Supplementary Reactions:

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

Nongnuch Artrith 1,*,† , José Antonio Garrido Torres 1 , Alexander Urban 1 , and Mark S. Hybertsen 2,†

¹Department of Chemical Engineering, Columbia University, New York, NY 10027, USA.

²Center for Functional Nanomaterials, Brookhaven National Laboratory, Upton, NY 11973, USA.

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

	Label	Weight	$\Delta_r H$	Reaction
			eV/atom	
1	0	1.000	-7.589	$4.8 \text{FeO} + 0.2 \text{Li}_5 \text{FeO}_4 + 1.2 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{Fe}_5 \text{O}_8$
2	1	0.500	-0.892	$0.1 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.1 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.4 \mathrm{MnO} + 0.1 \mathrm{MnO_2} + 0.3 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
3	1	0.500	-0.957	$0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
4	2	0.250	-1.713	$2 \text{ MnO} + 0.1159 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2174 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.01449 \text{ TiO} + 0.1014 \text{ TiO}_2 + 0.1739 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4$
5	2	0.250	-1.671	$2 \text{ MnO} + 0.1186 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2203 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1017 \text{ TiO}_2 + 0.1695 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4$
6	2	0.250	-1.865	$2 \text{ MnO} + 0.129 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.2419 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.01613 \text{ TiO} + 0.1935 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4$
7	2	0.250	-1.819	$2 \text{ MnO} + 0.1321 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2453 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1887 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4$
8	3	0.143	-1.776	$0.05882Mn_{2}O_{3} + 0.5882Mn_{3}O_{4} + 0.05882MnO_{2} + 0.05882Ti_{2}O_{3} + 0.05882Ti_{3}O_{5} + 0.5882TiO + 0.05882TiO_{2} + 0.05882TiMnO_{3} \longrightarrow TiMn_{2}O_{4}$
9	3	0.143	-1.806	$0.6364 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.09091 \mathrm{MnO_2} + 0.09091 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.09091 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.5455 \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
10	3	0.143	-1.779	$0.6\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1\mathrm{MnO_2} + 0.1\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6\mathrm{TiO} + 0.1\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
11	3	0.143	-1.793	$0.07143Mn_2O_3 + 0.5714Mn_3O_4 + 0.07143MnO_2 + 0.07143Ti_2O_3 + 0.07143Ti_3O_5 + 0.5714TiO + 0.07143TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
12	3	0.143	-1.714	$0.6154Mn_{3}O_{4} + 0.07692MnO_{2} + 0.07692Ti_{2}O_{3} + 0.07692Ti_{3}O_{5} + 0.5385TiO + 0.07692TiMnO_{3} \longrightarrow TiMn_{2}O_{4}$
13	3	0.143	-1.711	$0.625Mn_{3}O_{4} + 0.0625MnO_{2} + 0.0625Ti_{2}O_{3} + 0.0625Ti_{3}O_{5} + 0.5625TiO + 0.0625TiO_{2} + 0.0625TiMnO_{3} \longrightarrow TiMn_{2}O_{4}$
14	3	0.143	-1.890	$0.08333\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5833\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08333\mathrm{MnO_2} + 0.08333\mathrm{Ti_2O_3} + 0.08333\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5833\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
15	4	1.000	-12.459	$Ni + 1.5 O_2 + Ti \longrightarrow TiNiO_3$
16	5	1.000	-0.903	$0.25 \text{Fe}_2 \text{O}_3 + 0.25 \text{FeO} + 2.375 \text{Li}_2 \text{O} + 0.25 \text{Li}_2 \text{FeO}_2 + 0.0625 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{FeO}_4$
17	6	0.333	-1.163	$0.3333 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.3968 \text{Ti}_2\text{O}_3 + 0.2063 \text{TiO}_2 + 0.03175 \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3$
18	6	0.333	-1.214	$0.3023 Co_3O_4 + 0.09302 CoO + 0.3953 Ti_2O_3 + 0.2093 TiO_2 + 0.04651 O_2 \longrightarrow TiCoO_3$
19	6	0.333	-0.921	$0.3333 \operatorname{Co}_3 \operatorname{O}_4 + 0.3333 \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O}_3 + 0.3333 \operatorname{Ti} \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{TiCoO}_3$
20	7	1.000	-1.985	$1.333 \operatorname{Fe}_{3} O_{4} + \operatorname{LiFe} O_{2} + 0.3333 O_{2} \longrightarrow \operatorname{LiFe}_{5} O_{8}$
21	8	0.333	-0.508	$0.2174 \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.5217 \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.2609 \text{Fe}_3\text{O}_4 + 0.2174 \text{FeO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4$
22	8	0.333	-0.644	$0.64 \mathrm{Cr}_3\mathrm{O}_4 + 0.08 \mathrm{Cr}\mathrm{O}_2 + 0.28 \mathrm{Fe}_3\mathrm{O}_4 + 0.16 \mathrm{FeO} \longrightarrow \mathrm{Cr}_2\mathrm{FeO}_4$
23	8	0.333	-0.514	$0.2075 \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.5283 \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.01887 \text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.2453 \text{Fe}_3\text{O}_4 + 0.2264 \text{FeO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4$
24	9	0.167	-0.293	$0.3793 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2414 \text{ CuO} + 0.1724 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2069 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.03448 \text{ FeO} \longrightarrow \text{FeCuO}_2$
25	9	0.167	-0.276	$0.3889 \mathrm{Cu_2O} + 0.2222 \mathrm{CuO} + 0.1667 \mathrm{Fe_2O_3} + 0.2222 \mathrm{Fe_3O_4} \longrightarrow \mathrm{FeCuO_2}$
26	9	0.167	-0.449	$0.5 \mathrm{Cu_2O} + 0.1604 \mathrm{Fe_2O_3} + 0.2264 \mathrm{Fe_3O_4} + 0.0566 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{FeCuO_2}$
27	9	0.167	-0.517	$0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.1525 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2119 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.05932 \text{ FeO} + 0.0678 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2$
28	9	0.167	-0.378	$0.3981 \text{Cu}_2\text{O} + 0.2039 \text{CuO} + 0.1456 \text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.2136 \text{Fe}_3\text{O}_4 + 0.06796 \text{FeO} + 0.01942 \text{O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2$
29	9	0.167	-0.301	$0.3993 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2014 \text{ CuO} + 0.1547 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2302 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.007194 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2$

^{*}Present Address: Materials Chemistry and Catalysis, Debye Institute for Nanomaterials Science, Utrecht University, 3584 CG Utrecht, The Netherlands.

†email: n.artrith@uu.nl ‡email: mhyberts@bnl.gov

```
Weight
                                                         \Delta_r H
            Label
                                                                              Reaction
                                                     eV/atom
30
                  10
                                  0.125
                                                         -0.848
                                                                             0.1852 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.07407 \,\mathrm{MnO} + 0.1111 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1111 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1852 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2222 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                  0.125
                                                         -0.934
                                                                             0.1812 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.08696 \text{ MnO} + 0.0942 \text{ MnO}_2 + 0.1014 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1558 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.0471 \text{ TiO} + 0.05435 \text{ TiO}_2 + 0.2283 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.01449 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
31
                  10
32
                                  0.125
                                                         -0.902
                                                                             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}
                  10
33
                  10
                                  0.125
                                                         -0.792
                                                                             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{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
34
                                  0.125
                                                                             0.1807 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.08434 \, \text{MnO} + 0.09639 \, \text{MnO}_2 + 0.1084 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1687 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.04819 \, \text{TiO} + 0.2289 \, \text{TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.0241 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 + 0.08419 \, \text{TiO}_4 + 0.0241 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 + 0.08419 \, \text{TiO}_4 + 0.08419 \, \text{TiO}_4 + 0.08419 \, \text{O}_4 + 0.0841
                  10
                                                         -1.013
35
                  10
                                  0.125
                                                         -0.862
                                                                             0.1863\,Mn_2O_3 + 0.07843\,MnO + 0.1078\,MnO_2 + 0.09804\,Ti_2O_3 + 0.1618\,Ti_3O_5 + 0.03431\,TiO + 0.06373\,TiO_2 + 0.2206\,TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3
36
                  10
                                  0.125
                                                         -0.877
                                                                             0.1779\,Mn_2O_3 + 0.08589\,MnO + 0.09202\,MnO_2 + 0.1166\,Ti_2O_3 + 0.1779\,Ti_3O_5 + 0.2331\,TiMn_2O_4 + 0.01227\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
37
                  10
                                  0.125
                                                         -0.800
                                                                             0.1784 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.08852 \text{ MnO} + 0.0899 \text{ MnO}_2 + 0.1093 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1646 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05533 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.2324 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.002766 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
38
                  11
                                  0.250
                                                         -0.678
                                                                             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{Li}_5\text{FeO}_2
39
                                  0.250
                  11
                                                         -0.604
                                                                             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}_7\text{Fe}\text{O}_2
40
                  11
                                  0.250
                                                                             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
                                                         -0.660
                                  0.250
41
                  11
                                                         -0.589
                                                                             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
                  12
                                  1.000
                                                         -1.526
                                                                             0.2 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.6 \text{ VO} + 0.2 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
42
43
                  13
                                  1.000
                                                         -1.068
                                                                             0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
44
                  14
                                  1.000
                                                         -2.003
                                                                             0.1667 \text{ V}_2\text{O}_5 + 1.5 \text{ VO} + 0.1667 \text{ VO}_2 + 0.1667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_3
45
                  15
                                  0.250
                                                         -1.536
                                                                             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
46
                  15
                                  0.250
                                                         -1.494
                                                                             NiO + 0.1186 Ti_2O_3 + 0.2203 Ti_3O_5 + 0.1017 TiO_2 + 0.1695 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
                  15
                                  0.250
47
                                                         -1.687
                                                                             NiO + 0.129 Ti_2O_3 + 0.2419 Ti_3O_5 + 0.01613 TiO + 0.1935 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
48
                  15
                                  0.250
                                                         -1.641
                                                                             NiO + 0.1321 Ti_2O_3 + 0.2453 Ti_3O_5 + 0.1887 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
49
                  16
                                  0.200
                                                         -1.509
                                                                             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{ Cu}\text{O} + 0.2609 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Cu}\text{O}_4
50
                  16
                                  0.200
                                                         -1.522
                                                                             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
51
                  16
                                  0.200
                                                         -1.369
                                                                             0.3065 \operatorname{Cr}_2 \operatorname{O}_3 + 0.3871 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + 0.2258 \operatorname{Cr}_2 \operatorname{O}_7 + 0.5 \operatorname{Cu}_2 \operatorname{O}_7 + 0.2903 \operatorname{O}_7 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{Cu}_2 \operatorname{O}_4
52
                  16
                                  0.200
                                                         -1.201
                                                                             0.3025 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.3951 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.2099 \text{ Cr}\text{O}_2 + 0.3765 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2469 \text{ CuO} + 0.2346 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4
53
                  16
                                  0.200
                                                         -1.335
                                                                             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
54
                  17
                                  0.500
                                                         -1.462
                                                                             1.619 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.7619 \text{ FeO} + \text{LiFeO}_2 + 0.1905 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
55
                  17
                                  0.500
                                                         -1.550
                                                                             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}_2\text{Fe}\text{O}_2 + 0.1967 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}_2\text{O}_8
56
                  18
                                  0.333
                                                         -1.594
                                                                             CoO + 0.5909 Cr_3O_4 + 0.2273 CrO_2 + 0.09091 O_2 \longrightarrow Cr_2CoO_4
57
                                  0.333
                                                                             CoO + 0.3208 Cr_2O_3 + 0.4528 Cr_3O_4 + 0.1132 O_2 \longrightarrow Cr_2CoO_4
                  18
                                                         -1.405
58
                  18
                                  0.333
                                                         -1.800
                                                                             CoO + 0.6667 Cr<sub>3</sub>O<sub>4</sub> + 0.1667 O<sub>2</sub> \longrightarrow Cr<sub>2</sub>CoO<sub>4</sub>
59
                  19
                                  1.000
                                                                             0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.4 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                         -1.540
60
                  20
                                  0.500
                                                         -3.774
                                                                             0.1594 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1739 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.01449 \text{ MnO} + 0.1449 \text{ MnO}_2 + \text{TiO} + 0.2609 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
61
                  20
                                  0.500
                                                         -3.762
                                                                             0.1613 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1774 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1452 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.2581 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
62
                  21
                                  0.143
                                                         -1.042
                                                                             0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1304 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2029 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05797 \,\mathrm{TiO} + 0.07246 \,\mathrm{TiO_2} + 0.02899 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
63
                  21
                                  0.143
                                                         -0.767
                                                                             0.3182 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04545 \,\mathrm{MnO} + 0.09091 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2273 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1364 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
64
                  21
                                  0.143
                                                         -0.900
                                                                             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}
                  21
                                  0.143
                                                                             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}
65
                                                         -0.980
                  21
                                  0.143
                                                         -0.873
                                                                             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}
66
                  21
                                                                             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}
67
                                  0.143
                                                         -1.150
68
                  21
                                  0.143
                                                         -0.788
                                                                            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}
                  22
                                  1.000
69
                                                       -11.591
                                                                             3 \text{ Fe} + 2 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Fe}_3 \text{ O}_4
70
                  23
                                  1.000
                                                         -0.400
                                                                            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
71
                  24
                                  1.000
                                                      -14.258
                                                                             2 \operatorname{Cr} + \operatorname{Ni} + 2 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{NiO}_4
                  25
                                                                             0.3333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.6667 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ MnO}_2 + 0.6667 \text{ TiO} + 0.3333 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
72
                                  1.000
                                                         -2.080
```

```
Weight
                                                                             \Delta_r H
                   Label
                                                                                                        Reaction
                                                                         eV/atom
   73
                           26
                                               1.000
                                                                             -2.166
                                                                                                       0.3333 \,\text{Fe}_2 \,\text{O}_3 + 2.333 \,\text{FeO} + 0.3333 \,\text{O}_2 \longrightarrow \text{Fe}_3 \,\text{O}_4
   74
                           27
                                               0.250
