text{ MnO}_2 + 0.3985 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2031 \text{ TiO}_2 + 0.01533 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1227
                                                                       -0.243
                                                                                                              0.1262 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.02769 \text{ MnO} + 0.07077 \text{ MnO}_2 + 0.3692 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2615 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.08615 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1228
                                                                       -0.221
                                                                                                              0.2721 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08824 \text{ MnO} + 0.09559 \text{ MnO}_2 + 0.3015 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09559 \text{ TiO} + 0.01471 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1229
                                                                       -0.241
                                                                                                              Mn_3O_4 + 9MnO + MnO_2 + 4Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 13TiMnO_3
1230
                                                                       -0.158
                                                                                                              0.1649 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05155 \,\mathrm{MnO} + 0.06186 \,\mathrm{MnO_2} + 0.268 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1959 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.02062 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1231
                                                                       -0.329
                                                                                                              0.2703 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08108 \text{ MnO} + 0.1081 \text{ MnO}_2 + 0.4865 \text{ TiO} + 0.5135 \text{ TiO}_2 + 0.05405 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1232
                                                                       -0.696
                                                                                                              Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 6 TiO + TiMn_2O_4 + 2 O_2 \longrightarrow 7 TiMnO_3
1233
                                                                                                              0.3028 \, Mn_3O_4 + 0.09148 \, MnO + 0.1388 \, Ti_2O_3 + 0.2224 \, Ti_3O_5 + 0.05521 \, TiO + 0.05678 \, O_2 \longrightarrow TiMnO_3
                                                                       -0.242
                                                                                                              0.3013 \, Mn_3O_4 + 0.09603 \, MnO + 0.1391 \, Ti_2O_3 + 0.2152 \, Ti_3O_5 + 0.07616 \, TiO_2 + 0.02649 \, O_2 \longrightarrow TiMnO_3 \, O_3 + O
1234
                                                                       -0.189
1235
                                                                       -0.195
                                                                                                              0.1931 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05446 \text{ MnO} + 0.1188 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1931 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1832 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.05941 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1236
                                                                       -0.296
                                                                                                              0.3043 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08696 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1449 \text{ TiO} + 0.1884 \text{ TiO}_2 + 0.08696 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1237
                                                                                                              0.157\,Mn_3O_4 + 0.02907\,MnO + 0.314\,Ti_2O_3 + 0.1221\,TiO + 0.25\,TiMn_2O_4 + 0.1395\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3O_4 + 0.02907\,MnO_3O_4 + 0.02907\,MnO_3O_5 + 0.02907\,MnO_5 + 0.02907\,M
                                                                       -0.314
1238
                                                                       -0.193
                                                                                                              0.1561 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04046 \text{ MnO} + 0.2948 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1647 \text{ TiO}_2 + 0.2457 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.06936 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1239
                                                                       -0.201
                                                                                                              0.3014 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.09589 \text{ MnO} + 0.274 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08219 \text{ TiO} + 0.09589 \text{ TiO}_2 + 0.0274 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1240
                                                                       -0.204
                                                                                                              0.1856 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05155 \,\mathrm{MnO} + 0.2474 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06186 \,\mathrm{TiO} + 0.1959 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.06186 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1241
                                                                       -0.144
                                                                                                              0.1831 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05634 \text{ MnO} + 0.2394 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08451 \text{ Ti}_{O_2} + 0.1972 \text{ Ti}_{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02817 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{Mn}
1242
                                                                       -0.250
                                                                                                              0.08571 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.01143 \,\mathrm{MnO} + 0.2914 \,\mathrm{TiO} + 0.3429 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3657 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.1029 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1243
                                                                       -0.224
                                                                                                              0.2988 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1036 \text{ MnO}_2 + 0.142 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.216 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06805 \text{ TiO} + 0.01183 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1244
                                                                       -0.242
                                                                                                              7 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO}_2 + 9 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{Ti}_2\text{O}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 22 \text{ TiMnO}_3
1245
                                                                       -0.179
                                                                                                              0.1871 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07143 \text{ Mn}_{\text{O}_2} + 0.1224 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1905 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1837 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02721 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02721 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Nn}_3\text{O}_4 + 0.02721 \text{ O}_3 + 0.1905 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1837 \text{ Ti}_3\text{Nn}_2\text{O}_4 + 0.02721 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Nn}_3\text{O}_4 + 0.02721 \text{ O}_3 + 0.1905 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1837 \text{ Ti}_3\text{Nn}_2\text{O}_4 + 0.02721 \text{ O}_3 + 0.1905 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1837 \text{ Ti}_3\text{Nn}_2\text{O}_4 + 0.02721 \text{ O}_3 + 0.1905 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1837 \text{ Ti}_3\text{Nn}_2\text{O}_4 + 0.02721 \text{ O}_3 + 0.1905 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1837 \text{ Ti}_3\text{Nn}_2\text{O}_4 + 0.02721 \text{ O}_3 + 0.1905 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1837 \text{ Ti}_3\text{Nn}_2\text{O}_4 + 0.02721 \text{ O}_3 + 0.1905 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1837 \text{ Ti}_3\text{Nn}_2\text{O}_4 + 0.02721 \text{ O}_3 + 0.1905 \text{ O}_3 + 0.190
1246
                                                                       -0.279
                                                                                                              0.2959 \,\mathrm{Mn}_3 \,\mathrm{O}_4 + 0.1122 \,\mathrm{Mn}_{2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti}_2 \,\mathrm{O}_3 + 0.1565 \,\mathrm{Ti}_2 + 0.1769 \,\mathrm{Ti}_{2} + 0.04082 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{Mn}_{2} + 0.1769 \,\mathrm{Ti}_{2} + 0.04082 \,\mathrm{O}_3 + 0.1122 \,\mathrm{Mn}_{2} + 0.04082 \,\mathrm{O}_3 + 0.1122 \,\mathrm{Mn}_{2} + 0.04082 \,\mathrm{O}_3 + 0.1122 \,\mathrm{Mn}_{2} + 0.04082 \,\mathrm{O}_3 + 0.04082 \,\mathrm{O}_3
1247
                                                                       -0.304
                                                                                                              0.1432 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 0.08378 \text{ MnO}_2 + 0.3135 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1297 \text{ TiO} + 0.2432 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.1081 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1248
                                                                                                              0.1489 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.06383 \text{ MnO}_2 + 0.2979 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1596 \text{ TiO}_2 + 0.2447 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                                       -0.181
1249
                                                                       -0.439
                                                                                                              2.5 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 4.5 \text{TiO} + \text{Ti}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 8.5 \text{TiMnO}_3
1250
                                                                       -0.192
                                                                                                              0.1793 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07065 \text{ MnO}_2 + 0.2446 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07065 \text{ TiO} + 0.1957 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.03261 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1251
                                                                       -0.137
                                                                                                              Mn_3O_4 + MnO_2 + 4Ti_3O_5 + TiO_2 + 9TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 22TiMnO_3
1252
                                                                       -0.246
                                                                                                              0.07447 \text{ Mn}_3\text{ O}_4 + 0.05319 \text{ MnO}_2 + 0.2979 \text{ TiO} + 0.3404 \text{ TiO}_2 + 0.3617 \text{ TiMn}_2\text{ O}_4 + 0.08511 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1253
                                                                       -0.208
                                                                                                              0.3333 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1304 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2029 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05797 \text{ TiO} + 0.07246 \text{ TiO}_2 + 0.02899 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1254
                                                                       -0.209
                                                                                                              0.2075 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1114 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1829 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03986 \text{ TiO} + 0.1887 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.06331 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3
1255
                                                                       -0.167
                                                                                                              0.2069 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1102 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.175 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06487 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1897 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.03917 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                                                                                                                                       Reaction
 1256
                                                                                                             -0.245
                                                                                                                                                                       0.1756 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2545 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1043 \text{ TiO} + 0.1501 \text{ TiO}_2 + 0.2366 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.0916 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1257
                                                                                                             -0.173
                                                                                                                                                                      0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.22 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06 \,\mathrm{TiO} + 0.08 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.04 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1258
                                                                                                             -0.417
                                                                                                                                                                       5 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{O}_2 \longrightarrow 6 \text{ TiMnO}_3
 1259
                                                                                                             -0.271
                                                                                                                                                                       5 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO}_2 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 6 \text{ TiMnO}_3
 1260
                                                                                                             -0.182
                                                                                                                                                                    0.1436 \,\mathrm{MnO} + 0.1649 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.09574 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1543 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.3457 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4 + 0.04255 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}_3\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3
 1261
                                                                                                             -0.402
                                                                                                                                                                       3 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + \text{TiO}_2 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 4 \text{ TiMnO}_3
 1262
                                                                                                             -0.283
                                                                                                                                                                      0.1053 \,\mathrm{MnO} + 0.1579 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2632 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1053 \,\mathrm{TiO} + 0.3684 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 + 0.1053 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
 1263
                                                                                                             -0.182
                                                                                                                                                                       0.1169 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.2468 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1364 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.3701 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.05195 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.05195 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti}_
 1264
                                                                                                             -0.336
                                                                                                                                                                       4 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{Ti}_2 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 5 \text{ TiMnO}_3
 1265
                                                                                                             -0.190
                                                                                                                                                                       0.1383 \text{ MnO} + 0.1608 \text{ MnO}_2 + 0.1994 \text{ Ti}_3 \text{ O}_5 + 0.05145 \text{ TiO} + 0.3505 \text{ TiMn}_2 \text{ O}_4 + 0.04502 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1266
                                                                                                             -0.142
                                                                                                                                                                       0.1424 \text{ MnO} + 0.1525 \text{ MnO}_2 + 0.1932 \text{ Ti}_3 \text{ O}_5 + 0.0678 \text{ Ti}_{2} + 0.3525 \text{ Ti}_{3} \text{ Mn}_{2} \text{ O}_4 + 0.02034 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{3} \text{ MnO}_3
 1267
                                                                                                             -0.238
                                                                                                                                                                      0.05634 \,\mathrm{MnO} + 0.09859 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2676 \,\mathrm{TiO} + 0.3099 \,\mathrm{TiO}_2 + 0.4225 \,\mathrm{TiMn}_2 \,\mathrm{O}_4 + 0.08451 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
 1268
                                                                                                             -0.331
                                                                                                                                                                      MnO + 0.1159 Ti_2O_3 + 0.2174 Ti_3O_5 + 0.01449 TiO + 0.1014 TiO_2 + 0.1739 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
 1269
                                                                                                             -0.207
                                                                                                                                                                       0.1735 \text{ MnO} + 0.07571 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.142 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.009464 \text{ TiO} + 0.4132 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1136 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1270
                                                                                                                                                                       0.1761 \text{ MnO} + 0.06977 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1296 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.0598 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.412 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.09967 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3
                                                                                                             -0.185
 1271
                                                                                                             -0.232
                                                                                                                                                                       0.1489 \,\mathrm{MnO} + 0.1915 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.06383 \,\mathrm{TiO} + 0.1277 \,\mathrm{TiO}_2 + 0.4255 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 + 0.1277 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
 1272
                                                                                                             -0.179
                                                                                                                                                                        0.1719 \text{ MnO} + 0.1641 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.02344 \text{ TiO} + 0.07031 \text{ TiO}_2 + 0.4141 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.09375 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ O}_4 + 0.09375 \text{ O}_4 + 0.09375 \text{ O}_5 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ O}_5 + 0.00344 \text{ TiO}_5 + 0.00344 \text{ TiO}_5 + 0.00344 \text{ TiO}_5 + 0.00344 \text{ TiO}_5 + 0.00344 \text{ O}_5 + 0.00344 \text{ TiO}_5 + 0.00344 \text{ O}_5 + 0
 1273
                                                                                                             -0.174
                                                                                                                                                                       0.192 \text{ MnO}_2 + 0.08309 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1318 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03438 \text{ TiO} + 0.404 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.02865 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1274
                                                                                                             -0.141
                                                                                                                                                                       0.1869 \text{ MnO}_2 + 0.08309 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1276 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04451 \text{ Ti}_{O_2} + 0.4065 \text{ Ti}_{Mn}\text{O}_4 + 0.01187 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{Mn}\text{O}_3
 1275
                                                                                                             -0.206
                                                                                                                                                                       0.1765 \text{ MnO}_2 + 0.1961 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.08497 \text{ TiO} + 0.1111 \text{ TiO}_2 + 0.4118 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.05229 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1276
                                                                                                             -0.149
                                                                                                                                                                       0.1831 \text{ MnO}_2 + 0.162 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.0493 \text{ TiO} + 0.05634 \text{ TiO}_2 + 0.4085 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.01408 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1277
                                                                                                             -0.159
                                                                                                                                                                       0.05797 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1087 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.007246 \text{ TiO} + 0.05072 \text{ TiO}_2 + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.08696 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1278
                                                                                                             -0.255
                                                                                                                                                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 8 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 4 Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 14 TiMnO_3
 1279
                                                                                                             -0.361