                                                                                                       0.1401 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.03865 \,\mathrm{MnO} + 0.0628 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2995 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1618 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2391 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.04831 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                             -0.936
   75
                           27
                                               0.250
                                                                             -0.905
                                                                                                       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
   76
                           27
                                               0.250
                                                                             -0.965
                                                                                                       0.1561 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04046 \text{ MnO} + 0.2948 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1647 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.2457 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.06936 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
   77
                           27
                                               0.250
                                                                             -0.933
                                                                                                       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}
   78
                           28
                                               0.500
                                                                             -0.543
                                                                                                       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}
    79
                            28
                                               0.500
                                                                             -0.529
                                                                                                       0.1887 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2075 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3019 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{MnO_2}
   80
                            29
                                               0.500
                                                                             -0.600
                                                                                                       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}
   81
                           29
                                               0.500
                                                                             -0.593
                                                                                                       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}
                                               1.000
    82
                            30
                                                                             -2.490
                                                                                                       1.444 \text{ TiO} + 1.556 \text{ TiO}_2 + 0.2222 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3 \text{O}_5
   83
                           31
                                               1.000
                                                                           -20.400
                                                                                                      Fe + 5 Li + 2 O_2 \longrightarrow Li_5 FeO_4
   84
                           32
                                               0.500
                                                                                                       0.125 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 1.5 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ Li}_2\text{O} + 0.125 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.125 \text{ Li}\text{Fe}\text{O}_2 + 0.375 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
                                                                             -2.451
    85
                            32
                                               0.500
                                                                             -2.518
                                                                                                      0.1429 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 1.524 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1429 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1429 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.381 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8
   86
                           33
                                               1.000
                                                                             -2.622
                                                                                                      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
   87
                           34
                                               1.000
                                                                             -1.861
                                                                                                       0.6667 \text{ V}_2\text{O}_5 + 1.667 \text{ VO} \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
    88
                           35
                                               1.000
                                                                             -0.616
                                                                                                       2.333 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.3333 \text{ Li}_2\text{O} + 0.3333 \text{ Li}_2\text{Fe}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}_2\text{O}_8
   89
                           36
                                               0.250
                                                                             -1.715
                                                                                                      CoO + 0.1321 Ti_2O_3 + 0.2453 Ti_3O_5 + 0.1887 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
                                               0.250
                                                                                                       CoO + 0.1186 Ti_2O_3 + 0.2203 Ti_3O_5 + 0.1017 TiO_2 + 0.1695 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
   90
                            36
                                                                             -1.568
   91
                           36
                                               0.250
                                                                             -1.762
                                                                                                       CoO + 0.129 Ti_2O_3 + 0.2419 Ti_3O_5 + 0.01613 TiO + 0.1935 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
   92
                            36
                                               0.250
                                                                             -1.610
                                                                                                       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
   93
                           37
                                               1.000
                                                                             -1.941
                                                                                                       2.667 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.3333 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Mn}_3 \,\mathrm{O}_4
   94
                           38
                                               0.333
                                                                             -1.180
                                                                                                       0.1 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.6 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.1 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.8 \text{ FeO} + 0.1 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
   95
                            38
                                               0.333
                                                                             -1.247
                                                                                                       0.6364 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.09091 \text{ Cr}\text{O}_2 + 0.09091 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.8182 \text{ Fe}\text{O} + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Fe}\text{O}_4
   96
                           38
                                               0.333
                                                                             -1.173
                                                                                                       0.08333 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.5833 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.08333 \text{ Cr}_{0} + 0.08333 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.8333 \text{ Fe}_0 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Fe}_0
   97
                           39
                                               1.000
                                                                             -0.348
                                                                                                       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}
   98
                           40
                                               1.000
                                                                             -0.414
                                                                                                       0.3333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.6667 \text{ TiO} + 0.3333 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{O}_3
                                                                                                       0.9 \,\mathrm{MnO} + 0.1 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.3 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.1 \,\mathrm{Ti}_{2} + 0.1 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}_{2} \,\mathrm{MnO}_{3}
   99
                           41
                                               0.500
                                                                             -1.328
  100
                           41
                                               0.500
                                                                             -1.441
                                                                                                       0.8889 \,\mathrm{MnO} + 0.1111 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1111 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 101
                           42
                                               1.000
                                                                             -1.845
                                                                                                      1.5 \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O}_3 + 0.25 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Ti}_3 \operatorname{O}_5
                                               1.000
 102
                           43
                                                                             -4.991
                                                                                                      2 \text{ TiO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2 \text{O}_3
 103
                           44
                                               1.000
                                                                          -25.200
                                                                                                      5 \text{ Fe} + \text{Li} + 4 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5 \text{O}_8
 104
                           45
                                               1.000
                                                                             -1.630
                                                                                                      Cu + 0.5 O_2 \longrightarrow CuO
 105
                           46
                                               1.000
                                                                             -2.423
                                                                                                       0.1667 \, Mn_2O_3 + 0.1667 \, Mn_3O_4 + MnO + 0.1667 \, Ti_2O_3 + 0.5 \, TiO + 0.1667 \, TiMnO_3 + 0.1667 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
 106
                           47
                                               1.000
                                                                             -1.902
                                                                                                      0.5 \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O}_3 + 0.25 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Ti}_2 \operatorname{O}_2
 107
                           48
                                               1.000
                                                                             -1.993
                                                                                                      1.5 \text{ MnO} + 0.25 \text{ MnO}_2 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiMnO}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
 108
                            49
                                               0.500
                                                                             -0.747
                                                                                                       0.3333 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.1667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
 109
                           49
                                               0.500
                                                                             -0.847
                                                                                                       0.3182 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.04545 \text{ VO} + 0.1818 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
                           50
110
                                               1.000
                                                                           -20.034
                                                                                                       2.5 O_2 + 3 V \longrightarrow V_3 O_5
111
                           51
                                               1.000
                                                                             -1.390
                                                                                                       0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.125 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.125 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.25 \,\mathrm{TiO} + 0.125 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                           52
                                                                                                       0.7627 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 1.059 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.2966 \text{ Fe}\text{O} + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} + 0.339 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}_5\text{O}_8
112
                                               1.000
                                                                             -2.472
 113
                           53
                                               0.250
                                                                             -1.334
                                                                                                       0.08333\,Mn_3O_4 + 1.667\,MnO + 0.08333\,MnO_2 + 0.08333\,Ti_2O_3 + 0.25\,Ti_3O_5 + 0.08333\,TiO_2 + 0.08333\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.08333\,MnO_2 + 0.0
114
                            53
                                               0.250
                                                                             -1.309
                                                                                                       0.08333 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.583 \text{ MnO} + 0.08333 \text{ MnO}_2 + 0.08333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08333 \text{ Ti}_3\text{MnO}_3 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{MnO}_3 + 0.08333 \text{ Ci}_3\text{O}_3 
                            53
                                                                                                       0.07692 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 1.615 \text{ MnO} + 0.07692 \text{ MnO}_2 + 0.07692 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.2308 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.07692 \text{ TiO}_2 + 0.07692 \text{ TiMnO}_3 + 0.07692 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
115
                                               0.250
                                                                             -1.236
```

```
Weight
                                                                         \Delta_r H
                  Label
                                                                                                   Reaction
                                                                     eV/atom
116
                          53
                                             0.250
                                                                         -1.422
                                                                                                  0.09091 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.636 \,\mathrm{MnO} + 0.09091 \,\mathrm{MnO_2} + 0.09091 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2727 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.09091 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                          54
                                             1.000
117
                                                                         -1.489
                                                                                                  1.667 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.3333 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3
118
                          55
                                             1.000
                                                                         -7.760
                                                                                                  Fe + Li + O_2 \longrightarrow LiFeO_2
 119
                          56
                                             0.500
                                                                         -0.915
                                                                                                  0.1 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.3 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1 \text{ Mn}_3\text{O}_2 + 0.1 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4
                                             0.500
                                                                         -1.010
                                                                                                  0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.333 \text{ Mn} + 0.1111 \text{ Mn}_2 + 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}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
 120
                          56
 121
                          57
                                             1.000
                                                                       -14.383
                                                                                                  3 \text{ Mn} + 2 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Mn}_3 \text{O}_4
 122
                          58
                                             0.250
                                                                         -1.353
                                                                                                  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}
 123
                          58
                                             0.250
                                                                         -1.403
                                                                                                  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}
 124
                          58
                                             0.250
                                                                         -1.360
                                                                                                  0.1377 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1957 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05797 \text{ MnO} + 0.07971 \text{ MnO}_2 + 0.5 \text{Ti}_2\text{O}_3 + 0.04348 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 125
                                             0.250
                                                                                                  0.1452 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2097 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08065 \text{ Mn}_2 + 0.5 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.03226 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_3
                          58
                                                                         -1.310
                          59
                                             1.000
                                                                                                 Mn_2O_3 + MnO \longrightarrow Mn_3O_4
 126
                                                                         -0.452
 127
                                             1.000
                                                                                                 3 \text{ VO} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{V}_3 \text{O}_5
                          60
                                                                         -6.608
 128
                                             1.000
                                                                         -1.048
                                                                                                 0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{TiO} + 0.6667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                          61
                                                                                                 0.7778 \text{ VO} + 1.222 \text{ VO}_2 + 0.8889 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_5
 129
                          62
                                             1.000
                                                                         -3.515
 130
                          63
                                             1.000
                                                                         -6.197
                                                                                                 2 \operatorname{Li} + 0.5 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Li}_2 \operatorname{O}
 131
                          64
                                             1.000
                                                                         -4.301
                                                                                                  1.667 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO}_2 + \mathrm{TiO} + 0.3333 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
 132
                          65
                                             0.167
                                                                         -0.816
                                                                                                  0.09836 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1393 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.05738 \, \text{Mn}_2 + 0.2295 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.06557 \, \text{TiO} + 0.08197 \, \text{TiO}_2 + 0.1639 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_3 \, \text{TiMn}_3
                                                                                                  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}
 133
                          65
                                             0.167
                                                                          -0.861
 134
                          65
                                             0.167
                                                                         -0.852
                                                                                                  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
 135
                          65
                                             0.167
                                                                         -0.881
                                                                                                  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
 136
                          65
                                             0.167
                                                                          -0.815
                                                                                                  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} + 0.1562\,TiMn_{2}O_{4} \longrightarrow TiMnO_{3}O_{4} + 0.08681\,TiO_{2} + 0.08681\,TiO_{2} + 0.08681\,TiO_{3} + 0.08681\,TiO_{4} + 0.08681\,TiO_{5} + 0.086
 137
                          65
                                             0.167
                                                                         -0.890
                                                                                                  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_3
 138
                                             1.000
                                                                         -7.120
                                                                                                  2 \text{ VO} + 1.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2 \text{O}_5
                          66
 139
                          67
                                             1.000
                                                                         -1.908
                                                                                                  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}
                                                                                                  0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.571 \text{ MnO} + 0.4286 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
 140
                          68
                                             0.250
                                                                         -1.676
 141
                          68
                                             0.250
                                                                         -1.513
                                                                                                  0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.625 \text{ MnO} + 0.375 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ TiO}_2 + 0.125 \text{ TiMnO}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
 142
                          68
                                             0.250
                                                                         -1.653
                                                                                                  0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.556 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.4444 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ TiMnO}_3 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                             0.250
 143
                          68
                                                                         -1.525
                                                                                                  0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.6 \,\mathrm{MnO} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 144
                                             0.143
                                                                         -0.672
                                                                                                  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}
                          69
 145
                                             0.143
                                                                         -0.825
                                                                                                  0.184 \text{ MnO}_2 + 0.18 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.052 \text{ TiO} + 0.408 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.024 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                          69
 146
                                             0.143
                                                                         -0.712
                                                                                                  0.2174 \text{ MnO}_2 + 0.1957 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.02174 \text{ TiO} + 0.3913 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                          69
 147
                                             0.143
                                                                         -0.668
                                                                                                  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}
                          69
 148
                          69
                                             0.143
                                                                         -0.592
                                                                                                  0.1765 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1765 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05882 \,\mathrm{TiO_2} + 0.4118 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 149
                          69
                                             0.143
                                                                         -0.745
                                                                                                  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
 150
                          69
                                             0.143
                                                                         -0.654
                                                                                                  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
                                             1.000
                                                                                                  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}
 151
                          70
                                                                         -1.326
 152
                          71
                                             1.000
                                                                         -0.708
                                                                                                  VO + 2 VO_2 \longrightarrow V_3O_5
 153
                          72
                                             1.000
                                                                                                  0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.625 \text{ MnO} + 0.125 \text{ MnO}_2 + 0.5 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                                         -1.793
 154
                          73
                                             0.500
                                                                         -1.624
                                                                                                  0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + \text{FeO} + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
 155
                                             0.500
                                                                                                  0.381 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.2381 \text{ Cu}_2\text{O} + \text{FeO} + 0.1905 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCu}_2
                          73
                                                                         -1.444
 156
                          74
                                             1.000
                                                                         -5.317
                                                                                                  Cu + Fe + O_2 \longrightarrow FeCuO_2
 157
                          75
                                             0.500
                                                                          -3.064
                                                                                                  0.2754 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.3913 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1159 \text{ MnO} + 0.1594 \text{ MnO}_2 + \text{TiO} + 0.08696 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                          75
                                             0.500
                                                                                                  0.2903 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.4194 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1613 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.06452 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
158
                                                                          -2.965
```

	Label	Weight	$\Delta_r H$ eV/atom	Reaction
159	76	1.000	-9.331	$3 \text{ TiO} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3 \text{O}_5$
160	77	1.000	-1.141	$0.45 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \mathrm{MnO} + 0.45 \mathrm{TiO} + 0.15 \mathrm{TiO_2} + 0.4 \mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
161	78	0.143	-2.477	$0.06667 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.6 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.06667 \mathrm{MnO_2} + 0.06667 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.8 \mathrm{TiO} + 0.06667 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
162	78	0.143	-2.320	$0.6471 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05882 \text{ Mn}_2 + 0.05882 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.7647 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.05882 \text{ Ti}_2 + 0.05882 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4$
163	78	0.143	-2.298	$0.625 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.0625 \text{ MnO}_2 + 0.0625 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.75 \text{ TiO} + 0.0625 \text{ Ti}_3\text{MnO}_3 + 0.0625 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4$
164	78	0.143	-2.328	$0.05882Mn_2O_3 + 0.5882Mn_3O_4 + 0.05882MnO_2 + 0.05882Ti_3O_5 + 0.7647TiO + 0.05882TiMnO_3 + 0.05882O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
165	78	0.143	-2.453	$0.6429 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.07143 \mathrm{MnO_2} + 0.07143 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.7857 \mathrm{TiO} + 0.07143 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
166	78	0.143	-2.417	$0.07692 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.6154 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.07692 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.7692 \mathrm{TiO} + 0.07692 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
167	78	0.143	-2.347	$0.05556Mn_2O_3 + 0.6111Mn_3O_4 + 0.05556MnO_2 + 0.05556Ti_3O_5 + 0.7778TiO + 0.05556TiO_2 + 0.05556O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
168	79	0.167	-0.697	$0.125 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 2.438 \text{Li}_2 \text{O} + 0.125 \text{Li} \text{Fe}_5 \text{O}_8 + 0.03125 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{Fe} \text{O}_4$
169	79	0.167	-0.813	$0.09091Fe_2O_3 + 0.09091Fe_3O_4 + 0.09091FeO + 2.455Li_2O + 0.09091LiFe_5O_8 + 0.04545O_2 \longrightarrow Li_5FeO_4$
170	79	0.167	-0.765	$0.08333Fe_{2}O_{3} + 0.08333Fe_{3}O_{4} + 0.08333FeO + 2.417Li_{2}O + 0.08333LiFe_{5}O_{8} + 0.08333LiFeO_{2} + 0.04167O_{2} \longrightarrow Li_{5}FeO_{4}$
171	79	0.167	-0.726	$0.125 \text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{Fe}\text{O} + 2.438 \text{Li}_2\text{O} + 0.125 \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8 + 0.03125 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4$
172	79	0.167	-0.852	$0.1111 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1111 \text{FeO} + 2.444 \text{Li}_2 \text{O} + 0.1111 \text{Li} \text{Fe}_5 \text{O}_8 + 0.05556 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{FeO}_4$
173	79	0.167	-0.685	$0.1 \text{Fe}_2 \text{O}_3 + 0.1 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 2.45 \text{Li}_2 \text{O} + 0.1 \text{Li} \text{Fe}_5 \text{O}_8 + 0.025 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{Fe} \text{O}_4$
174	80	0.250	-1.000	$0.3008 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.09756 \text{CoO} + 0.3333 \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.01626 \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3$
175	80	0.250	-1.223	$0.3333 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.303 \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.09091 \text{TiO} + 0.0303 \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3$
176	80	0.250	-1.267	$0.3022 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.09333 \text{CoO} + 0.3044 \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.08667 \text{TiO} + 0.04444 \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3$
177	80	0.250	-0.940	$0.3333 \operatorname{Co}_{3} \operatorname{O}_{4} + 0.3333 \operatorname{Ti}_{3} \operatorname{O}_{5} \longrightarrow \operatorname{TiCoO}_{3}$
178	81	0.500	-1.053	$0.2609 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.2174 \text{CoO} + 0.2174 \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.5217 \text{Cr}_3\text{O}_4 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CoO}_4$
179	81	0.500	-1.213	$0.28 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.16 \text{CoO} + 0.64 \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.08 \text{CrO}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CoO}_4$
180	82	1.000	-2.577	$0.1667Mn_{3}O_{4} + 1.333MnO + 0.1667MnO_{2} + 0.1667Ti_{3}O_{5} + 0.5TiO + 0.1667O_{2} \longrightarrow TiMn_{2}O_{4}$
181	83	1.000	-0.906	$0.25 \operatorname{Co}_{3}\mathrm{O}_{4} + 0.25 \operatorname{CoO} + 0.25 \operatorname{TiO} + 0.75 \operatorname{TiO}_{2} \longrightarrow \operatorname{TiCoO}_{3}$
182	84	1.000	-1.612	$0.5 \mathrm{MnO} + 0.5 \mathrm{MnO}_2 + 0.3333 \mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1667 \mathrm{TiO} + 0.1667 \mathrm{TiO}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3$
183	85	1.000	-2.904	$2 \text{ FeO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Fe}_2 \text{O}_3$
184	86	1.000	-8.542	$2 \operatorname{Fe} + 1.5 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Fe}_2 \operatorname{O}_3$
185	87	0.333	-0.989	$0.5909 \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{CrO}_2 + \text{NiO} + 0.09091 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{NiO}_4$
186	87	0.333	-0.800	$0.3208 \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.4528 \text{Cr}_3\text{O}_4 + \text{NiO} + 0.1132 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{NiO}_4$
187	87	0.333	-1.196	$0.6667 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + \operatorname{NiO} + 0.1667 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{NiO}_4$
188	88	0.333	-3.391	$0.125Mn_2O_3 + 0.125Mn_3O_4 + 0.125MnO_2 + 0.875TiO + 0.125TiMn_2O_4 + 0.25O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
189	88	0.333	-3.403	$0.1429\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429\mathrm{Mn_3O_4} + 0.8571\mathrm{TiO} + 0.1429\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.2857\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
190	88	0.333	-3.278	$0.1667 Mn_3O_4 + 0.1667 MnO_2 + 0.8333 TiO + 0.1667 TiMn_2O_4 + 0.25 O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
191	89	0.333	-1.086	$1.5\mathrm{V}_2\mathrm{O}_3 + 0.25\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{V}_3\mathrm{O}_5$
192	89	0.333	-0.656	$1.375 \mathrm{V_2O_3} + 0.125 \mathrm{V_2O_5} + 0.125 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{V_3O_5}$
193	89	0.333	-0.581	$1.333 V_2 O_3 + 0.1111 V_2 O_5 + 0.1111 V O_2 + 0.1111 O_2 \longrightarrow V_3 O_5$
194	90	1.000	-3.789	$0.9048 V_2O_3 + 0.1905 VO + 1.048 O_2 \longrightarrow V_2O_5$
195	91	1.000	-3.992	$Mn + 0.5 O_2 \longrightarrow MnO$
196	92	1.000	-1.866	$0.4091 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ MnO} + 0.4091 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ TiO} + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
197	93	0.500	-0.993	$0.6098 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1707 \text{FeO} + 0.1951 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Fe}_2 \text{O}_3$
198	93	0.500	-0.815	$0.6667 \operatorname{Fe}_{3} \operatorname{O}_{4} + 0.1667 \operatorname{O}_{2} \longrightarrow \operatorname{Fe}_{2} \operatorname{O}_{3}$
199	94	1.000	-14.991	$2 \operatorname{Cr} + \operatorname{Fe} + 2 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{FeO}_4$
200	95	0.500	-1.425	$0.8 \text{FeO} + 0.2 \text{Li}_5 \text{FeO}_4 + 0.2 \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2$
201	95	0.500	-1.544	$0.8571 \text{ FeO} + 0.1429 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1429 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.2143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2$

	Label	Weight	$\Delta_r H$ eV/atom	Reaction
202	96	1.000	-0.902	$0.1667 V_2 O_5 + 0.1667 V_3 O_5 + VO + 0.1667 VO_2 \longrightarrow V_2 O_3$
203	97	0.500	-4.051	$0.3333 \text{Co}_3\text{O}_4 + \text{TiO} + 0.3333 \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3$
204	97	0.500	-4.081	$0.3171 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.04878 \text{CoO} + \text{TiO} + 0.3415 \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3$
205	98	1.000	-18.137	$2 \text{ Mn} + 2 \text{ O}_2 + \text{Ti} \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4$
206	99	0.125	-0.272	$0.05467 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.01531 \text{ Fe}\text{O} + 0.1741 \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.1293 \text{Li}\text{Fe}_5\text{O}_8 + 0.0175 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}\text{Fe}\text{O}_2$
207	99	0.125	-0.287	$0.03727 Fe_2O_3 + 0.05176 Fe_3O_4 + 0.01449 FeO + 0.05424 Li_2O + 0.1542 Li_5FeO_4 + 0.1203 LiFe_5O_8 + 0.01656 O_2 \longrightarrow LiFeO_2$
208	99	0.125	-0.290	$0.05828 Fe_3O_4 + 0.01632 FeO + 0.05268 Li_2O + 0.1527 Li_5FeO_4 + 0.1312 LiFe_5O_8 + 0.01865 O_2 \longrightarrow LiFeO_2$
209	99	0.125	-0.267	$0.03795 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.05357 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.05402 \text{Li}_2\text{O} + 0.154 \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.1219 \text{Li}\text{Fe}_5\text{O}_8 + 0.01339 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}\text{Fe}\text{O}_2$
210	99	0.125	-0.251	$0.05674 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_5 \text{Fe} \text{O}_4 + 0.1312 \text{Li}_{15} \text{Fe}_5 \text{O}_8 + 0.01418 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_{15} \text{Fe}_2 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_{15} \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1312 \text{Li}_{15} \text{Fe}_5 \text{O}_8 + 0.01418 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_{15} \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_{15} \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1312 \text{Li}_{15} \text{Fe}_5 \text{O}_8 + 0.01418 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_{15} \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_{15} \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_{15} \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_{15} \text{Pe}_3 \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_{15} \text{Pe}_3 \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_{15} \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_{15} \text{Pe}_3 \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_{15} \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_{15} \text{Pe}_3 \text{O}_4 \text{Pe}_3 \text{O}_4 + 0.1738 \text{Li}_{15} \text{Pe}_3 \text$
211	99	0.125	-0.250	$0.03555 \text{Fe}_2 \text{O}_3 + 0.05018 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1759 \text{Li}_5 \text{Fe} \text{O}_4 + 0.1205 \text{Li}_5 \text{Fe}_5 \text{O}_8 + 0.01255 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{Fe} \text{O}_2$