                                                                                                                                                                       0.1417 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1917 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05 \,\mathrm{MnO} + 0.09167 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4083 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1833 \,\mathrm{TiO} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1280
                                                                                                             -0.303
                                                                                                                                                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 5MnO + MnO_2 + 5Ti_2O_3 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 11TiMnO_3
 1281
                                                                                                             -0.240
                                                                                                                                                                       0.07547 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.09434 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.01887 \, \text{MnO} + 0.0566 \, \text{MnO}_2 + 0.3774 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.2453 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.07547 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{MnO}_3 + 0.01887 \, \text{MnO}_4 + 0.01887 \, \text{MnO}_4
 1282
                                                                                                             -0.510
                                                                                                                                                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 4TiO + O_2 \longrightarrow 7TiMnO_3
 1283
                                                                                                             -0.231
                                                                                                                                                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 10 MnO + MnO_2 + 5 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 16 TiMnO_3
 1284
                                                                                                             -0.152
                                                                                                                                                                       0.08701 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1288 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04181 \,\mathrm{MnO} + 0.0452 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2746 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1763 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.00678 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1285
                                                                                                             -0.323
                                                                                                                                                                       0.1373 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1961 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.05882 \, \text{MnO} + 0.07843 \, \text{MnO}_2 + 0.4902 \, \text{TiO} + 0.5098 \, \text{TiO}_2 + 0.03922 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1286
                                                                                                             -0.707
                                                                                                                                                                       Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 8 TiO + TiMn_2O_4 + 2.5 O_2 \longrightarrow 9 TiMnO_3
 1287
                                                                                                             -0.233
                                                                                                                                                                       0.1473\,Mn_2O_3 + 0.2132\,Mn_3O_4 + 0.06593\,MnO + 0.1407\,Ti_2O_3 + 0.2187\,Ti_3O_5 + 0.06264\,TiO + 0.03077\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.0187\,Ti_3O_5 + 0.00187\,Ti_3O_5 +
 1288
                                                                                                             -0.246
                                                                                                                                                                        Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7 MnO + Ti_2O_3 + 3 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 12 TiMnO_3
 1289
                                                                                                             -0.188
                                                                                                                                                                       0.1033 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1458 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04244 \text{ MnO} + 0.1255 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1974 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1568 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.0369 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.0369 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1458 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04244 \text{ MnO} + 0.1255 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1974 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1568 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.0369 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1458 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04244 \text{ MnO} + 0.1255 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1974 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1568 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.0369 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1458 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04244 \text{ MnO} + 0.1255 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1974 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1568 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.0369 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1458 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04244 \text{ MnO} + 0.1255 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.1974 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1568 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.0369 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_3 + 0.1458 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04244 \text{ MnO} + 0.1255 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.1974 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1568 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.0369 \text{ O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.04244 \text{ MnO} + 0.1255 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.1974 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1568 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.0369 \text{ O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.0369 \text{ O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3
 1290
                                                                                                             -0.287
                                                                                                                                                                      0.1515 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2121 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06061 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1515 \,\mathrm{TiO} + 0.1818 \,\mathrm{TiO_2} + 0.06061 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1291
                                                                                                             -0.313
                                                                                                                                                                       0.09565 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.113 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.01739 \, \text{MnO} + 0.3217 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1304 \, \text{TiO} + 0.2261 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 + 0.1217 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 + 0.1217 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \, \text{O}_4 + 0.01739 \, \text{MnO}_4 + 0.01739 \, \text{MnO}
 1292
                                                                                                             -0.188
                                                                                                                                                                       0.08584 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.1159 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.03004 \, \text{Mn} \text{O} + 0.3047 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1652 \, \text{Ti}_2 + 0.2253 \, \text{Ti}_{10} \text{Mn}_2 \text{O}_4 + 0.0515 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{10} \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.0515 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{10} \text{O}_3 + 0.1652 \, \text{Ti}_2 + 0.2253 \, \text{Ti}_{10} \text{O}_3 + 0.0515 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{10} \text{O}_3 + 0.0515 \, \text{O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_{10} \text{O}_3 + 0.0515 \, \text{O}_3 + 0.0515 \, \text{O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_{10} \text{O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_{10} \text{O}_3 + 0.0515 \, \text{O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_{10} \longrightarrow \text{Ti}_
 1293
                                                                                                             -0.193
                                                                                                                                                                       0.1432 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2142 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07094 \text{ MnO} + 0.2729 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09004 \text{ TiO} + 0.09141 \text{ TiO}_2 + 0.002729 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
  1294
                                                                                                             -0.200
                                                                                                                                                                       0.1001 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1397 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.0396 \,\mathrm{MnO} + 0.253 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07041 \,\mathrm{TiO} + 0.1705 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.0418 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1295
                                                                                                                                                                       0.09408 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1394 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.0453 \, \text{MnO} + 0.2474 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.08362 \, \text{Ti}_{2} + 0.1742 \, \text{Ti}_{3} \, \text{N}_{2} + 0.006969 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{3} \, \text{MnO}_3 + 0.006969 \, \text{O}_4 + 0.006969 \, \text{O}_5 + 0.006969 \, \text{O}_6 + 0.006969 \, \text{O}_7 + 0.00
                                                                                                             -0.136
 1296
                                                                                                             -0.249
                                                                                                                                                                        0.05485 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05907 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.004219 \text{ MnO} + 0.2996 \text{ TiO} + 0.346 \text{ TiO}_2 + 0.3544 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.09283 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
  1297
                                                                                                             -0.442
                                                                                                                                                                       Mn_2O_3 + 2Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 4TiO + O_2 \longrightarrow 9TiMnO_3
 1298
                                                                                                             -0.243
                                                                                                                                                                       Mn_2O_3 + 7Mn_3O_4 + MnO_2 + 10Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 24TiMnO_3
                                                                                                                                                                       0.09845\,Mn_2O_3 + 0.1442\,Mn_3O_4 + 0.05268\,MnO_2 + 0.1278\,Ti_2O_3 + 0.1952\,Ti_3O_5 + 0.1589\,TiMn_2O_4 + 0.01382\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.01278\,Ti_2O_3 + 0.01278\,
 1299
                                                                                                             -0.175
 1300
                                                                                                             -0.276
                                                                                                                                                                       0.1449 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2101 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07971 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1594 \text{ TiO} + 0.1739 \text{ TiO}_2 + 0.02899 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1301
                                                                                                                                                                        0.08642\,Mn_2O_3 + 0.1049\,Mn_3O_4 + 0.0679\,MnO_2 + 0.321\,Ti_2O_3 + 0.1358\,TiO + 0.2222\,TiMn_2O_4 + 0.09877\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.08642\,Mn_2O_3 + 0.008642\,Mn_2O_3 + 0.00
                                                                                                             -0.306
1302
                                                                                                             -0.179
                                                                                                                                                                       0.08065 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1129 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04839 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3065 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1613 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2258 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.03226 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                                                                                                                      Reaction
 1303
                                                                                                 -0.455
                                                                                                                                                       Mn_2O_3 + 2Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_3O_5 + 5TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 9TiMnO_3
1304
                                                                                                 -0.192
                                                                                                                                                      0.09524 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1377 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.0528 \, \text{Mn}_{2} + 0.2505 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.0766 \, \text{TiO} + 0.1718 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 + 0.0207 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_{2} \, \text{TiMn}_{2} \, \text{O}_3 + 0.0328 \, \text{Mn}_{2} \, \text{O}_4 + 0.0007 \, \text{O}_4 + 0.000
 1305
                                                                                                 -0.138
                                                                                                                                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO_2 + 5Ti_3O_5 + TiO_2 + 10TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 26TiMnO_3
 1306
                                                                                                 -0.247
                                                                                                                                                      0.048 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.052 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.044 \text{ MnO}_2 + 0.304 \text{ TiO} + 0.344 \text{ TiO}_2 + 0.352 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.08 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1307
                                                                                                 -0.203
                                                                                                                                                      0.1546 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.2303 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.1327 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.2007 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.06469 \, \text{TiO} + 0.06798 \, \text{TiO}_2 + 0.006579 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1308
                                                                                                 -0.208
                                                                                                                                                      0.1102 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1545 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1172 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1866 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.04774 \,\mathrm{TiO} + 0.158 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.0434 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1309
                                                                                                 -0.162
                                                                                                                                                     0.1065 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1552 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1173 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1805 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06318 \text{ Ti}_2\text{O}_7 + 0.1606 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.01805 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1310
                                                                                                 -0.246
                                                                                                                                                      0.09774 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1278 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2632 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1128 \,\mathrm{TiO} + 0.1504 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2105 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.07519 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1311
                                                                                                 -0.172
                                                                                                                                                      0.1034 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1498 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2268 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06857 \,\mathrm{TiO} + 0.07911 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1719 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.0211 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1312
                                                                                                 -0.369
                                                                                                                                                      Mn_2O_3 + MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 0.3333 Ti_3O_5 + TiO + 0.1667 O_2 \longrightarrow 4 TiMnO_3
 1313
                                                                                                 -0.262
                                                                                                                                                       Mn_2O_3 + 9MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 12TiMnO_3
1314
                                                                                                 -0.175
                                                                                                                                                      0.1779 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08589 \,\mathrm{MnO} + 0.09202 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1166 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1779 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2331 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.01227 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1315
                                                                                                 -0.517
                                                                                                                                                      Mn_2O_3 + 3MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 6TiMnO_3
 1316
                                                                                                 -0.295
                                                                                                                                                       0.1493 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05224 \text{ MnO} + 0.09701 \text{ MnO}_2 + 0.2985 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1269 \text{ TiO} + 0.2761 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.08955 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                                                                                                                      0.146\,Mn_2O_3 + 0.06569\,MnO + 0.08029\,MnO_2 + 0.2847\,Ti_2O_3 + 0.1496\,TiO_2 + 0.281\,TiMn_2O_4 + 0.0292\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.0200\,MnO_2 + 0.020
1317
                                                                                                 -0.178
 1318
                                                                                                 -0.453
                                                                                                                                                      Mn_2O_3 + 4MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7TiMnO_3
 1319
                                                                                                                                                       0.1719\,Mn_2O_3 + 0.08133\,MnO + 0.09057\,MnO_2 + 0.2292\,Ti_3O_5 + 0.07024\,TiO + 0.2421\,TiMn_2O_4 + 0.01848\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.08133\,MnO_3 + 0.08133\,MnO_4 + 0.09057\,MnO_2 + 0.02922\,Ti_3O_5 + 0.07024\,TiO + 0.2421\,TiMn_2O_4 + 0.01848\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.08133\,MnO_4 + 0.09057\,MnO_2 + 0.09057\,MnO_2 + 0.09057\,MnO_2 + 0.09057\,MnO_3 + 0.09057\,
                                                                                                 -0.190
 1320
                                                                                                 -0.142
                                                                                                                                                      Mn_2O_3 + MnO + MnO_2 + 4Ti_3O_5 + TiO_2 + 9TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 22TiMnO_3
 1321
                                                                                                 -0.243
                                                                                                                                                      0.08271 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.02256 \,\mathrm{MnO} + 0.06015 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2932 \,\mathrm{TiO} + 0.3308 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3759 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.07519 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1322
                                                                                                 -0.351
                                                                                                                                                      Mn_2O_3 + 5MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7TiMnO_3
 1323
                                                                                                 -0.206
                                                                                                                                                      0.2078 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.09091 \,\mathrm{MnO} + 0.1039 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1688 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.03896 \,\mathrm{TiO} + 0.2468 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.05195 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1324
                                                                                                 -0.167
                                                                                                                                                      0.2044 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.09459 \,\mathrm{MnO} + 0.103 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1622 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05912 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2483 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.03041 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1325
                                                                                                 -0.240
                                                                                                                                                      0.1821 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.07143 \,\mathrm{MnO} + 0.2393 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{TiO} + 0.1393 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2821 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.07857 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1326
                                                                                                 -0.174
                                                                                                                                                      0.1984 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.09127 \,\mathrm{MnO} + 0.2044 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05754 \,\mathrm{TiO} + 0.07341 \,\mathrm{TiO_2} + 0.256 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.03175 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1327
                                                                                                 -0.451
                                                                                                                                                      6 \text{ Mn}_2 \text{O}_3 + \text{Mn}_2 + \text{Ti}_2 \text{O}_3 + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 7 \text{Ti}_2 + \text{Ti}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 13 \text{Ti}_3 \text{Mn}_3
 1328
                                                                                                 -0.188
                                                                                                                                                      0.1991 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1019 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.1065 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.162 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05093 \text{ Ti}_3\text{O}_4 + 0.009259 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4 + 0.009259 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3 + 0.1019 \text{ Mn}_2\text{O}_4 + 0.009259 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4 + 0.009259 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4 + 0.009259 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow 
 1329
                                                                                                 -0.145
                                                                                                                                                       Mn_2O_3 + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3Ti_3O_5 + TiO_2 + 9TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 21TiMnO_3
 1330
                                                                                                 -0.226
                                                                                                                                                      0.1712 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09589 \text{ MnO}_2 + 0.2397 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1096 \text{ TiO} + 0.1301 \text{ TiO}_2 + 0.2808 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.0411 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1331
                                                                                                 -0.284
                                                                                                                                                      Mn_2O_3 + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3 TiO + TiO_2 + 4 TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 11 TiMnO_3
 1332
                                                                                                 -0.175
                                                                                                                                                      0.2297 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.09459 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1486 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.04054 \, \text{Ti} \, \text{O} + 0.05405 \, \text{Ti} \, \text{O}_2 + 0.2703 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.02703 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.0486 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.04054 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.05405 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_7 + 0.2703 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_7 + 0.02703 \, \text{O}_7 \longrightarrow \text{Ti}_7 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_7 + 0.02703 \, \text{O}_7 \longrightarrow \text{Ti}_7 \, 
 1333
                                                                                                 -0.235
                                                                                                                                                     0.2715 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08616 \text{ MnO} + 0.09922 \text{ MnO}_2 + 0.141 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.218 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06397 \text{ TiO} + 0.02611 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1334
                                                                                                 -0.255
                                                                                                                                                      Mn_3O_4 + 8MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 12TiMnO_3
 1335
                                                                                                 -0.187
                                                                                                                                                      0.1754 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05263 \,\mathrm{MnO} + 0.07018 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1228 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.193 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1754 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.03509 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1336
                                                                                                 -0.290
                                                                                                                                                      0.2703 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08108 \,\mathrm{MnO} + 0.1081 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1532 \,\mathrm{TiO} + 0.1802 \,\mathrm{TiO_2} + 0.05405 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1337
                                                                                                 -0.309
                                                                                                                                                      0.1369 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.02689 \text{ MnO} + 0.08313 \text{ MnO}_2 + 0.3154 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1296 \text{ TiO} + 0.2396 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1338
                                                                                                 -0.187
                                                                                                                                                      0.1401 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.03865 \text{ MnO} + 0.0628 \text{ MnO}_2 + 0.2995 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1618 \text{ Ti}_2 + 0.2391 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04831 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04831 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn
 1339
                                                                                                 -0.440
                                                                                                                                                       Mn_3O_4 + 3MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7TiMnO_3
 1340
                                                                                                 -0.200
                                                                                                                                                      0.1683 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.0495 \text{ MnO} + 0.06931 \text{ MnO}_2 + 0.2475 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06931 \text{ TiO} + 0.1881 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.0396 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1341
                                                                                                 -0.138
                                                                                                                                                      0.168 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05469 \text{ MnO} + 0.05859 \text{ MnO}_2 + 0.2422 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08203 \text{ TiO}_2 + 0.1914 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.007812 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1342
                                                                                                 -0.248
                                                                                                                                                      0.07212 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 0.009615 \text{ MnO} + 0.05288 \text{ MnO}_2 + 0.2981 \text{ TiO} + 0.3413 \text{ TiO}_2 + 0.3606 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.08654 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1343
                                                                                                 -0.220
                                                                                                                                                      0.3021 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.09362 \text{ MnO} + 0.1291 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2043 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.0539 \text{ TiO} + 0.07518 \text{ TiO}_2 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1344
                                                                                                 -0.217
                                                                                                                                                      0.1953 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05336 \text{ MnO} + 0.1121 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1857 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03842 \text{ TiO} + 0.1804 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.07044 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.07044 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Nn}_3\text{O}_4 + 0.07044 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Nn}_3\text{O}_4 + 0.07044 \text{ O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Nn}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Nn}_3\text{O}_4 + 0.07044 \text{ O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Nn}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Nn}
 1345
                                                                                                 -0.176
                                                                                                                                                      0.194 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05686 \,\mathrm{MnO} + 0.1104 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1773 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06689 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1806 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.04682 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1346
                                                                                                 -0.251
                                                                                                                                                      0.1663 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.03926 \,\mathrm{MnO} + 0.2564 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1039 \,\mathrm{TiO} + 0.1524 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2309 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.097 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1347
                                                                                                 -0.181
                                                                                                                                                     0.1875 \text{ Mn}_3\text{O4} + 0.05469 \text{ MnO} + 0.2227 \text{ Ti}_3\text{O5} + 0.05859 \text{ TiO} + 0.08203 \text{ TiO}_2 + 0.1914 \text{ TiMn}_2\text{O4} + 0.04688 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1348
                                                                                                 -0.395
                                                                                                                                                      3 \text{ Mn}_3\text{O4} + \text{Mn}_{O2} + \text{Ti}_2\text{O3} + \text{Ti}_3\text{O5} + 4 \text{Ti}_{O} + \text{Ti}_{O2} + \text{O2} \longrightarrow 10 \text{ Ti}_{O3}
1349
                                                                                                 -0.206
                                                                                                                                                      0.1884 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07594 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.1144 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1815 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04734 \text{ Ti}\text{O} + 0.1795 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03945 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03945 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.03945 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.03945 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2 \longrightarrow
```

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                                                                                                                                                                                              Reaction
 1350
                                                                                                                                      -0.161
                                                                                                                                                                                                              0.1892\,Mn_3O_4 + 0.06851\,MnO_2 + 0.1145\,Ti_2O_3 + 0.1759\,Ti_3O_5 + 0.06135\,TiO_2 + 0.182\,TiMn_2O_4 + 0.01636\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1351
                                                                                                                                      -0.243
                                                                                                                                                                                                             0.1567 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07511 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2575 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1116 \,\mathrm{TiO} + 0.1459 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2275 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.06867 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1352
                                                                                                                                      -0.171
                                                                                                                                                                                                              0.1827 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06731 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2212 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06731 \,\mathrm{TiO} + 0.07692 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1923 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.01923 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1353
                                                                                                                                      -0.190
                                                                                                                                                                                                              0.2089 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1034 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1677 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.03903 \,\mathrm{TiO} + 0.06435 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1867 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.05063 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1354
                                                                                                                                      -0.367
                                                                                                                                                                                                              6 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 7 \text{ TiMnO}_3
                                                                                                                                                                                                              0.1432\,MnO + 0.1686\,MnO_2 + 0.09007\,Ti_2O_3 + 0.1478\,Ti_3O_5 + 0.03233\,TiO + 0.3441\,TiMn_2O_4 + 0.05081\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3O_4 + 0.05081\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3O_5 + 0.05081\,O_2 \longrightarrow TiMnO_5 
 1355
                                                                                                                                      -0.200
 1356
                                                                                                                                      -0.168
                                                                                                                                                                                                             0.1463 \text{ MnO} + 0.1631 \text{ MnO}_2 + 0.08873 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1415 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05276 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.3453 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03357 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03357 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1415 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05276 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.3453 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03357 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1415 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05276 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.3453 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03357 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1415 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05276 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.3453 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03357 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1415 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05276 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.3453 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03357 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.01415 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05276 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.3453 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03357 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.01415 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05276 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.03453 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.01415 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05276 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.03453 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.01415 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05276 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.03453 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.01415 
 1357
                                                                                                                                      -0.231
                                                                                                                                                                                                              0.1192 \text{ MnO} + 0.1554 \text{ MnO}_2 + 0.2124 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.08808 \text{ TiO} + 0.1244 \text{ TiO}_2 + 0.3627 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.07254 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1358
                                                                                                                                      -0.172
                                                                                                                                                                                                              0.142 \text{ MnO} + 0.1591 \text{ MnO}_2 + 0.179 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.0483 \text{ TiO} + 0.06534 \text{ TiO}_2 + 0.3494 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.03409 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1359
                                                                                                                                      -0.190
                                                                                                                                                                                                             0.1761 \text{ MnO} + 0.06818 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1278 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.008523 \text{ TiO} + 0.05966 \text{ TiO}_2 + 0.4119 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1023 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1360
                                                                                                                                      -0.161
                                                                                                                                                                                                              0.1907 \text{ MnO}_2 + 0.07732 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1211 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03351 \text{ TiO} + 0.04381 \text{ TiO}_2 + 0.4046 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.02062 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1361
                                                                                                                                      -0.229
                                                                                                                                                                                                              0.1345 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1989 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.06439 \text{ MnO} + 0.07008 \text{ MnO}_2 + 0.142 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2159 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06818 \text{ TiO} + 0.01136 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1362
                                                                                                                                      -0.242
                                                                                                                                                                                                              Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 9 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 4 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 15 TiMnO_3
 1363
                                                                                                                                      -0.183
                                                                                                                                                                                                              0.09452 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1366 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.0421 \text{ MnO} + 0.05242 \text{ MnO}_2 + 0.1279 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.197 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1533 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.02065 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1364