212	99	0.125	-0.268	$0.0349 \text{Fe}_2 \text{O}_3 + 0.04847 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.01357 \text{FeO} + 0.1762 \text{Li}_5 \text{FeO}_4 + 0.119 \text{LiFe}_5 \text{O}_8 + 0.01551 \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2$
213	99	0.125	-0.268	$0.06045 \mathrm{Fe_3O_4} + 0.05239 \mathrm{Li_2O} + 0.1524 \mathrm{Li_5FeO_4} + 0.1332 \mathrm{LiFe_5O_8} + 0.01511 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{LiFeO_2}$
214	100	1.000	-1.838	$3 \operatorname{CoO} + 0.5 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Co}_3 \operatorname{O}_4$
215	101	1.000	-2.202	$0.1429Mn_{3}O_{4} + 0.4286MnO + 0.1429MnO_{2} + 0.1429Ti_{3}O_{5} + 0.4286TiO + 0.1429TiO_{2} + 0.1429O_{2} \longrightarrow TiMnO_{3}$
216	102	1.000	-1.163	$MnO + 0.3333 MnO_2 + 0.3333 TiO + 0.6667 TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
217	103	1.000	-0.230	$Fe_2O_3 + FeO \longrightarrow Fe_3O_4$
218	104	0.500	-6.760	$0.125Fe_{2}O_{3} + 0.125Fe_{3}O_{4} + 4.125FeO + 0.125Li_{2}O + 0.125Li_{5}FeO_{4} + 0.125LiFeO_{2} + 1.063O_{2} \longrightarrow LiFe_{5}O_{8}$
219	104	0.500	-6.846	$0.1429 \text{Fe}_2 \text{O}_3 + 0.1429 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 4.143 \text{FeO} + 0.1429 \text{Li}_2 \text{O} + 0.1429 \text{Li}_5 \text{FeO}_4 + 1.071 \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5 \text{O}_8$
220	105	1.000	-1.042	$0.3333Mn_2O_3 + 1.167MnO + 0.1667Ti_3O_5 + 0.1667TiO + 0.1667TiO_2 + 0.1667TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
221	106	0.250	-1.571	$0.157 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.02907 \mathrm{MnO} + 0.314 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.1221 \mathrm{TiO} + 0.25 \mathrm{TiMn_2O_4} + 0.1395 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
222	106	0.250	-1.521	$0.1432Mn_3O_4 + 0.08378MnO_2 + 0.3135Ti_2O_3 + 0.1297TiO + 0.2432TiMn_2O_4 + 0.1081O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
223	106	0.250	-1.545	$0.164 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.3119 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.1222 \mathrm{TiO} + 0.254 \mathrm{TiMn_2O_4} + 0.135 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
224	106	0.250	-1.545	$0.1369Mn_3O_4 + 0.02689MnO + 0.08313MnO_2 + 0.3154Ti_2O_3 + 0.1296TiO + 0.2396TiMn_2O_4 + 0.1125O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
225	107	0.333	-0.455	$0.2097 \mathrm{V_2O_3} + 0.2419 \mathrm{V_2O_5} + 0.09677 \mathrm{VO} + 0.03226 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{VO_2}$
226	107	0.333	-0.249	$0.25\mathrm{V}_2\mathrm{O}_3 + 0.25\mathrm{V}_2\mathrm{O}_5 \longrightarrow \mathrm{VO}_2$
227	107	0.333	-0.325	$0.1923 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.2692 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.07692 \text{ VO} \longrightarrow \text{VO}_2$
228	108	1.000	-0.241	$0.4 \text{Li}_2\text{O} + 0.2 \text{LiFe}_5\text{O}_8 \longrightarrow \text{LiFe}\text{O}_2$
229	109	1.000	-5.386	$0.5 O_2 + Ti \longrightarrow TiO$
230	110	1.000	-19.904	$2 \text{ Al} + \text{Ni} + 2 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Al}_2 \text{NiO}_4$
231	111	1.000	-0.668	$1.19 \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.619 \text{Ti}_{\text{O}_2} + 0.09524 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3 \text{O}_5$
232	112	0.143	-0.457	$0.4091 \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.6364 \text{Cr}\text{O}_2 + 0.2273 \text{Cu}_2\text{O} + 0.5455 \text{CuO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4$
233	112	0.143	-0.771	$0.4 \mathrm{Cr}_3\mathrm{O}_4 + 0.8 \mathrm{Cr}\mathrm{O}_2 + 0.2 \mathrm{Cu}_2\mathrm{O} + 0.6 \mathrm{Cu}\mathrm{O} \longrightarrow \mathrm{Cr}_2\mathrm{Cu}\mathrm{O}_4$
234	112	0.143	-0.481	$0.3333 \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.3333 \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{Cr}_2 + \text{CuO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4$
235	112	0.143	-0.687	$0.1667 \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{Cr}_3\text{O}_4 + 1.167 \text{Cr}_2 + 0.5 \text{Cu}_2\text{O} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Cu}_4$
236	112	0.143	-0.741	$0.5 \operatorname{Cr}_{3} \operatorname{O}_{4} + 0.5 \operatorname{Cr} \operatorname{O}_{2} + \operatorname{CuO} \longrightarrow \operatorname{Cr}_{2} \operatorname{CuO}_{4}$
237	112	0.143	-0.691	$0.2903 \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.4194 \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.1613 \text{Cr}\text{O}_2 + \text{CuO} + 0.06452 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4$
238	112	0.143	-0.816	$0.25 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + 1.25 \operatorname{CrO}_2 + 0.5 \operatorname{Cu}_2 \operatorname{O} \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{CuO}_4$
239	113	0.500	-1.414	$0.1429Mn_2O_3 + 1.429MnO + 0.2857MnO_2 + 0.1429Ti_2O_3 + 0.1429Ti_3O_5 + 0.1429TiO + 0.1429TiO_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
240	113	0.500	-1.245	$0.125Mn_2O_3 + 1.375MnO + 0.25MnO_2 + 0.125Ti_2O_3 + 0.125Ti_3O_5 + 0.125TiO + 0.125TiO_2 + 0.125TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
241	114	1.000	-14.085	$Mn + 1.5 O_2 + Ti \longrightarrow TiMnO_3$
242	115	1.000	-3.370	$MnO + MnO_2 + TiO \longrightarrow TiMn_2O_4$
243	116	1.000	-1.345	$0.1667 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \mathrm{MnO} + 0.3333 \mathrm{MnO_2} + 0.5 \mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
244	117	1.000	-9.939	$2 \operatorname{Mn} + 1.5 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Mn}_2 \operatorname{O}_3$

```
Weight
                                                             \Delta_r H
               Label
                                                                                   Reaction
                                                          eV/atom
245
                   118
                                      1.000
                                                             -2.122
                                                                                  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}_3 \, \text{O}_4 + 0.2684 \, \text{Fe} \, \text{O}_4 + 0.262 \, \text{Li}_2 \, \text{O}_4 + 0.476 \, \text{Li}_2 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.2684 \, \text{O}_4 \, \text{O}_4 \, \text{O}_4 + 0.2684 \, \text{O}_4 \, \text{O}_4 \, \text{O}_4 + 0.2684 \, \text{O}_4 \, \text{O}_4 + 0.2684 \, \text{O}_4 \, \text{O}_4 + 0.2684 \, \text{O}_4 \, \text{O
                   119
                                      1.000
                                                             -2.819
246
                                                                                  Fe + 0.5 O_2 \longrightarrow FeO
                                      0.500
                                                             -1.594
                                                                                  0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.625 \text{ MnO} + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.125 \text{ TiO} + 0.125 \text{ TiO}_2 + 0.125 \text{ TiMnO}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
247
                    120
248
                   120
                                      0.500
                                                             -1.141
                                                                                  0.1429 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 1.571 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.1429 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1429 \, \text{Ti} \, \text{O}_2 + 0.1429 \, \text{Ti} \, \text{Mn} \, \text{O}_3 + 0.07143 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4
249
                                      1.000
                                                             -4.398
                                                                                  TiO + 0.5 O_2 \longrightarrow TiO_2
                    121
250
                   122
                                      1.000
                                                             -2.245
                                                                                  0.2 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 1.2 \text{ Ti} \text{O} + 0.2 \text{ Ti} \text{O}_2 + 0.2 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2 \text{O}_3
251
                    123
                                      0.250
                                                             -1.396
                                                                                  0.2959 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1122 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1565 \,\mathrm{TiO} + 0.1769 \,\mathrm{TiO_2} + 0.04082 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
252
                    123
                                      0.250
                                                             -1.165
                                                                                  0.2778 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1111 \,\mathrm{TiO} + 0.2222 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
253
                   123
                                      0.250
                                                             -1.153
                                                                                  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
254
                   123
                                      0.250
                                                                                  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}
                                                             -1.449
255
                   124
                                      1.000
                                                             -0.481
                                                                                  0.1667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1667 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
256
                   125
                                      1.000
                                                             -9.784
                                                                                  O_2 + Ti \longrightarrow TiO_2
257
                                      1.000
                                                           -15.763
                                                                                 1.5 O_2 + 2 Ti \longrightarrow Ti_2O_3
                    126
258
                   127
                                      1.000
                                                             -1.397
                                                                                  MnO + 0.5 O_2 \longrightarrow MnO_2
259
                   128
                                      1.000
                                                           -25.489
                                                                                  2.5 O_2 + 3 Ti \longrightarrow Ti_3O_5
260
                   129
                                      0.500
                                                             -0.952
                                                                                  0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 1.167 \, \text{MnO} + 0.1667 \, \text{MnO}_2 + 0.3333 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{TiO}_2 + 0.1667 \, \text{TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
261
                    129
                                      0.500
                                                             -1.037
                                                                                  0.125 \, Mn_2O_3 + 0.125 \, Mn_3O_4 + 1.125 \, MnO + 0.125 \, MnO_2 + 0.375 \, Ti_2O_3 + 0.125 \, TiO_2 + 0.125 \, TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4
262
                   130
                                      1.000
                                                           -15.867
                                                                                  3 \operatorname{Cr} + 2 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4
263
                   131
                                      1.000
                                                             -2.130
                                                                                  2.024 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.9524 \text{ Fe}\text{O} + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} + 0.2381 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}_5\text{O}_8
264
                   132
                                      1.000
                                                             -0.239
                                                                                 0.5 \operatorname{Ti}_{2} O_{3} + 0.5 \operatorname{Ti}O + 1.5 \operatorname{Ti}O_{2} \longrightarrow \operatorname{Ti}_{3} O_{5}
265
                   133
                                                                                  0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1429 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5714 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                      1.000
                                                             -2.551
266
                   134
                                      1.000
                                                             -0.309
                                                                                  MnO + TiO_2 \longrightarrow TiMnO_3
267
                   135
                                      0.500
                                                             -1.848
                                                                                  0.1 \,\mathrm{Mn2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Mn3O_4} + 1.3 \,\mathrm{MnO} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.3 \,\mathrm{TiO} + 0.1 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn2O_4}
268
                   135
                                      0.500
                                                             -2.047
                                                                                  0.1111 \, Mn_2O_3 + 0.1111 \, Mn_3O_4 + 1.333 \, MnO + 0.1111 \, MnO_2 + 0.1111 \, Ti_2O_3 + 0.1111 \, Ti_3O_5 + 0.3333 \, TiO + 0.1111 \, TiO_2 + 0.1111 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
269
                   136
                                      1.000
                                                             -2.691
                                                                                  0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 1.333 \, \text{MnO} + 0.1667 \, \text{MnO}_2 + 0.6667 \, \text{TiO} + 0.1667 \, \text{TiO}_2 + 0.1667 \, \text{TiMnO}_3 + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
270
                   137
                                      1.000
                                                             -2.466
                                                                                 Co + 0.5 O_2 \longrightarrow CoO
271
                    138
                                      1.000
                                                             -3.931
                                                                                  0.4444 \text{ MnO} + 0.5556 \text{ MnO}_2 + \text{TiO} + 0.2222 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
272
                                      1.000
                   139
                                                             -0.755
                                                                                  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
273
                                                                                  0.3333 \,\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3 + 0.2121 \,\mathrm{MnO} + 0.1212 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.1515 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1818 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.1212 \,\mathrm{TiO} + 0.0303 \,\mathrm{TiO}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
                   140
                                      0.500
                                                             -1.300
274
                                      0.500
                                                                                  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
                    140
                                                             -1.314
275
                    141
                                      0.250
                                                             -1.214
                                                                                  0.08271 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.02256 \text{ MnO} + 0.06015 \text{ MnO}_2 + 0.2932 \text{ TiO} + 0.3308 \text{ TiO}_2 + 0.3759 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.07519 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
276
                    141
                                      0.250
                                                             -1.194
                                                                                  0.0885 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.06195 \text{ Mn}\text{O}_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{TiMn}\text{O}_3
277
                    141
                                      0.250
                                                             -1.220
                                                                                  0.1009 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.02752 \,\mathrm{MnO} + 0.2844 \,\mathrm{TiO} + 0.3303 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3853 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.09174 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
278
                    141
                                      0.250
                                                             -1.195
                                                                                  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}
279
                    142
                                      0.167
                                                             -1.615
                                                                                  0.1373 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1961 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05882 \,\mathrm{MnO} + 0.07843 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4902 \,\mathrm{TiO} + 0.5098 \,\mathrm{TiO_2} + 0.03922 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                                  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
280
                   142
                                      0.167
                                                             -1.405
                    142
281
                                      0.167
                                                             -1.576
                                                                                  0.1449 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2101 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07971 \text{ MnO}_2 + 0.4928 \text{ TiO} + 0.5072 \text{ TiO}_2 + 0.02899 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
282
                    142
                                      0.167
                                                             -1.635
                                                                                  0.1515 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2121 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06061 \,\mathrm{MnO} + 0.4848 \,\mathrm{TiO} + 0.5152 \,\mathrm{TiO_2} + 0.06061 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
283
                    142
                                      0.167
                                                             -1.594
                                                                                  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}
284
                    142
                                      0.167
                                                             -1.414
                                                                                  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}
 285
                    143
                                      1.000
                                                             -0.247
                                                                                  2 \text{Li}_2\text{O} + \text{Li}_5\text{FeO}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_4
286
                    144
                                      1.000
                                                           -12.515
                                                                                 Co + 1.5 O_2 + Ti \longrightarrow TiCoO_3
                                                                                 NiO + 0.4444 TiO + 0.5556 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
287
                    145
                                      1.000
                                                             -2.146
```

```
Weight
                                                            \Delta_r H
               Label
                                                                                  Reaction
                                                         eV/atom
288
                   146
                                     0.125
                                                            -1.071
                                                                                 0.1389 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2222 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05556 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1389 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1944 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08333 \,\mathrm{TiO} + 0.05556 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                     0.125
                                                                                 0.1579 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2105 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05263 \text{ MnO} + 0.1228 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2105 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03509 \text{ TiO} + 0.08772 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
289
                   146
                                                             -0.928
290
                                     0.125
                                                            -0.919