                                                                                                                                      -0.283
                                                                                                                                                                                                              0.1373 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1961 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05882 \,\mathrm{MnO} + 0.07843 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1569 \,\mathrm{TiO} + 0.1765 \,\mathrm{TiO_2} + 0.03922 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1365
                                                                                                                                                                                                              0.08475\,Mn_2O_3 + 0.1017\,Mn_3O_4 + 0.01695\,MnO + 0.0678\,MnO_2 + 0.322\,Ti_2O_3 + 0.1356\,TiO + 0.2203\,TiMn_2O_4 + 0.1017\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.0000\,TiMn_2O_4 + 0.00000\,TiMn_2O_4 + 0.0000\,TiMn_2O_4 + 0.0000\,T
                                                                                                                                      -0.309
 1366
                                                                                                                                      -0.184
                                                                                                                                                                                                                0.07778 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1074 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.02963 \, \text{MnO} + 0.04815 \, \text{MnO}_2 + 0.3074 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.163 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_2 + 0.2222 \, \text{Ti}_3 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.03704 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3 \, \text{MnO}_3 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_4 + 0.02963 \, \text{MnO}_4 + 0.02963 \, 
 1367
                                                                                                                                      -0.385
                                                                                                                                                                                                              Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3 TiO + TiO_2 + 0.5 O_2 \longrightarrow 7 TiMnO_3
 1368
                                                                                                                                      -0.198
                                                                                                                                                                                                              0.09152 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1306 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.03908 \text{ MnO} + 0.05243 \text{ MnO}_2 + 0.2526 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07531 \text{ TiO} + 0.1668 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.02669 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1369
                                                                                                                                      -0.144
                                                                                                                                                                                                                Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + MnO_2 + 5Ti_3O_5 + TiO_2 + 9TiMn_2O_4 + O_2 \longrightarrow 25TiMnO_3
 1370
                                                                                                                                      -0.248
                                                                                                                                                                                                              0.04762 \text{ Mn}_2 \text{O}_3 + 0.05128 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 0.003663 \text{ MnO} + 0.04396 \text{ MnO}_2 + 0.304 \text{ TiO} + 0.3443 \text{ TiO}_2 + 0.3516 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.08059 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1371
                                                                                                                                      -0.212
                                                                                                                                                                                                             0.1454 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2136 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06825 \,\mathrm{MnO} + 0.1316 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2018 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06133 \,\mathrm{TiO} + 0.07023 \,\mathrm{TiO_2} + 0.0178 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1372
                                                                                                                                      -0.214
                                                                                                                                                                                                              0.1063 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1471 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04077 \text{ MnO} + 0.1175 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1886 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04636 \text{ TiO} + 0.1527 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04956 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1373
                                                                                                                                      -0.169
                                                                                                                                                                                                              0.1022 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1471 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04489 \text{ MnO} + 0.1172 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.182 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06484 \text{ TiO}_2 + 0.1546 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.02494 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1374
                                                                                                                                      -0.250
                                                                                                                                                                                                              0.09499 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1226 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.02763 \text{ MnO} + 0.2642 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1123 \text{ TiO} + 0.152 \text{ TiO}_2 + 0.2073 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.07945 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 + 0.123 \text{ TiO}_4 + 0.02763 \text{ MnO}_4 + 0.007945 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 + 0.007945 \text{ O}_3 + 0.007945 \text{ O}_4 + 0.007945 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 + 0.007945 \text{ O}_3 + 0.007945 \text{ O}_4 + 0.007945 \text{ O}_3 + 0.007945 \text{ O}_4 + 0.007945 \text{ O}_3 + 0.007945 \text{ O}_4 + 0.007945 \text{ O}_4 + 0.007945 \text{ O}_5 + 0.007945 \text{
 1375
                                                                                                                                      -0.178
                                                                                                                                                                                                              0.09922\,Mn_2O_3 + 0.142\,Mn_3O_4 + 0.0428\,MnO + 0.2286\,Ti_3O_5 + 0.06712\,TiO + 0.08074\,TiO_2 + 0.1663\,TiMn_2O_4 + 0.02724\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3O_4 + 0.02724\,O_2 \longrightarrow TiMO_3O_5 + 0.02724\,O_2 \longrightarrow TiMO_3O_5 + 0.02724\,O_2 \longrightarrow Ti
 1376
                                                                                                                                      -0.403
                                                                                                                                                                                                                Mn_2O_3 + 2.5 Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 4.5 TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 10.5 TiMnO_3
 1377
                                                                                                                                      -0.205
                                                                                                                                                                                                              0.1009 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1446 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05723 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.119 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1852 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05271 \text{ Ti}\text{O} + 0.1536 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02711 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}\text{O}_3 + 0.1852 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05271 \text{ Ti}\text{O}_3 + 0.1536 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02711 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1852 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05271 \text{ Ti}\text{O}_3 + 0.1852 \text{ Ti}\text{O}_3 + 0.05723 \text{ Ti}
 1378
                                                                                                                                      -0.158
                                                                                                                                                                                                              0.09813\,Mn_2O_3 + 0.1464\,Mn_3O_4 + 0.04984\,MnO_2 + 0.1199\,Ti_2O_3 + 0.1807\,Ti_3O_5 + 0.06075\,TiO_2 + 0.1573\,TiMn_2O_4 + 0.003115\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
 1379
                                                                                                                                      -0.244
                                                                                                                                                                                                                0.08824 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1176 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05882 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2647 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1176 \,\mathrm{TiO} + 0.1471 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2059 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.05882 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1380
                                                                                                                                      -0.170
                                                                                                                                                                                                              0.09524\,Mn_2O_3 + 0.141\,Mn_3O_4 + 0.04945\,MnO_2 + 0.2271\,Ti_3O_5 + 0.07326\,TiO + 0.07692\,TiO_2 + 0.1685\,TiMn_2O_4 + 0.007326\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
 1381
                                                                                                                                      -0.190
                                                                                                                                                                                                             0.1094 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1562 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1094 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1719 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04687 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.0625 \text{ Ti}_3\text{O}_2 + 0.1562 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.03125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.03125 \text{ O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.03125 \text{ O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.03125 \text{ O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{Nn}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{Nn}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3 \longrightarrow \text{Ti
 1382
                                                                                                                                      -0.311
                                                                                                                                                                                                                Mn_2O_3 + 4MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + 0.5O_2 \longrightarrow 7TiMnO_3
 1383
                                                                                                                                      -0.203
                                                                                                                                                                                                              0.1807\,Mn_2O_3 + 0.08434\,MnO + 0.09639\,MnO_2 + 0.1084\,Ti_2O_3 + 0.1687\,Ti_3O_5 + 0.04819\,TiO + 0.2289\,TiMn_2O_4 + 0.0241\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.0847\,MnO_3 + 0.08434\,MnO_4 + 0.09639\,MnO_2 + 0.1084\,Ti_2O_3 + 0.1687\,Ti_3O_5 + 0.04819\,TiO + 0.2289\,TiMn_2O_4 + 0.0241\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.0847\,MnO_3 + 0.0847\,MnO_3 + 0.0847\,MnO_4 + 0.09639\,MnO_2 + 0.1084\,Ti_2O_3 + 0.1687\,Ti_3O_5 + 0.04819\,TiO + 0.2289\,TiMn_2O_4 + 0.0241\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.0847\,MnO_3 +
 1384
                                                                                                                                      -0.160
                                                                                                                                                                                                             0.1784\,Mn_2O_3 + 0.08852\,MnO + 0.0899\,MnO_2 + 0.1093\,Ti_2O_3 + 0.1646\,Ti_3O_5 + 0.05533\,TiO_2 + 0.2324\,TiMn_2O_4 + 0.002766\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.0899\,MnO_2 + 0.0899\,MnO_3 +
 1385
                                                                                                                                      -0.238
                                                                                                                                                                                                             0.1563 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.0649 \,\mathrm{MnO} + 0.09145 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2448 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1091 \,\mathrm{TiO} + 0.1357 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2655 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.0531 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 1386
                                                                                                                                      -0.171
                                                                                                                                                                                                              0.1732 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.08497 \text{ MnO} + 0.08824 \text{ MnO}_2 + 0.2075 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06699 \text{ TiO} + 0.07026 \text{ TiO}_2 + 0.2402 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.006536 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 1387
                                                                                                                                      -0.189
                                                                                                                                                                                                              0.2076 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09357 \text{ MnO} + 0.09649 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.155 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03801 \text{ TiO} + 0.05848 \text{ TiO}_2 + 0.2456 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.04094 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                                                                                                                                                                              Mn_2O_3 + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + 4TiMn_2O_4 + 0.5O_2 \longrightarrow 11TiMnO_3
 1388
                                                                                                                                      -0.193
 1389
                                                                                                                                      -0.215
                                                                                                                                                                                                             0.2721\,Mn_3O_4 + 0.08834\,MnO + 0.09541\,MnO_2 + 0.1319\,Ti_2O_3 + 0.2014\,Ti_3O_5 + 0.06243\,TiO + 0.06949\,TiO_2 + 0.01413\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.01413\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.01413\,O_3 \longrightarrow TiMnO_3 \longrightarrow TiMnO_3
 1390
                                                                                                                                      -0.213
                                                                                                                                                                                                             0.177 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05121 \text{ MnO} + 0.07457 \text{ MnO}_2 + 0.115 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1842 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04582 \text{ TiO} + 0.1716 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.04672 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.05121 \text{ MnO}_3 + 0.04672 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 + 0.04672 \text{ O}_3 + 0.04672 \text{ 
 1391
                                                                                                                                      -0.170
                                                                                                                                                                                                             0.1771 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05499 \text{ MnO} + 0.0671 \text{ MnO}_2 + 0.1146 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.178 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06337 \text{ TiO}_2 + 0.1733 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.02423 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.02423 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMnO}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_4 \longrightarrow \text{TiM
 1392
                                                                                                                                      -0.248
                                                                                                                                                                                                              0.1481 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.03704 \text{ MnO} + 0.07407 \text{ MnO}_2 + 0.2593 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ TiO} + 0.1481 \text{ TiO}_2 + 0.2222 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.07407 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 + 0.1111 \text{ TiO}_4 + 0.07407 \text{ O}_4 + 0.07407 \text{
 1393
                                                                                                                                      -0.178
                                                                                                                                                                                                              0.1711 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05263 \text{ MnO} + 0.06579 \text{ MnO}_2 + 0.2237 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06579 \text{ TiO} + 0.07895 \text{ TiO}_2 + 0.1842 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.02632 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ Civil No.}
 1394
                                                                                                                                      -0.198
                                                                                                                                                                                                              0.1962 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05577 \text{ MnO} + 0.1038 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1702 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.0375 \text{ TiO} + 0.06635 \text{ TiO}_2 + 0.1779 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.05769 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3 + 0.1702 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.0375 \text{ TiO}_3 + 0.06635 \text{ TiO}_2 + 0.1779 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.05769 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3 + 0.0769 \text{ O}_3 + 0.0769 \text{ O}_
 1395
                                                                                                                                      -0.188
                                                                                                                                                                                                                0.1904 \text{ Mn}_3\text{O4} + 0.07295 \text{ MnO}_2 + 0.1068 \text{ Ti}_2\text{O3} + 0.1673 \text{ Ti}_3\text{O5} + 0.04626 \text{ TiO} + 0.0605 \text{ TiO}_2 + 0.1779 \text{ TiMn}_2\text{O4} + 0.02847 \text{ O2} \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1396
                                                                                                                                      -0.185
                                                                                                                                                                                                             0.1458 \text{ MnO} + 0.1667 \text{ MnO}_2 + 0.08333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1354 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03125 \text{ TiO} + 0.05208 \text{ TiO}_2 + 0.3438 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.04167 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ TiMnO}_3 + 0.04167 \text{ O}_4 + 0.04167 \text{ O}_5 \rightarrow \text{TiMnO}_3 + 0.041
```

```
Reaction
                                            \Delta_r H (eV/atom)
 1397
                                                                                                -0.397
                                                                                                                                                    Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 3 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 3 TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 9 TiMnO_3
1398
                                                                                                -0.211
                                                                                                                                                   0.09709\,Mn_2O_3 + 0.1373\,Mn_3O_4 + 0.04022\,MnO + 0.05687\,MnO_2 + 0.1193\,Ti_2O_3 + 0.1872\,Ti_3O_5 + 0.05132\,TiO + 0.1484\,TiMn_2O_4 + 0.03329\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3O_4 + 0.0329\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3O_4 + 0.0320\,O_2 \longrightarrow 
 1399
                                                                                                -0.165
                                                                                                                                                   0.09397 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1385 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.04448 \, \text{MnO} + 0.0495 \, \text{MnO}_2 + 0.1198 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1822 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.06241 \, \text{Ti}_{O_2} + 0.1514 \, \text{Ti}_{Mn_2} \, \text{O}_4 + 0.01004 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{MnO_3} \, \text{Ti}_{O_3} + 0.1822 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.06241 \, \text{Ti}_{O_2} + 0.1514 \, \text{Ti}_{Mn_2} \, \text{O}_4 + 0.01004 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{MnO_3} \, \text{Ti}_{O_3} + 0.01004 \, \text{O}_3 +
 1400
                                                                                                -0.248
                                                                                                                                                   1401
                                                                                                                                                   0.09122\,Mn_2O_3 + 0.1334\,Mn_3O_4 + 0.04223\,MnO + 0.04899\,MnO_2 + 0.2289\,Ti_3O_5 + 0.07179\,TiO + 0.07855\,TiO_2 + 0.163\,TiMn_2O_4 + 0.01351\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.09122\,MnO_3 + 0.
                                                                                                -0.176
 1402
                                                                                                -0.196
                                                                                                                                                   0.1052 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1484 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04323 \text{ MnO} + 0.1095 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1736 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04539 \text{ TiO} + 0.06412 \text{ TiO}_2 + 0.1506 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.03746 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 + 0.1095 \text{ TiMnO}_3 + 0.1095 \text
 1403
                                                                                                -0.188
                                                                                                                                                   0.1005 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1467 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05435 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.1114 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1712 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05163 \text{ TiO} + 0.05978 \text{ TiO}_2 + 0.1522 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.0163 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_4 + 0.0163 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_4 + 0.0163 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_4 + 0.0163 \text{ O}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_3 \longrightarrow
 1404
                                                                                                -0.187
                                                                                                                                                   0.1812\,Mn_2O_3 + 0.08696\,MnO + 0.0942\,MnO_2 + 0.1014\,Ti_2O_3 + 0.1558\,Ti_3O_5 + 0.0471\,TiO + 0.05435\,TiO_2 + 0.2283\,TiMn_2O_4 + 0.01449\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.01449\,O_4 + 0.01440\,O_4 + 0.
 1405
                                                                                                -0.195
                                                                                                                                                   0.1786\,Mn_3O_4 + 0.05357\,MnO + 0.07143\,MnO_2 + 0.1071\,Ti_2O_3 + 0.1696\,Ti_3O_5 + 0.04464\,TiO + 0.0625\,TiO_2 + 0.1696\,TiMn_2O_4 + 0.03571\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
 1406
                                                                                                -0.194
                                                                                                                                                   0.09649\,Mn_2O_3 + 0.1391\,Mn_3O_4 + 0.04261\,MnO + 0.05388\,MnO_2 + 0.1115\,Ti_2O_3 + 0.1729\,Ti_3O_5 + 0.05013\,TiO + 0.0614\,TiO_2 + 0.1466\,TiMn_2O_4 + 0.02256\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3O_4 + 0.02256
 1407
                                                                                                -0.419
                                                                                                                                                   NiO + 0.5 Ti_2O_3 + 0.25 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
                                                                                                                                                   NiO + 0.3333 Ti_3O_5 + 0.1667 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1408
                                                                                                -0.296
 1409
                                                                                                -0.918
                                                                                                                                                 NiO + TiO + 0.5 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
                                                                                                                                                   NiO + 0.1321 Ti_2O_3 + 0.2453 Ti_3O_5 + 0.1887 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1410
                                                                                                -0.328
 1411
                                                                                                -0.490
                                                                                                                                                  NiO + 0.4286 Ti_2O_3 + 0.1429 TiO + 0.2857 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1412
                                                                                                -0.328
                                                                                                                                                  NiO + 0.381 Ti_2O_3 + 0.2381 TiO_2 + 0.1905 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1413
                                                                                                -0.324
                                                                                                                                                   NiO + 0.3182 Ti_3O_5 + 0.04545 TiO + 0.1818 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1414
                                                                                                -0.264
                                                                                                                                                   NiO + 0.2927 Ti_3O_5 + 0.122 TiO_2 + 0.1463 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1415
                                                                                                -0.429
                                                                                                                                                   NiO + 0.4444 TiO + 0.5556 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1416
                                                                                                -0.337
                                                                                                                                                   NiO + 0.129 Ti_2O_3 + 0.2419 Ti_3O_5 + 0.01613 TiO + 0.1935 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1417
                                                                                                -0.299
                                                                                                                                                   NiO + 0.1186 Ti_2O_3 + 0.2203 Ti_3O_5 + 0.1017 TiO_2 + 0.1695 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1418
                                                                                                -0.390
                                                                                                                                                  NiO + 0.3333 Ti_2O_3 + 0.1111 TiO + 0.2222 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1419
                                                                                                -0.290
                                                                                                                                                   NiO + 0.28 Ti_3O_5 + 0.04 TiO + 0.12 TiO_2 + 0.16 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1420
                                                                                                -0.307
                                                                                                                                                   NiO + 0.1159 Ti_2O_3 + 0.2174 Ti_3O_5 + 0.01449 TiO + 0.1014 TiO_2 + 0.1739 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 1421
                                                                                                -0.452
                                                                                                                                                  0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{TiO} + 0.1667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 1422
                                                                                                -0.324
                                                                                                                                                   2 \operatorname{MnO} + 0.5 \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O}_3 + 0.25 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{TiMn}_2 \operatorname{O}_4
 1423
                                                                                                -0.237
                                                                                                                                                   2 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
 1424
                                                                                                -0.681
                                                                                                                                                   2 \text{ MnO} + \text{TiO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{ O}_4
 1425
                                                                                                -0.436
                                                                                                                                                   0.3208 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.4528 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{TiO} + 0.1132 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 1426
                                                                                                -0.278
                                                                                                                                                   Mn_2O_3 + 10MnO + 3Ti_2O_3 + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
 1427
                                                                                                -0.206
                                                                                                                                                   Mn_2O_3 + 16MnO + 3Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 9TiMn_2O_4
 1428
                                                                                                -0.455
                                                                                                                                                   0.8095 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.381 \,\mathrm{MnO} + \mathrm{TiO} + 0.09524 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 1429
                                                                                                -0.267
                                                                                                                                                    Mn_3O_4 + 9MnO + 3Ti_2O_3 + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
 1430
                                                                                                -0.198
                                                                                                                                                   Mn_3O_4 + 15MnO + 3Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 9TiMn_2O_4
 1431
                                                                                                -0.471
                                                                                                                                                   0.6098 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1707 \,\mathrm{MnO} + \mathrm{TiO} + 0.1951 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 1432
                                                                                                -0.432
                                                                                                                                                   0.5909 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2273 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.09091 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 1433
                                                                                                -0.350
                                                                                                                                                   Mn_3O_4 + 0.25 Ti_2O_3 + TiO + 0.125 O_2 \longrightarrow 1.5 TiMn_2O_4
 1434
                                                                                                -0.290
                                                                                                                                                   Mn_3O_4 + 0.1667 Ti_3O_5 + TiO + 0.08333 O_2 \longrightarrow 1.5 TiMn_2O_4
 1435
                                                                                                -0.382
                                                                                                                                                   6 \operatorname{Mn_3O_4} + 8 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 9 \operatorname{TiMn_2O_4}
 1436
                                                                                                -0.382
                                                                                                                                                   5 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 7 \text{ TiO} + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 8 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
 1437
                                                                                                -0.291
                                                                                                                                                    11 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 6 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
 1438
                                                                                                -0.214
                                                                                                                                                   17 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + \text{O}_2 \longrightarrow 9 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
 1439
                                                                                                -0.614
                                                                                                                                                   5 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ TiO} + \text{O}_2 \longrightarrow 3 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