                                                                                 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}
                   146
                                                                                 0.1321 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2453 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1698 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2075 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03774 \text{ Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
291
                   146
                                     0.125
                                                            -0.908
292
                                     0.125
                                                                                 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
                   146
                                                             -0.964
293
                   146
                                     0.125
                                                            -1.060
                                                                                 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}
294
                   146
                                     0.125
                                                            -1.017
                                                                                 0.1546\,Mn_2O_3 + 0.2303\,Mn_3O_4 + 0.1327\,Ti_2O_3 + 0.2007\,Ti_3O_5 + 0.06469\,TiO + 0.06798\,TiO_2 + 0.006579\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
295
                   146
                                     0.125
                                                            -1.118
                                                                                 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
296
                   147
                                     1.000
                                                            -1.009
                                                                                 2 \text{ MnO} + \text{MnO}_2 \longrightarrow \text{Mn}_3\text{O}_4
297
                                     0.200
                                                                                 0.04348 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.04348 \text{ MnO}_2 + 0.1739 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04348 \text{ TiO}_2 + 0.4348 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.04348 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                   148
                                                            -0.675
298
                   148
                                     0.200
                                                                                 0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.1905 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.4286 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04762 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3
                                                            -0.727
299
                                     0.200
                                                                                 0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_4 + 0.04762 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04762 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.4286 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04762 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_4 + 0.04762 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_4 + 0.04762 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_4 + 0.04762 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_4 + 0.04762 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_4 + 0.04762 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.04762 \text{ Mn}_2\text{
                   148
                                                            -0.724
300
                   148
                                     0.200
                                                             -0.680
                                                                                 0.05556 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05556 \,\mathrm{TiO_2} + 0.4444 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.05556 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
301
                   148
                                     0.200
                                                            -0.787
                                                                                 0.05263 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.05263 \,\mathrm{MnO_2} + 0.05263 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1579 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.4211 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.05263 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
302
                   149
                                     1.000
                                                            -0.558
                                                                                 MnO + MnO_2 \longrightarrow Mn_2O_3
303
                   150
                                     0.333
                                                            -1.347
                                                                                 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
304
                   150
                                     0.333
                                                            -1.355
                                                                                 0.131 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.4276 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2966 \,\mathrm{MnO} + 0.1862 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.04828 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.3241 \,\mathrm{TiO} + 0.1586 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
305
                                     0.333
                   150
                                                            -1.504
                                                                                 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{TiMn}_2 \, \text{O}_4
306
                   151
                                     1.000
                                                            -2.998
                                                                                 0.6667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
307
                   152
                                     1.000
                                                            -0.356
                                                                                 2 \text{ Fe}_2 \text{O}_3 + \text{LiFeO}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5 \text{O}_8
308
                                     0.333
                   153
                                                            -0.799
                                                                                 0.1639 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2295 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.123 \,\mathrm{TiO_2} + 0.418 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 + 0.03279 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
309
                   153
                                     0.333
                                                            -1.030
                                                                                 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
310
                   153
                                     0.333
                                                            -0.701
                                                                                 0.2222 \text{ MnO}_2 + 0.2222 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ TiO}_2 + 0.3889 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
311
                   154
                                     1.000
                                                            -0.779
                                                                                 0.5 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + 0.5 \operatorname{Cr} \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{O}_3
312
                   155
                                     1.000
                                                            -0.369
                                                                                 2 \operatorname{MnO} + \operatorname{TiO}_2 \longrightarrow \operatorname{TiMn}_2 \operatorname{O}_4
313
                   156
                                     1.000
                                                            -2.615
                                                                                 0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 1.167 \, \text{Mn}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_3 + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
                                                                                 0.3333 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{O}_2
314
                   157
                                     0.500
                                                            -1.287
315
                                     0.500
                   157
                                                            -1.429
                                                                                 0.3182 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04545 \text{ TiO} + 0.1818 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiO}_2
316
                   158
                                     1.000
                                                            -5.389
                                                                                 Mn + O_2 \longrightarrow MnO_2
                                     1.000
317
                   159
                                                            -4.475
                                                                                 0.5 O_2 + V \longrightarrow VO
318
                   160
                                     0.500
                                                            -2.289
                                                                                 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
319
                   160
                                     0.500
                                                             -2.343
                                                                                 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
320
                   161
                                     1.000
                                                            -0.343
                                                                                 0.5 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.5 \text{ VO} + 1.5 \text{ VO}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
321
                   162
                                     1.000
                                                            -2.997
                                                                                 0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.8333 \,\mathrm{TiO} + 0.1667 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
322
                   163
                                     0.500
                                                            -1.625
                                                                                 0.5652 \text{ Mn}_3\text{O4} + 0.2609 \text{ MnO} + 0.04348 \text{ MnO}_2 + 0.6087 \text{ TiO} + 0.3913 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O4}
323
                                     0.500
                                                                                 0.5833 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \,\mathrm{MnO} + 0.5833 \,\mathrm{TiO} + 0.4167 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                   163
                                                            -1.530
324
                   164
                                     1.000
                                                           -12.632
                                                                                 1.5 \,\mathrm{O}_2 + 2 \,\mathrm{V} \longrightarrow \mathrm{V}_2\mathrm{O}_3
325
                                     1.000
                                                            -2.679
                                                                                 0.2857 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.2857 \text{ V}_2\text{O}_5 + 1.571 \text{ VO} + 0.2857 \text{ VO}_2 + 0.2857 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
                   165
326
                   166
                                     1.000
                                                            -2.484
                                                                                 Ni + 0.5 O_2 \longrightarrow NiO
327
                                                                                 0.1111 \text{ Mn}_3\text{O4} + 1.444 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.4444 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ TiMnO}_3 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                   167
                                     0.333
                                                            -1.603
328
                   167
                                     0.333
                                                            -1.796
                                                                                 0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.5 \text{ MnO} + 0.125 \text{ MnO}_2 + 0.5 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
329
                   167
                                     0.333
                                                            -1.612
                                                                                 0.1429 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.429 \,\mathrm{MnO} + 0.4286 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.1429 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                                                 0.09397\,Mn_2O_3 + 0.1385\,Mn_3O_4 + 0.04448\,MnO + 0.0495\,MnO_2 + 0.1198\,Ti_2O_3 + 0.1822\,Ti_3O_5 + 0.06241\,TiO_2 + 0.1514\,TiMn_2O_4 + 0.01004\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
330
                   168
                                     0.100
                                                             -0.827
```

```
Weight
                                                                                                                                          \Delta_r H
                                   Label
                                                                                                                                                                                          Reaction
                                                                                                                                   eV/atom
331
                                             168
                                                                                     0.100
                                                                                                                                          -0.856
                                                                                                                                                                                        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
 332
                                                                                                                                                                                        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 \longrightarrow 
                                             168
                                                                                     0.100
                                                                                                                                           -0.858
 333
                                                                                     0.100
                                                                                                                                           -0.969
                                                                                                                                                                                        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
                                             168
                                                                                                                                                                                        0.1005 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1467 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05435 \text{ Mn}_2\text{O}_7 + 0.1114 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1712 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05163 \text{ Ti}_2\text{O}_7 + 0.05978 \text{ Ti}_2\text{O}_7 + 0.1522 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.0163 \text{ O}_7 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1712 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05163 \text{ Ti}_2\text{O}_7 + 0.05978 \text{ Ti}_2\text{O}_7 + 0.1522 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.0163 \text{ O}_7 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_7 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2
  334
                                             168
                                                                                     0.100
                                                                                                                                           -0.939
 335
                                                                                     0.100
                                                                                                                                           -0.978
                                                                                                                                                                                        0.1052\,Mn_2O_3 + 0.1484\,Mn_3O_4 + 0.04323\,MnO + 0.1095\,Ti_2O_3 + 0.1736\,Ti_3O_5 + 0.04539\,TiO + 0.06412\,TiO_2 + 0.1506\,TiMn_2O_4 + 0.03746\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
                                             168
 336
                                             168
                                                                                     0.100
                                                                                                                                          -0.948
                                                                                                                                                                                        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{ TiO} + 0.0625 \text{ TiO}_2 + 0.1562 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.03125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
   337
                                             168
                                                                                     0.100
                                                                                                                                          -0.795
                                                                                                                                                                                        0.1\,Mn_2O_3 + 0.137\,Mn_3O_4 + 0.03704\,MnO + 0.06296\,MnO_2 + 0.1148\,Ti_2O_3 + 0.1852\,Ti_3O_5 + 0.07037\,TiO_2 + 0.1444\,TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3
 338
                                             168
                                                                                     0.100
                                                                                                                                          -0.782
                                                                                                                                                                                        0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1455 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05455 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1182 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1818 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06364 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1545 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 339
                                             168
                                                                                     0.100
                                                                                                                                          -0.791
                                                                                                                                                                                        0.09813 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1464 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04984 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.1199 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1807 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06075 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1573 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.003115 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1807 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06075 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1573 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.003115 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1807 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06075 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1573 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.003115 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1807 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06075 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1573 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.003115 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1807 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1807 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06075 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.06075 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.0
                                                                                     0.500