 1440
                                                                                                -0.260
                                                                                                                                                   2 \text{ MnO} + 0.1321 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2453 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1887 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
 1441
                                                                                                -0.375
                                                                                                                                                   2 \text{ MnO} + 0.4286 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ TiO} + 0.2857 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
 1442
                                                                                                                                                   2 \text{ MnO} + 0.381 \text{ Ti}_{2}\text{O}_{3} + 0.2381 \text{ Ti}_{2}\text{O}_{2} + 0.1905 \text{ O}_{2} \longrightarrow \text{TiMn}_{2}\text{O}_{4}
                                                                                                -0.260
1443
                                                                                                -0.219 5 MnO + Ti<sub>2</sub>O<sub>3</sub> + TiMnO<sub>3</sub> + 0.5 O<sub>2</sub> \longrightarrow 3 TiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub>
```

	$\Delta_r H$ (eV/atom)	Reaction
1444	-0.257	$2 \text{ MnO} + 0.3182 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.04545 \text{ TiO} + 0.1818 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4$
1445	-0.214	$2 \text{ MnO} + 0.2927 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.122 \text{ TiO}_2 + 0.1463 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4$
1446	-0.180	$7 \text{ MnO} + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiMnO}_3 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 4 \text{TiMn}_2\text{O}_4$
1447	-0.332	$2 \text{ MnO} + 0.4444 \text{ TiO} + 0.5556 \text{ TiO}_2 + 0.2222 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4$
1448	-0.345	$3 \text{ MnO} + \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 2 \text{TiMn}_2 \text{O}_4$
1449	-0.247	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 11 MnO + 4 Ti_2O_3 + O_2 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4$
1450	-0.185	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 19 MnO + 4 Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 12 TiMn_2O_4$
1451	-0.450	$0.3051 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.4237 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1186 \mathrm{MnO} + \mathrm{TiO} + 0.1356 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1452	-0.424	$0.2903 \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.4194 \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.1613 \text{Mn}_2 + \text{TiO} + 0.06452 \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4$
1453	-0.375	$Mn_2O_3 + 6Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + 8TiO + O_2 \longrightarrow 10TiMn_2O_4$
1454	-0.345	$Mn_2O_3 + 8Mn_3O_4 + Ti_3O_5 + 10TiO + O_2 \longrightarrow 13TiMn_2O_4$
1455	-0.384	$Mn_2O_3 + 6Mn_3O_4 + 9TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 10TiMn_2O_4$
1456	-0.384	$Mn_2O_3 + 5Mn_3O_4 + 8TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 9TiMn_2O_4$
1457	-0.265	$Mn_2O_3 + 13MnO + MnO_2 + 4Ti_2O_3 + O_2 \longrightarrow 8TiMn_2O_4$
1458	-0.197	$Mn_2O_3 + 21 MnO + MnO_2 + 4 Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 12 TiMn_2O_4$
1459	-0.561	$Mn_2O_3 + 5MnO + MnO_2 + 4TiO + O_2 \longrightarrow 4TiMn_2O_4$
1460	-0.216	$Mn_2O_3 + 8MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 0.5O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4$
1461	-0.359	$Mn_2O_3 + MnO + 0.25 Ti_2O_3 + TiO + 0.125 O_2 \longrightarrow 1.5 TiMn_2O_4$
1462	-0.246	$Mn_2O_3 + 12MnO + 3Ti_2O_3 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$
1463	-0.239	$Mn_2O_3 + 11 MnO + 3 Ti_2O_3 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4$
1464	-0.331	$Mn_2O_3 + MnO + 0.1667 Ti_3O_5 + TiO + 0.08333 O_2 \longrightarrow 1.5 TiMn_2O_4$
1465	-0.190	$Mn_2O_3 + 18MnO + 3Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 10TiMn_2O_4$
1466	-0.186	$Mn_2O_3 + 17MnO + 3Ti_3O_5 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 10TiMn_2O_4$
1467	-0.454	$Mn_2O_3 + 6MnO + 3TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 4TiMn_2O_4$
1468	-0.443	$Mn_2O_3 + 5 MnO + 3 TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 4 TiMn_2O_4$
1469	-0.257	$Mn_3O_4 + 12MnO + MnO_2 + 4Ti_2O_3 + O_2 \longrightarrow 8TiMn_2O_4$
1470	-0.191	$Mn_3O_4 + 20 MnO + MnO_2 + 4 Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 12 TiMn_2O_4$
1471	-0.451	$0.54 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.16 \mathrm{MnO} + 0.22 \mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.12 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1472	-0.203	$Mn_3O_4 + 7 MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 0.5 O_2 \longrightarrow 5 TiMn_2O_4$ $Mn_3O_4 + Mn_3O_3 + Mn_3O_4 + 0.5 TiO_3 + 0.25 O_3 \longrightarrow 3 TiMn_3O_4$
1473	-0.331	$Mn_3O_4 + MnO + 0.5 Ti_2O_3 + TiO + 0.25 O_2 \longrightarrow 2 TiMn_2O_4$ $Mn_3O_4 + MnO + 2 TiO_4 + O_2 + 2 TiMn_2O_4$
1474	-0.237	$Mn_3O_4 + 11MnO + 3Ti_2O_3 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$
1475	-0.230	$Mn_3O_4 + 10MnO + 3Ti_2O_3 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$ $Mn_2O_4 + MnO_3 + O_3222 Ti_2O_5 + TiO_4 + O_1667O_2 \longrightarrow 2TiMn_2O_4$
1476 1477	-0.287 -0.184	$Mn_3O_4 + MnO + 0.3333 Ti_3O_5 + TiO + 0.1667 O_2 \longrightarrow 2 TiMn_2O_4$ $Mn_3O_4 + 17MnO + 3 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_3 \longrightarrow 10 TiMn_3O_4$
1477	-0.184 -0.179	$Mn_3O_4 + 17 MnO + 3 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 10 TiMn_2O_4$ $Mn_3O_4 + 16 MnO + 3 Ti_3O_5 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 10 TiMn_2O_4$
1478	-0.179	$Mn_3O_4 + 10 MnO + 3 TiO_5 + TiVinO_3 + O_2 \longrightarrow 10 TiVin_2O_4$ $Mn_3O_4 + 5 MnO + 3 TiO_4 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 4 TiMn_2O_4$
1479	-0.438	$Mn_3O_4 + MnO + 1.5 TiO + TiMnO_3 + 0.25 O_2 \longrightarrow 4 TiMn_2O_4$ $Mn_3O_4 + MnO + 1.5 TiO + TiMnO_3 + 0.25 O_2 \longrightarrow 2.5 TiMn_2O_4$
1481	-0.379	$7 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 9 \text{TiO} + \text{O}_2 \longrightarrow 11 \text{TiMn}_2 \text{O}_4$
1482	-0.350	$9 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + \text{Mn}_{02} + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + \text{11 TiO} + \text{O}_2 \longrightarrow 14 \text{TiMn}_2 \text{O}_4$
1483	-0.387	$7 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + \text{Mn}_{02} + 113 \text{O}_5 + 111 \text{ HO} + \text{O}_2 \longrightarrow 141 \text{ HMn}_2 \text{O}_4$ $7 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + \text{Mn}_{02} + 10 \text{ TiO}_1 + \text{TiO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 11 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4$
1484	-0.387	$6 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO_2} + 9 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiMnO_3} + O_2 \longrightarrow 10 \operatorname{TiMn_2O_4}$
1485	-0.315	$10 \mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{Ti_2O_3} + \mathrm{Ti_3O_5} + 10 \mathrm{TiO} + \mathrm{O_2} \longrightarrow 15 \mathrm{TiMn_2O_4}$
1486	-0.340	$8 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O}_3 + 9 \operatorname{TiO}_2 + \operatorname{O}_2 \longrightarrow 12 \operatorname{TiMn_2O_4}$
1487	-0.336	$7 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O_3} + 8 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiMnO_3} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 11 \operatorname{TiMn_2O_4}$
1488	-0.321	$10 \operatorname{Mn}_3 \operatorname{O}_4 + \operatorname{Ti}_3 \operatorname{O}_5 + 11 \operatorname{Ti} \operatorname{O}_4 + \operatorname{O}_2 \longrightarrow 15 \operatorname{Ti} \operatorname{Mn}_2 \operatorname{O}_4$
1489	-0.317	$9 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti_3O_5} + 10 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiMnO_3} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 14 \operatorname{TiMn_2O_4}$
1490	-0.344	$7 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 9 \text{ TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 11 \text{ TiMn}_2\text{O}_4$

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                      Reaction
1491
                        -0.232
                                      9 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
1492
                        -0.377
                                      5 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 3 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
1493
                        -0.257
                                      13 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + \text{Ti}_2 \text{O}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 7 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
1494
                        -0.251
                                      12 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 7 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
1495
                        -0.298
                                      7 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 4 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
1496
                        -0.198
                                      19 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + \text{Ti}_{2} + \text{O}_2 \longrightarrow 10 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
1497
                        -0.194
                                      18 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 10 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
1498
                        -0.474
                                      7 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ TiO} + \text{TiO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 4 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
1499
                        -0.463
                                      6 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ TiO} + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 4 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
1500
                        -0.266
                                      2 \text{ MnO} + 0.129 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2419 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.01613 \text{ TiO} + 0.1935 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1501
                        -0.239
                                      2 \text{ MnO} + 0.1186 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.2203 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1017 \text{ Ti}_{O_2} + 0.1695 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
                                      11 \text{ MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 6 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
1502
                        -0.228
1503
                        -0.304
                                      2 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1111 \text{ TiO} + 0.2222 \text{ TiO}_2 + 0.2222 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
1504
                        -0.335
                                      7 \text{ MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 4 \text{TiMn}_2\text{O}_4
1505
                                      7 \text{ MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}\text{O}_2 + \text{Ti}\text{MnO}_3 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 4 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4
                        -0.178
1506
                        -0.232
                                      2 \text{ MnO} + 0.28 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.04 \text{ TiO} + 0.12 \text{ TiO}_2 + 0.16 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
1507
                        -0.280
                                      9 \text{ MnO} + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 5 \text{TiMn}_2\text{O}_4
1508
                        -0.154
                                      9 \text{ MnO} + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{Ti}\text{O}_2 + \text{Ti}\text{MnO}_3 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 5 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4
1509
                        -0.247
                                      5 \text{ MnO} + \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 3 \text{ TiMn}_2 \text{ O}_4
1510
                        -0.242
                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 14 MnO + MnO_2 + 5 Ti_2O_3 + O_2 \longrightarrow 10 TiMn_2O_4
1511
                        -0.182
                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 24 MnO + MnO_2 + 5 Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 15 TiMn_2O_4
1512
                        -0.438
                                      0.2754 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.3913 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1159 \,\mathrm{MnO} + 0.1594 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.08696 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1513
                        -0.196
                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 17 MnO + Ti_2O_3 + 3 Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 11 TiMn_2O_4
1514
                        -0.414
                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 5MnO + Ti_2O_3 + 3TiO + O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
1515
                        -0.225
                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 13 MnO + 4 Ti_2O_3 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 9 TiMn_2O_4
1516
                        -0.220
                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 12 MnO + 4 Ti_2O_3 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 9 TiMn_2O_4
1517
                        -0.355
                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7MnO + Ti_3O_5 + 3TiO + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
1518
                        -0.175
                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 21 MnO + 4 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 13 TiMn_2O_4
1519
                        -0.171
                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 20 MnO + 4 Ti_3O_5 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 13 TiMn_2O_4
1520
                        -0.431
                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 5MnO + 4TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
1521
                        -0.317
                                      Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + MnO + 2.5 \text{ TiO} + \text{TiMnO}_3 + 0.25 O_2 \longrightarrow 3.5 \text{ TiMn}_2O_4