  340
                                             169
                                                                                                                                          -1.226
                                                                                                                                                                                        0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_7 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}_0\text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}_0\text{O}_4 + 0.1429 \text{ Ti}_0\text{O}_4
                                                                                     0.500
                                                                                                                                                                                        0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + \text{MnO} + 0.1667 \, \text{MnO}_2 + 0.1667 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1667 \, \text{TiO} \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
 341
                                             169
                                                                                                                                          -1.420
   342
                                                                                     1.000
                                                                                                                                          -1.220
                                            170
                                                                                                                                                                                        2 \text{ VO}_2 + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2 \text{O}_5
  343
                                             171
                                                                                     1.000
                                                                                                                                          -1.569
                                                                                                                                                                                        0.25 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 2.25 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{MnO_2} + 0.25 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_3O_4}
 344
                                            172
                                                                                     0.500
                                                                                                                                          -1.494
                                                                                                                                                                                        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
  345
                                            172
                                                                                     0.500
                                                                                                                                          -1.474
                                                                                                                                                                                        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
  346
                                             173
                                                                                     0.500
                                                                                                                                          -0.736
                                                                                                                                                                                        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{Li}_2\text{FeO}_2
 347
                                            173
                                                                                     0.500
                                                                                                                                          -0.667
                                                                                                                                                                                        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
                                            174
                                                                                     1.000
  348
                                                                                                                                           -6.164
                                                                                                                                                                                        4 \text{ FeO} + \text{LiFeO}_2 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
  349
                                            175
                                                                                     1.000
                                                                                                                                          -6.198
                                                                                                                                                                                        Cr + O_2 \longrightarrow CrO_2
  350
                                           176
                                                                                     0.500
                                                                                                                                          -0.626
                                                                                                                                                                                        0.6667 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.3333 \text{ FeO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
                                                                                                                                                                                        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
 351
                                             176
                                                                                     0.500
                                                                                                                                           -0.582
 352
                                            177
                                                                                     1.000
                                                                                                                                          -0.593
                                                                                                                                                                                        TiO + TiO_2 \longrightarrow Ti_2O_3
  353
                                            178
                                                                                     0.500
                                                                                                                                          -1.119
                                                                                                                                                                                        0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.125 \text{ Mn}_3\text{O}_7 + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_7 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_7
 354
                                             178
                                                                                     0.500
                                                                                                                                          -1.270
                                                                                                                                                                                        0.1429\,Mn_2O_3 + 0.1429\,Mn_3O_4 + 1.143\,MnO + 0.1429\,MnO_2 + 0.1429\,Ti_2O_3 + 0.1429\,Ti_3O_5 + 0.1429\,TiO + 0.1429\,TiO_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
  355
                                            179
                                                                                     1.000
                                                                                                                                          -2.168
                                                                                                                                                                                        CoO + 0.5 Ti_2O_3 + 0.25 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
  356
                                             180
                                                                                     1.000
                                                                                                                                          -0.731
                                                                                                                                                                                        VO + VO_2 \longrightarrow V_2O_3
 357
                                             181
                                                                                     1.000
                                                                                                                                      -13.404
                                                                                                                                                                                        2 \operatorname{Cr} + \operatorname{Cu} + 2 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{CuO}_4
  358
                                             182
                                                                                     0.250
                                                                                                                                                                                        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
                                                                                                                                          -1.192
  359
                                             182
                                                                                     0.250
                                                                                                                                          -1.131
                                                                                                                                                                                        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}
                                                                                     0.250
                                                                                                                                                                                        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}
  360
                                             182
                                                                                                                                          -1.100
  361
                                             182
                                                                                     0.250
                                                                                                                                                                                        0.1362 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.05164 \,\mathrm{MnO} + 0.08451 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3521 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2958 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.06573 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                                                                                          -1.156
  362
                                             183
                                                                                    1.000
                                                                                                                                          -0.266
                                                                                                                                                                                        CoO + TiO_2 \longrightarrow TiCoO_3
  363
                                             184
                                                                                     1.000
                                                                                                                                      -16.070
                                                                                                                                                                                        2.5 O_2 + 2 V \longrightarrow V_2 O_5
 364
                                            185
                                                                                     1.000
                                                                                                                                          -2.089
                                                                                                                                                                                        FeO + 2.5 Li_2O + 0.25 O_2 \longrightarrow Li_5FeO_4
  365
                                             186
                                                                                     1.000
                                                                                                                                          -2.271
                                                                                                                                                                                        2 \text{ MnO} + 0.5 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
                                                                                                                                                                                        0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.25 \text{ Mn}_2 + 0.25 \text{ Mn}_2 + 0.75 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiMn}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
   366
                                             187
                                                                                     1.000
                                                                                                                                          -2.150
 367
                                             188
                                                                                     1.000
                                                                                                                                          -2.275
                                                                                                                                                                                        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{ Lis}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.3254 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
                                                                                                                                                                                        0.4 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{MnO} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
  368
                                             189
                                                                                     0.500
                                                                                                                                          -1.126
  369
                                             189
                                                                                     0.500
                                                                                                                                          -1.119
                                                                                                                                                                                        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}
                                                                                     1.000
 370
                                             190
                                                                                                                                          -4.589
                                                                                                                                                                                        NiO + TiO + 0.5 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 371
                                             191
                                                                                     0.500
                                                                                                                                          -1.068
                                                                                                                                                                                        0.5 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 372
                                             191
                                                                                     0.500
                                                                                                                                          -1.040
                                                                                                                                                                                        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}
                                              192
373
                                                                                     0.500
                                                                                                                                           -2.323
                                                                                                                                                                                        0.5 \text{ TiO} + 0.5 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
```

	Label	Weight	$\Delta_r H$ eV/atom	Reaction
374	192	0.500	-2.363	$0.04 \mathrm{MnO_2} + 0.52 \mathrm{TiO} + 0.48 \mathrm{TiMn_2O_4} + 0.24 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
375	193	1.000	-1.740	$0.8571 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.4286 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ TiO}_2 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
376	194	1.000	-1.736	$0.6102 \text{Fe}_2 \text{O}_3 + 0.8475 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.2373 \text{FeO} + \text{LiFeO}_2 + 0.2712 \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5 \text{O}_8$
377	195	1.000	-4.663	$CoO + TiO + 0.5O_2 \longrightarrow TiCoO_3$
378	196	1.000	-7.425	$O_2 + V \longrightarrow VO_2$
379	197	1.000	-3.033	$0.3333 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \mathrm{MnO} + 0.6667 \mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
380	198	1.000	-3.134	$3 \text{ FeO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Fe}_3 \text{O}_4$
381	199	1.000	-0.793	$0.3333 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.8333 \mathrm{MnO} + 0.1667 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.1667 \mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
382	200	1.000	-0.286	$1.133 \mathrm{MnO} + 0.06667 \mathrm{MnO_2} + 0.06667 \mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.8 \mathrm{Ti}\mathrm{MnO}_3 \longrightarrow \mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4$
383	201	1.000	-3.258	$0.75 \mathrm{MnO} + 0.25 \mathrm{MnO}_2 + 0.75 \mathrm{TiO} + 0.25 \mathrm{TiO}_2 + 0.25 \mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3$
384	202	0.500	-0.300	$0.4286 \operatorname{Fe_2O_3} + 0.1429 \operatorname{Li_2O} + 0.1429 \operatorname{Li_5FeO_4} \longrightarrow \operatorname{LiFeO_2}$
385	202	0.500	-0.263	$0.4 \mathrm{Fe_2O_3} + 0.2 \mathrm{Li_5FeO_4} \longrightarrow \mathrm{LiFeO_2}$
386	203	1.000	-0.731	$0.5\mathrm{Mn_2O_3} + 1.5\mathrm{MnO} + 0.5\mathrm{MnO_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_3O_4}$
387	204	0.500	-2.147	$1.833MnO + 0.1667MnO_2 + 0.1667Ti_2O_3 + 0.1667Ti_3O_5 + 0.1667TiO + 0.1667O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
388	204	0.500	-1.893	$1.857MnO + 0.1429MnO_2 + 0.1429Ti_2O_3 + 0.1429Ti_3O_5 + 0.1429TiO + 0.1429TiO_2 + 0.1429O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
389	205	0.500	-1.641	$NiO + 0.381 Ti2O3 + 0.2381 TiO2 + 0.1905 O2 \longrightarrow TiNiO3$
390	205	0.500	-1.948	$NiO + 0.3333 Ti_2O_3 + 0.1111 TiO + 0.2222 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow TiNiO_3$
391	206	1.000	-1.021	$1.571MnO + 0.2857MnO_2 + 0.1429Ti_2O_3 + 0.1429Ti_3O_5 + 0.1429TiO_2 + 0.1429TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
392	207	1.000	-2.708	$1.345 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.3767 \text{FeO} + 0.2063 \text{Li}_2 \text{O} + 0.5874 \text{Li} \text{FeO}_2 + 0.4305 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li} \text{Fe}_5 \text{O}_8$
393	208	0.500	-0.711	$0.1667 Mn_2O_3 + 0.1111 Mn_3O_4 + 0.2778 Ti_2O_3 + 0.2778 TiO_2 + 0.1667 TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3$
394	208	0.500	-0.679	$0.25\mathrm{Mn_2O_3} + 0.25\mathrm{Ti_2O_3} + 0.25\mathrm{TiO_2} + 0.25\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
395	209	1.000	-1.490	$0.5333 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.6 \mathrm{MnO} + 0.1333 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.4 \mathrm{TiO} + 0.3333 \mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
396	210	1.000	-1.624	$0.3333 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \mathrm{MnO} + 0.1667 \mathrm{MnO_2} + 0.5 \mathrm{TiO} + 0.5 \mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