1522
                        -0.381
                                      Mn_2O_3 + 7Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + 10TiO + O_2 \longrightarrow 12TiMn_2O_4
1523
                        -0.354
                                      Mn_2O_3 + 9Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_3O_5 + 12TiO + O_2 \longrightarrow 15TiMn_2O_4
1524
                        -0.388
                                      Mn_2O_3 + 7Mn_3O_4 + MnO_2 + 11TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 12TiMn_2O_4
1525
                        -0.389
                                      Mn_2O_3 + 6Mn_3O_4 + MnO_2 + 10TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 11TiMn_2O_4
1526
                        -0.321
                                      Mn_2O_3 + 10Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 11TiO + O_2 \longrightarrow 16TiMn_2O_4
1527
                        -0.345
                                      Mn_2O_3 + 8Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + 10TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 13TiMn_2O_4
1528
                        -0.342
                                      Mn_2O_3 + 7Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + 9TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 12TiMn_2O_4
1529
                        -0.326
                                      Mn_2O_3 + 10Mn_3O_4 + Ti_3O_5 + 12TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 16TiMn_2O_4
1530
                        -0.322
                                      Mn_2O_3 + 9Mn_3O_4 + Ti_3O_5 + 11TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 15TiMn_2O_4
1531
                        -0.349
                                      Mn_2O_3 + 7Mn_3O_4 + 10TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 12TiMn_2O_4
1532
                        -0.209
                                      Mn_2O_3 + 19 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3 Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 11 TiMn_2O_4
1533
                        -0.443
                                      Mn_2O_3 + 7MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3TiO + O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4
1534
                        -0.241
                                      Mn_2O_3 + 15MnO + MnO_2 + 4Ti_2O_3 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 9TiMn_2O_4
1535
                        -0.236
                                      Mn_2O_3 + 14MnO + MnO_2 + 4Ti_2O_3 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 9TiMn_2O_4
1536
                        -0.379
                                      Mn_2O_3 + 9MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3TiO + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
1537
                        -0.186
                                      Mn_2O_3 + 23MnO + MnO_2 + 4Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 13TiMn_2O_4
```

	$\Delta_r H$ (eV/atom)	Reaction
1538	-0.182	$Mn_2O_3 + 22 MnO + MnO_2 + 4 Ti_3O_5 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 13 TiMn_2O_4$
1539	-0.460	$Mn_2O_3 + 7MnO + MnO_2 + 4TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4$
1540	-0.451	$Mn_2O_3 + 6MnO + MnO_2 + 4TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4$
1541	-0.293	$Mn_2O_3 + 10 MnO + Ti_2O_3 + TiO + O_2 \longrightarrow 6 TiMn_2O_4$
1542	-0.189	$Mn_2O_3 + 10 MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 + 0.5 O_2 \longrightarrow 6 TiMn_2O_4$
1543	-0.181	$Mn_2O_3 + 9MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4$
1544	-0.276	$Mn_2O_3 + 6MnO + Ti_2O_3 + TiO + TiO_2 + 0.5O_2 \longrightarrow 4TiMn_2O_4$
1545	-0.265	$Mn_2O_3 + 5MnO + Ti_2O_3 + TiO + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 4TiMn_2O_4$
1546	-0.216	$Mn_2O_3 + 13 MnO + 3 Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4$
1547	-0.233	$Mn_2O_3 + 8MnO + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + 0.5O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4$
1548	-0.224	$Mn_2O_3 + 7MnO + Ti_3O_5 + TiO + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4$
1549	-0.174	$Mn_2O_3 + 19MnO + 3Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 11TiMn_2O_4$
1550	-0.365	$Mn_2O_3 + 7 MnO + 3 TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 5 TiMn_2O_4$
1551	-0.203	$Mn_3O_4 + 18 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3 Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 11 TiMn_2O_4$
1552	-0.430	$Mn_3O_4 + 6MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3TiO + O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4$
1553	-0.234	$Mn_3O_4 + 14MnO + MnO_2 + 4Ti_2O_3 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 9TiMn_2O_4$
1554	-0.229	$Mn_3O_4 + 13 MnO + MnO_2 + 4 Ti_2O_3 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 9 TiMn_2O_4$
1555	-0.368	$Mn_3O_4 + 8MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3TiO + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4$
1556	-0.181	$Mn_3O_4 + 22 MnO + MnO_2 + 4 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 13 TiMn_2O_4$
1557	-0.177	$Mn_3O_4 + 21 MnO + MnO_2 + 4 Ti_3O_5 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 13 TiMn_2O_4$
1558	-0.447	$Mn_3O_4 + 6MnO + MnO_2 + 4TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4$
1559	-0.438	$Mn_3O_4 + 5MnO + MnO_2 + 4TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4$
1560	-0.283	$Mn_3O_4 + 9 MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + O_2 \longrightarrow 6 TiMn_2O_4$
1561	-0.178	$Mn_3O_4 + 9MnO + Ti_2O_3 + TiO_2 + 0.5O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4$
1562	-0.171	$Mn_3O_4 + 8MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4$
1563	-0.260	$Mn_3O_4 + 5MnO + Ti_2O_3 + TiO + TiO_2 + 0.5O_2 \longrightarrow 4TiMn_2O_4$
1564	-0.198	$Mn_3O_4 + MnO + 0.25 Ti_2O_3 + TiO + TiMnO_3 + 0.125 O_2 \longrightarrow 2.5 TiMn_2O_4$
1565	-0.208	$Mn_3O_4 + 12MnO + 3Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 8TiMn_2O_4$
1566	-0.220	$Mn_3O_4 + 7MnO + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + 0.5O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4$
1567	-0.180	$Mn_3O_4 + MnO + 0.1667 Ti_3O_5 + TiO + TiMnO_3 + 0.08333 O_2 \longrightarrow 2.5 TiMn_2O_4$
1568	-0.168	$Mn_3O_4 + 18MnO + 3Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 11TiMn_2O_4$
1569	-0.352	$Mn_3O_4 + 6MnO + 3TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4$
1570	-0.326	$11 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + 12 \operatorname{TiO} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 17 \operatorname{TiMn_2O_4}$
1571	-0.350	$9 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_2O_3} + 11 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 14 \operatorname{TiMn_2O_4}$
1572	-0.347	$8 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO_2} + \operatorname{Ti_2O_3} + 10 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiMnO_3} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 13 \operatorname{TiMn_2O_4}$
1573	-0.331	$11 \mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO_2} + \mathrm{Ti_3O_5} + 13 \mathrm{TiO} + \mathrm{TiO_2} + \mathrm{O_2} \longrightarrow 17 \mathrm{TiMn_2O_4}$
1574	-0.328	$10\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO_2} + \mathrm{Ti_3O_5} + 12\mathrm{TiO} + \mathrm{TiMnO_3} + \mathrm{O_2} \longrightarrow 16\mathrm{TiMn_2O_4}$
1575	-0.354	$8 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{MnO_2} + 11 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMnO_3} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 13 \operatorname{TiMn_2O_4}$
1576	-0.303	$12 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + 12 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 18 \operatorname{TiMn_2O_4}$
1577	-0.299	$11 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti_2O_3} + \operatorname{Ti_3O_5} + 11 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiMnO_3} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 17 \operatorname{TiMn_2O_4}$
1578	-0.316	$9 \operatorname{Mn_3O_4} + \operatorname{Ti_2O_3} + 10 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO_2} + \operatorname{TiMnO_3} + \operatorname{O_2} \longrightarrow 14 \operatorname{TiMn_2O_4}$
1579	-0.304	$11 \mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{Ti_3O_5} + 12 \mathrm{TiO} + \mathrm{TiO_2} + \mathrm{TiMnO_3} + \mathrm{O_2} \longrightarrow 17 \mathrm{TiMn_2O_4}$
1580	-0.307	$11 \mathrm{MnO} + \mathrm{MnO}_2 + \mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + \mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + \mathrm{TiO} + \mathrm{O}_2 \longrightarrow 6 \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4$
1581	-0.202	$11 \mathrm{MnO} + \mathrm{MnO}_2 + \mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + \mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + \mathrm{Ti}\mathrm{O}_2 + 0.5\mathrm{O}_2 \longrightarrow 6\mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4$
1582	-0.195	$10 \mathrm{MnO} + \mathrm{MnO}_2 + \mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + \mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + \mathrm{Ti}\mathrm{MnO}_3 + 0.5 \mathrm{O}_2 \longrightarrow 6 \mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4$
1583	-0.296	$7 \operatorname{MnO} + \operatorname{MnO}_2 + \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O}_3 + \operatorname{TiO} + \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O}_2 + 0.5 \operatorname{O}_2 \longrightarrow 4 \operatorname{TiMn}_2 \operatorname{O}_4$
1584	-0.285	$6 \operatorname{MnO} + \operatorname{MnO}_2 + \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O}_3 + \operatorname{TiO} + \operatorname{TiMnO}_3 + 0.5 \operatorname{O}_2 \longrightarrow 4 \operatorname{TiMn}_2 \operatorname{O}_4$

```
\Delta_r H (eV/atom)
                                 Reaction
1585
                     -0.226
                                 14 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_2\text{O}_2 + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 8 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
1586
                     -0.249
                                 9 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiO}_2 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
1587
                     -0.240
                                 8 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_3 \text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 5 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
1588
                     -0.181
                                 20 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 11 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4
1589
                                 8 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + 3 \text{ TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
                     -0.381
1590
                     -0.245
                                 2 \text{ MnO} + 0.1159 \text{ Ti}_2 \text{ O}_3 + 0.2174 \text{ Ti}_3 \text{ O}_5 + 0.01449 \text{ TiO} + 0.1014 \text{ TiO}_2 + 0.1739 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{ O}_4
1591
                     -0.293
                                 13 \text{ MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 + 1.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 7 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
1592
                     -0.203
                                 13 \text{ MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{Ti}\text{O}_2 + \text{Ti}\text{MnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 7 \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4
1593
                     -0.278
                                 9 \text{ MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4
1594
                     -0.242
                                 11 \text{ MnO} + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{Ti}_{O_2} + \text{Ti}_{MnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 6 \text{ Ti}_{Mn2}\text{O}_4
1595
                     -0.190
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 22 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 4 Ti_3O_5 + O_2 \longrightarrow 14 TiMn_2O_4
1596
                     -0.425
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 6MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 4TiO + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
                     -0.225
1597
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 16MnO + MnO_2 + 5Ti_2O_3 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 11TiMn_2O_4
1598
                     -0.221
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 15 MnO + MnO_2 + 5 Ti_2O_3 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 11 TiMn_2O_4
1599
                     -0.373
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 8 MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 4 TiO + O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4
1600
                     -0.174
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 26 MnO + MnO_2 + 5 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 16 TiMn_2O_4
1601
                     -0.171
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 25 MnO + MnO_2 + 5 Ti_3O_5 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 16 TiMn_2O_4
1602
                     -0.439
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 6MnO + MnO_2 + 5TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
1603
                     -0.432
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 5MnO + MnO_2 + 5TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
1604
                     -0.236
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7 MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + 0.5 O_2 \longrightarrow 6 TiMn_2O_4
1605
                     -0.184
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 19 MnO + Ti_2O_3 + 3 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 12 TiMn_2O_4
1606
                     -0.180
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 18 MnO + Ti_2O_3 + 3 Ti_3O_5 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 12 TiMn_2O_4
1607
                     -0.354
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7MnO + Ti_2O_3 + 3TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
1608
                     -0.346
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 6MnO + Ti_2O_3 + 3TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
1609
                     -0.203
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 14MnO + 4Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 10TiMn_2O_4
1610
                     -0.312
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 9MnO + Ti_3O_5 + 3TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
1611
                     -0.305
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 8 MnO + Ti_3O_5 + 3 TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4
1612
                     -0.163
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 22 MnO + 4 Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 14 TiMn_2O_4