397	211	0.500	-2.357	$0.5 \operatorname{Mn_2O_3} + 0.1 \operatorname{Ti_3O_5} + 0.6 \operatorname{TiO} + 0.1 \operatorname{TiO_2} + 0.1 \operatorname{O_2} \longrightarrow \operatorname{TiMnO_3}$
398	211	0.500	-2.443	$0.4545 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ MnO}_2 + 0.09091 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.6364 \text{ TiO} + 0.09091 \text{ TiO}_2 + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
399	212	0.250	-1.625	$0.1429 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1429 \mathrm{MnO} + 0.4286 \mathrm{MnO_2} + 0.4286 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.1429 \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
400	212	0.250	-1.434	$0.1 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \mathrm{MnO} + 0.4 \mathrm{MnO_2} + 0.4 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.1 \mathrm{TiO} + 0.1 \mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
401	212	0.250	-1.415	$0.125 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.375 \mathrm{MnO_2} + 0.375 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.125 \mathrm{TiO} + 0.125 \mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
402	212	0.250	-1.226	$0.1111 \text{ Mn}_{3}O_{4} + 0.1111 \text{ Mn}O + 0.3333 \text{ Mn}O_{2} + 0.4444 \text{ Ti}_{2}O_{3} + 0.1111 \text{ TiMn}_{2}O_{4} \longrightarrow \text{TiMn}O_{3}$ $0.125 \text{ Mn}_{3}O_{4} + 0.4582 \text{ Mn}_{3}O_{4} + 0.5823 \text{ Ti}O_{4} + 0.4467 \text{ Ti}O_{4} + 0.275 \text{ TiMn}O_{3} \longrightarrow \text{TiMn}O_{3}$
403	213	0.500	-1.471 -1.439	$0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.4583 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.5833 \text{ TiO} + 0.04167 \text{ TiO}_2 + 0.375 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4$
404 405	213 214	0.500 1.000	-3.251	$0.1429 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.4286 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.5714 \mathrm{TiO} + 0.4286 \mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$ $0.3332 \mathrm{V_2O_2} + 2.300 + 0.3333 \mathrm{VO_2} + 0.3333 \mathrm{O_2} +$
406	214	1.000	-2.220	$0.3333 \text{ V}_2\text{O}_5 + 2 \text{ VO} + 0.3333 \text{ VO}_2 + 0.3333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5$ $\text{CoO} + 0.4444 \text{ TiO} + 0.5556 \text{ TiO}_2 + 0.2222 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3$
407	216	0.125	-0.636	$0.1739 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.04348 \mathrm{MnO_2} + 0.2174 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.04348 \mathrm{TiO_2} + 0.3043 \mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
408	216	0.125	-0.612	$0.2143 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.2143 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.07143 \mathrm{TiO_2} + 0.2857 \mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
409	216	0.125	-0.690	$0.1924 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09264 \text{ MnO} + 0.2209 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07601 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.2613 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.01425 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
410	216	0.125	-0.799	$0.2202 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.05204 \mathrm{Vino} + 0.2205 \mathrm{Ti_3O_3} + 0.05963 \mathrm{TiO} + 0.06881 \mathrm{TiO_2} + 0.2798 \mathrm{TiMn_2O_4} + 0.01835 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
411	216	0.125	-0.638	$0.2195 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07317 \text{ MnO} + 0.2195 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09756 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.2439 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
412	216	0.125	-0.661	$0.2273 \text{ Mm}_2O_3 + 0.06818 \text{ MnO} + 0.2159 \text{ Ti}_3O_5 + 0.01136 \text{ TiO} + 0.1023 \text{ TiO}_2 + 0.2386 \text{ TiMn}_2O_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
413	216	0.125	-0.705	$0.2125 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.2375 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.2875 \mathrm{TiMn_2O_4} + 0.0125 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
414	216	0.125	-0.676	$0.2353 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2059 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.02941 \text{ TiO} + 0.08824 \text{ TiO}_2 + 0.2647 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
415	217	0.500	-3.027	$0.6667 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ VO} + 0.5556 \text{ VO}_2 + 0.8889 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_5$
416	217	0.500	-2.805	$0.7143 \mathrm{V_{2}O_{3}} + 0.5714 \mathrm{VO_{2}} + 0.8571 \mathrm{O_{2}} \longrightarrow \mathrm{V_{2}O_{5}}$

```
Weight
                                                                                                \Delta_r H
                        Label
                                                                                                                                 Reaction
                                                                                           eV/atom
417
                             218
                                                           0.250
                                                                                                -1.233
                                                                                                                                0.08333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5833 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                             218
                                                           0.250
                                                                                                -1.212
418
                                                                                                                                0.06667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.06667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.6 \,\mathrm{MnO} + 0.06667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                             218
                                                           0.250
                                                                                                -1.162
419
                                                                                                                                0.07692 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.07692 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.6154 \,\mathrm{MnO} + 0.3077 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07692 \,\mathrm{TiO_2} + 0.07692 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
420
                            218
                                                           0.250
                                                                                                -1.156
                                                                                                                                0.0625 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.0625 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.625 \,\mathrm{MnO} + 0.0625 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3125 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.0625 \,\mathrm{TiO_2} + 0.0625 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                             219
                                                           1.000
                                                                                                -3.229
 421
                                                                                                                                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
422
                             220
                                                           1.000
                                                                                                -0.214
                                                                                                                                1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{TiO}_2 + 0.5 \,\mathrm{TiMnO}_3 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
 423
                             221
                                                           0.200
                                                                                                -0.872
                                                                                                                                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}
424
                             221
                                                           0.200
                                                                                                -0.775
                                                                                                                                0.3099 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07042 \,\mathrm{MnO} + 0.2817 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.02817 \,\mathrm{TiO} + 0.1268 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 425
                             221
                                                           0.200
                                                                                                -0.788
                                                                                                                                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}
                             221
                                                           0.200
 426
                                                                                                -0.746
                                                                                                                                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}
                             221
                                                           0.200
                                                                                                -1.003
                                                                                                                                0.3014 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09589 \,\mathrm{MnO} + 0.274 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08219 \,\mathrm{TiO} + 0.09589 \,\mathrm{TiO_2} + 0.0274 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
427
 428
                              222
                                                           0.333
                                                                                                                                0.2903 \,\mathrm{Cr}_2\mathrm{O}_3 + 0.4194 \,\mathrm{Cr}_3\mathrm{O}_4 + 0.1613 \,\mathrm{Cr}\mathrm{O}_2 + \mathrm{FeO} + 0.06452 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Cr}_2\mathrm{FeO}_4
                                                                                                -1.089
                             222
 429
                                                           0.333
                                                                                                -0.880
                                                                                                                                0.3333 \, \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.3333 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.3333 \, \text{Cr}_2 + \text{FeO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
430
                             222
                                                           0.333
                                                                                                -1.140
                                                                                                                                0.5 \operatorname{Cr}_3 O_4 + 0.5 \operatorname{Cr} O_2 + \operatorname{FeO} \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{FeO}_4
 431
                              223
                                                           0.167
                                                                                                -0.794
                                                                                                                                0.3 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{MnO} + 0.1 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiO} + 0.4 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 432
                             223
                                                           0.167
                                                                                                -0.847
                                                                                                                                0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1111 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1111 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1111 \,\mathrm{TiO} + 0.3333 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
433
                             223
                                                           0.167
                                                                                                -0.716
                                                                                                                                0.2727 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09091 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.09091 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.09091 \,\mathrm{TiO} + 0.3636 \,\mathrm{TiO_2} + 0.09091 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                             223
 434
                                                           0.167
                                                                                                -0.682
                                                                                                                                0.25 \text{ Mn}_3\text{O4} + 0.08333 \text{ MnO} + 0.08333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.08333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08333 \text{ TiO} + 0.4167 \text{ TiO}_2 + 0.08333 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
435
                             223
                                                           0.167
                                                                                                -0.802
                                                                                                                                0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiO} + 0.3 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
436
                             223
                                                           0.167
                                                                                                -0.694
                                                                                                                                0.25 \text{ Mn}_3 O_4 + 0.125 \text{ Ti}_3 O_5 + 0.125 \text{ Ti}O + 0.375 \text{ Ti}O_2 + 0.125 \text{ Ti}Mn_2 O_4 \longrightarrow \text{Ti}MnO_3
                             224
437
                                                           0.167
                                                                                                -1.020
                                                                                                                                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}
438
                              224
                                                           0.167
                                                                                                -1.072
                                                                                                                                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
439
                             224
                                                           0.167
                                                                                                -0.934
                                                                                                                                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
 440
                             224
                                                           0.167
                                                                                                -0.905
                                                                                                                                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{Co}_3
441
                               224
                                                           0.167
                                                                                                -1.188
                                                                                                                                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{ TiO} + 0.07246 \text{ TiO}_2 + 0.02899 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
442
                              224
                                                           0.167
                                                                                                -1.228
                                                                                                                                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
443
                              225
                                                           1.000
                                                                                                -3.297
                                                                                                                                0.4 \text{ V}_3 \text{ O}_5 + 0.4 \text{ VO} + 0.4 \text{ VO}_2 + 0.9 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2 \text{ O}_5
                              226
                                                           1.000
 444
                                                                                                -2.812
                                                                                                                               Mn_2O_3 + TiO \longrightarrow TiMn_2O_4
                             227
                                                                                                                                0.1111 \text{ MnO} + 0.2222 \text{ MnO}_2 + 0.2222 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.3333 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
445
                                                           0.143
                                                                                                -0.734
                             227
                                                           0.143
                                                                                                -0.712
446
                                                                                                                                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{O}_4 + 0.02034 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{3} \text{MnO}_3
447
                             227
                                                           0.143
                                                                                                -0.656
                                                                                                                                0.1277 \text{ MnO} + 0.1915 \text{ MnO}_2 + 0.1915 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.08511 \text{ Ti}_{O_2} + 0.3404 \text{ Ti}_{Mn} \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_{Mn} \text{O}_3
448
                             227
                                                           0.143
                                                                                                -0.684
                                                                                                                                0.125 \text{ MnO} + 0.2 \text{ MnO}_2 + 0.1875 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.0125 \text{ TiO} + 0.0875 \text{ Ti}_{02} + 0.3375 \text{ Ti}_{02} + 0.3375 \text{ Ti}_{02} + 0.3375 \text{ Ti}_{03} + 0.0125 \text{ Ti}_{03} + 0.0125 \text{ Ti}_{03} + 0.0125 \text{ Ti}_{04} + 0.0125 \text{ Ti}_{04
449
                             227
                                                           0.143
                                                                                                -0.862
                                                                                                                                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
450
                            227
                                                           0.143
                                                                                                -0.795
                                                                                                                                0.1385 \,\mathrm{MnO} + 0.1538 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2154 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.3538 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 + 0.03077 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
451
                              227
                                                           0.143
                                                                                                -0.951
                                                                                                                                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
                              228
 452
                                                           0.143
                                                                                                -1.293
                                                                                                                                0.08333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.583 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                             228
453
                                                           0.143
                                                                                                -1.222