1613
                     -0.360
                                 Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 6MnO + 4TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
1614
                     -0.331
                                 Mn_2O_3 + 11Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 13TiO + O_2 \longrightarrow 18TiMn_2O_4
1615
                     -0.353
                                 Mn_2O_3 + 9Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + 12TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 15TiMn_2O_4
1616
                     -0.351
                                 Mn_2O_3 + 8 Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + 11 TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 14 TiMn_2O_4
1617
                     -0.335
                                 Mn_2O_3 + 11Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_3O_5 + 14TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 18TiMn_2O_4
1618
                     -0.333
                                 Mn_2O_3 + 10 Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_3O_5 + 13 TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 17 TiMn_2O_4
1619
                     -0.357
                                 Mn_2O_3 + 8Mn_3O_4 + MnO_2 + 12TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 14TiMn_2O_4
1620
                     -0.308
                                 Mn_2O_3 + 12Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 13TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 19TiMn_2O_4
1621
                     -0.304
                                 Mn_2O_3 + 11 Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 12 TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 18 TiMn_2O_4
1622
                     -0.322
                                 Mn_2O_3 + 9Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + 11TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 15TiMn_2O_4
1623
                     -0.309
                                 Mn_2O_3 + 11 Mn_3O_4 + Ti_3O_5 + 13 TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 18 TiMn_2O_4
1624
                     -0.260
                                 Mn_2O_3 + 9MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + 0.5O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
1625
                     -0.196
                                 Mn_2O_3 + 21 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 12 TiMn_2O_4
1626
                     -0.192
                                 Mn_2O_3 + 20 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3 Ti_3O_5 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 12 TiMn_2O_4
1627
                     -0.378
                                 Mn_2O_3 + 9MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
1628
                     -0.370
                                 Mn_2O_3 + 8MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4
1629
                     -0.218
                                 Mn_2O_3 + 16MnO + MnO_2 + 4Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 10TiMn_2O_4
1630
                     -0.332
                                 Mn_2O_3 + 11MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
1631
                     -0.326
                                 Mn_2O_3 + 10MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4
```

	$\Delta_r H$ (eV/atom)	Reaction
1632	-0.173	$Mn_2O_3 + 24MnO + MnO_2 + 4Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 14TiMn_2O_4$
1633	-0.384	$Mn_2O_3 + 8MnO + MnO_2 + 4TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4$
1634	-0.259	$Mn_2O_3 + 12MnO + Ti_2O_3 + TiO_2 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$
1635	-0.253	$Mn_2O_3 + 11 MnO + Ti_2O_3 + TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4$
1636	-0.163	$Mn_2O_3 + 11 MnO + Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 + 0.5 O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4$
1637	-0.222	$Mn_2O_3 + 7MnO + Ti_2O_3 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 5TiMn_2O_4$
1638	-0.195	$Mn_2O_3 + 9MnO + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4$
1639	-0.249	$Mn_3O_4 + 8MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + 0.5O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4$
1640	-0.191	$Mn_3O_4 + 20 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 12 TiMn_2O_4$
1641	-0.187	$Mn_3O_4 + 19MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3Ti_3O_5 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 12TiMn_2O_4$
1642	-0.367	$Mn_3O_4 + 8MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 6TiMn_2O_4$
1643	-0.359	$Mn_3O_4 + 7 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3 TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 6 TiMn_2O_4$
1644	-0.211	$Mn_3O_4 + 15MnO + MnO_2 + 4Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 10TiMn_2O_4$
1645	-0.323	$Mn_3O_4 + 10 MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3 TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4$
1646	-0.317	$Mn_3O_4 + 9 MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3 TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4$
1647	-0.168	$Mn_3O_4 + 23 MnO + MnO_2 + 4 Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 14 TiMn_2O_4$
1648	-0.374	$Mn_3O_4 + 7 MnO + MnO_2 + 4 TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 6 TiMn_2O_4$
1649	-0.250	$Mn_3O_4 + 11 MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4$
1650 1651	-0.243 -0.154	$Mn_3O_4 + 10MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$
1652	-0.134	$Mn_3O_4 + 10 MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 + 0.5 O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4$ $Mn_3O_4 + 6 MnO + Ti_2O_3 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + 0.5 O_2 \longrightarrow 5 TiMn_2O_4$
1653	-0.209	$Mn_3O_4 + 8MnO + Ti_2O_3 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 5 TiMn_2O_4$ $Mn_3O_4 + 8MnO + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 6 TiMn_2O_4$
1654	-0.103	$13 \operatorname{Mn}_3 O_4 + \operatorname{Mn} O_2 + \operatorname{Ti}_2 O_3 + \operatorname{Ti}_3 O_5 + 14 \operatorname{Ti} O_2 + O_2 \longrightarrow 20 \operatorname{Ti}_3 O_4$
1655	-0.314	$12 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 13 \text{TiO} + \text{TiO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow 19 \text{ TiMn}_2\text{O}_4$
1656	-0.328	$10 \operatorname{Mn}_3 \operatorname{O}_4 + \operatorname{MnO}_2 + \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O}_3 + 12 \operatorname{TiO} + \operatorname{TiO}_2 + \operatorname{TiMnO}_3 + \operatorname{O}_2 \longrightarrow 16 \operatorname{TiMn}_2 \operatorname{O}_4$
1657	-0.315	$12 \operatorname{Mn}_{3} O_{4} + \operatorname{Mn} O_{2} + \operatorname{Ti}_{3} O_{5} + 14 \operatorname{Ti} O_{7} + \operatorname{Ti} \operatorname{Mn} O_{3} + O_{2} \longrightarrow 19 \operatorname{Ti} \operatorname{Mn}_{2} O_{4}$
1658	-0.290	$13 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + 13 \text{ TiO} + \text{TiO}_2 + \text{TiMn}_3\text{O}_4 + \text{O}_2 \longrightarrow 20 \text{ TiMn}_2\text{O}_4$
1659	-0.270	$13 \mathrm{MnO} + \mathrm{MnO}_2 + \mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + \mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + \mathrm{Ti}\mathrm{O} + \mathrm{Ti}\mathrm{O}_2 + \mathrm{O}_2 \longrightarrow 7 \mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4$
1660	-0.264	$12 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{TiMnO}_3 + \text{O}_2 \longrightarrow 7 \text{TiMn}_2\text{O}_4$
1661	-0.174	$12 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{Ti}\text{O}_2 + \text{Ti}\text{MnO}_3 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 7 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4$
1662	-0.238	$8 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{TiO} + \text{Ti}_2\text{O}_2 + \text{TiMnO}_3 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4$
1663	-0.209	$10 \mathrm{MnO} + \mathrm{MnO}_2 + \mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + \mathrm{TiO} + \mathrm{Ti}\mathrm{O}_2 + \mathrm{Ti}\mathrm{MnO}_3 + 0.5\mathrm{O}_2 \longrightarrow 6 \mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4$
1664	-0.263	$15 \text{ MnO} + \text{Ti}_2\text{O}_3 + \text{Ti}_3\text{O}_5 + \text{TiO} + \text{Ti}\text{O}_2 + \text{Ti}\text{MnO}_3 + 1.5 \text{ O}_2 \longrightarrow 8 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4$
1665	-0.322	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 10 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 3 TiO + O_2 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4$
1666	-0.181	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 24 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 4 Ti_3O_5 + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 15 TiMn_2O_4$
1667	-0.178	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 23 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 4 Ti_3O_5 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 15 TiMn_2O_4$
1668	-0.372	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 8 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 4 TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4$
1669	-0.366	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 4TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$
1670	-0.207	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 17 MnO + MnO_2 + 5 Ti_2O_3 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 12 TiMn_2O_4$
1671	-0.333	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 10 MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 4 TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4$
1672	-0.327	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 9MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 4TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 8TiMn_2O_4$
1673	-0.164	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 27 MnO + MnO_2 + 5 Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 17 TiMn_2O_4$
1674	-0.378	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 7MnO + MnO_2 + 5TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$
1675	-0.210	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 9 MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + 0.5 O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4$
1676	-0.204	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 8MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$
1677	-0.171	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 20 MnO + Ti_2O_3 + 3 Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 13 TiMn_2O_4$
1678	-0.304	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 8MnO + Ti_2O_3 + 3TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$

	$\Delta_r H$ (eV/atom)	Reaction
1679	-0.274	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 10 MnO + Ti_3O_5 + 3 TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4$
1680	-0.318	$Mn_2O_3 + 13Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 15TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 21TiMn_2O_4$
1681	-0.315	$Mn_2O_3 + 12Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 14TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 20TiMn_2O_4$
1682	-0.332	$Mn_2O_3 + 10Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + 13TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 17TiMn_2O_4$
1683	-0.319	$Mn_2O_3 + 12Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_3O_5 + 15TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 20TiMn_2O_4$
1684	-0.295	$Mn_2O_3 + 13Mn_3O_4 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 14TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 21TiMn_2O_4$
1685	-0.231	$Mn_2O_3 + 11 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + TiO_2 + TiO_2 + 0.5 O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4$
1686	-0.224	$Mn_2O_3 + 10MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$
1687	-0.182	$Mn_2O_3 + 22MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 13TiMn_2O_4$
1688	-0.325	$Mn_2O_3 + 10MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$
1689	-0.292	$Mn_2O_3 + 12MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 8TiMn_2O_4$
1690	-0.228	$Mn_2O_3 + 13MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 8TiMn_2O_4$
1691	-0.221	$Mn_3O_4 + 10 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + 0.5 O_2 \longrightarrow 7 TiMn_2O_4$
1692	-0.215	$Mn_3O_4 + 9MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + TiO_5 + TiO_7 + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$
1693	-0.177	$Mn_3O_4 + 21 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3 Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 13 TiMn_2O_4$
1694	-0.316	$Mn_3O_4 + 9MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 3TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 7TiMn_2O_4$
1695	-0.284	$Mn_3O_4 + 11 MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 3 TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4$
1696	-0.220	$Mn_3O_4 + 12MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 8TiMn_2O_4$
1697	-0.301	$14\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO_2} + \mathrm{Ti_2O_3} + \mathrm{Ti_3O_5} + 15\mathrm{TiO} + \mathrm{TiO_2} + \mathrm{TiMnO_3} + \mathrm{O_2} \longrightarrow 22\mathrm{TiMn_2O_4}$
1698	-0.238	$14 \mathrm{MnO} + \mathrm{MnO}_2 + \mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + \mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + \mathrm{TiO} + \mathrm{TiO}_2 + \mathrm{TiMnO}_3 + \mathrm{O}_2 \longrightarrow 8 \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4$
1699	-0.292	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 12 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 3 TiO + TiO_2 + O_2 \longrightarrow 9 TiMn_2O_4$
1700	-0.287	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 11 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 3 TiO + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 9 TiMn_2O_4$
1701	-0.170	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 25 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 4 Ti_3O_5 + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 16 TiMn_2O_4$
1702	-0.326	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 9 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + 4 TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4$
1703	-0.297	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 11 MnO + MnO_2 + Ti_3O_5 + 4 TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 9 TiMn_2O_4$
1704	-0.185	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 10 MnO + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + 0.5 O_2 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4$
1705	-0.305	$Mn_2O_3 + 14Mn_3O_4 + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 16TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 23TiMn_2O_4$
1706	-0.203	$Mn_2O_3 + 12MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + 0.5O_2 \longrightarrow 8TiMn_2O_4$
1707	-0.195	$Mn_3O_4 + 11 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + 0.5 O_2 \longrightarrow 8 TiMn_2O_4$
1708	-0.264	$Mn_2O_3 + Mn_3O_4 + 13 MnO + MnO_2 + Ti_2O_3 + Ti_3O_5 + 3 TiO + TiO_2 + TiMnO_3 + O_2 \longrightarrow 10 TiMn_2O_4$