                                                                                                                                0.07692 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07692 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.615 \text{ MnO} + 0.3077 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07692 \text{ Ti}_{O_2} + 0.07692 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                                                                                -1.272
454
                             228
                                                           0.143
                                                                                                                                0.06667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.06667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.6 \,\mathrm{MnO} + 0.06667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
455
                             228
                                                           0.143
                                                                                                -1.139
                                                                                                                                0.07143 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07143 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.571 \text{ MnO} + 0.2857 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07143 \text{ Ti}_2 + 0.07143 \text{ Ti}_3 + 0.07143 \text{ O}_3 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Nn}_2\text{O}_4
                             228
                                                           0.143
456
                                                                                                -1.197
                                                                                                                                0.0625 \, Mn_2O_3 + 0.0625 \, Mn_3O_4 + 1.563 \, MnO + 0.0625 \, MnO_2 + 0.3125 \, Ti_3O_5 + 0.0625 \, TiMnO_3 + 0.0625 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
 457
                              228
                                                           0.143
                                                                                                -1.148
                                                                                                                                0.05882\,Mn_2O_3 + 0.05882\,Mn_3O_4 + 1.588\,MnO + 0.05882\,MnO_2 + 0.2941\,Ti_3O_5 + 0.05882\,TiO_2 + 0.05882\,TiMnO_3 + 0.05882\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.05882\,Mn_2O_3 + 0.05882\,Mn_2O_4 + 0.05882\,MnO_2 + 0.05882\,MnO_3 + 0.05882\,MnO
458
                             228
                                                           0.143
                                                                                                -1.216
                                                                                                                                0.0625 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.0625 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 1.625 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.0625 \, \text{Mn} \, \text{O}_2 + 0.3125 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.0625 \, \text{Ti}_2 + 0.0625 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.0625 \, \text{O}_2 + 0.0625 \, 
                              229
459
                                                           0.250
                                                                                                -0.312
                                                                                                                                0.08333 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.08333 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.08333 \text{ VO} \longrightarrow \text{VO}_2
```

```
Weight
                                                                                      \Delta_r H
                     Label
                                                                                                                    Reaction
                                                                                 eV/atom
460
                          229
                                                     0.250
                                                                                      -0.400
                                                                                                                   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
                           229
                                                     0.250
                                                                                                                   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
461
                                                                                      -0.460
                          229
                                                     0.250
462
                                                                                      -0.217
                                                                                                                   0.07143 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.2143 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.1429 \text{ V}_3\text{O}_5 \longrightarrow \text{VO}_2
 463
                          230
                                                     1.000
                                                                                      -3.310
                                                                                                                  MnO_2 + TiO \longrightarrow TiMnO_3
                          231
                                                     1.000
                                                                                      -0.536
 464
                                                                                                                   TiO + 2TiO_2 \longrightarrow Ti_3O_5
465
                          232
                                                     0.500
                                                                                      -1.720
                                                                                                                   0.1429 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.1429 \text{ V}_3\text{O}_5 + 1.286 \text{ VO} + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_3
 466
                          232
                                                     0.500
                                                                                      -1.597
                                                                                                                   0.125 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.125 \text{ V}_3\text{O}_5 + 1.25 \text{ VO} + 0.125 \text{ VO}_2 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_3
467
                           233
                                                     0.500
                                                                                      -1.105
                                                                                                                   0.375\,Mn_2O_3 + 1.125\,MnO + 0.125\,Ti_2O_3 + 0.125\,Ti_3O_5 + 0.125\,TiO + 0.125\,TiO_2 + 0.125\,TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4
 468
                          233
                                                     0.500
                                                                                      -1.255
                                                                                                                   0.4286 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.143 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
                          234
                                                     1.000
 469
                                                                                      -2.050
                                                                                                                   1.238 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.5238 \text{ VO} + 0.381 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
470
                          235
                                                     0.250
                                                                                                                   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}
                                                                                      -1.153
                           235
                                                     0.250
                                                                                                                   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}
471
                                                                                      -1.071
                          235
                                                     0.250
                                                                                      -1.105
                                                                                                                   0.1364 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.04545 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2273 \text{ Mn}_2\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 + 0.2273 \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}_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}_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
472
473
                           235
                                                     0.250
                                                                                      -1.172
                                                                                                                   0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.04286 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2429 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.4 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.02857 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.1714 \text{ Ti}_2\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{Mn}_2\text{O}_3
474
                          236
                                                     1.000
                                                                                      -2.264
                                                                                                                   MnO + 0.4444 TiO + 0.5556 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
475
                          237
                                                     1.000
                                                                                      -0.619
                                                                                                                   2.4 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8
476
                          238
                                                     1.000
                                                                                      -1.228
                                                                                                                   1.5 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ MnO}_2 + 0.1667 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1667 \text{ TiO} + 0.1667 \text{ Ti}_2 + 0.1667 \text{ Ti}_3 \text{MnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
                           239
                                                     0.200
                                                                                      -2.354
 477
                                                                                                                   0.6364 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09091 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.7273 \,\mathrm{TiO} + 0.09091 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.09091 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
478
                          239
                                                     0.200
                                                                                      -2.330
                                                                                                                   0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.6667 \,\mathrm{TiO} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
479
                           239
                                                     0.200
                                                                                      -2.213
                                                                                                                   0.6429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07143 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.7143 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.07143 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.07143 \text{ Ti}_3\text{O}_4 + 0.07143 \text{ O}_3 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                          239
                                                     0.200
                                                                                      -2.294
 480
                                                                                                                   0.625 \, Mn_3O_4 + 0.0625 \, MnO_2 + 0.0625 \, Ti_2O_3 + 0.75 \, TiO + 0.0625 \, TiO_2 + 0.0625 \, TiMnO_3 + 0.0625 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
481
                           239
                                                     0.200
                                                                                      -2.380
                                                                                                                   0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.75 \,\mathrm{TiO} + 0.08333 \,\mathrm{TiO_2} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
482
                          240
                                                     0.167
                                                                                      -1.409
                                                                                                                   0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 483
                           240
                                                     0.167
                                                                                      -1.274
                                                                                                                   0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2857 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04762 \text{ MnO}_2 + 0.4762 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.04762 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.04762 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 484
                           240
                                                     0.167
                                                                                      -1.278
                                                                                                                   0.3158 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05263 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4737 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.05263 \,\mathrm{TiO_2} + 0.05263 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 485
                           240
                                                     0.167
                                                                                      -1.408
                                                                                                                   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}
 486
                          240
                                                     0.167
                                                                                      -1.342
                                                                                                                   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}
 487
                           240
                                                     0.167
                                                                                      -1.478
                                                                                                                   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}
488
                          241
                                                     0.125
                                                                                      -0.746
                                                                                                                   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}
                                                     0.125
                                                                                      -0.999
 489
                          241
                                                                                                                   0.1683 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.0495 \,\mathrm{MnO} + 0.06931 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2475 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06931 \,\mathrm{TiO} + 0.1881 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.0396 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
490
                          241
                                                     0.125
                                                                                      -0.728
                                                                                                                   0.1757 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.09459 \text{ Mn}_{2} + 0.2703 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1892 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_3
 491
                           241
                                                     0.125
                                                                                      -0.808
                                                                                                                   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
 492
                           241
                                                     0.125
                                                                                      -0.748
                                                                                                                   0.1684 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.03158 \text{ MnO} + 0.1053 \text{ MnO}_2 + 0.2737 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1789 \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{T
 493
                          241
                                                     0.125
                                                                                      -0.962
                                                                                                                   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
494
                          241
                                                     0.125
                                                                                      -0.789
                                                                                                                   0.1649 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05155 \text{ MnO} + 0.06186 \text{ MnO}_2 + 0.268 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1959 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02062 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{MnO}_3
                                                                                                                   0.1765\,Mn_{3}O_{4} + 0.1176\,MnO_{2} + 0.2647\,Ti_{3}O_{5} + 0.02941\,TiO + 0.1765\,TiMn_{2}O_{4} \longrightarrow TiMnO_{3}
 495
                           241
                                                     0.125
                                                                                      -0.807
                          242
                                                     1.000
496
                                                                                      -3.681
                                                                                                                   2 \text{ VO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_3
                           243
                                                     1.000
                                                                                                                   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
497
                                                                                      -2.619
 498
                          244
                                                     0.167
                                                                                      -1.092
                                                                                                                   0.1455 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2136 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.06811 \text{ MnO} + 0.3019 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09443 \text{ TiO} + 0.01858 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 499
                          244
                                                     0.167
                                                                                      -1.045
                                                                                                                   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}
500
                           244
                                                     0.167
                                                                                      -0.955
                                                                                                                   0.1628 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2093 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04651 \text{ MnO} + 0.314 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05814 \text{ TiO} \longrightarrow \text{TiMnO}_3
501
                           244
                                                     0.167
                                                                                      -0.989
                                                                                                                   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}
502
                           244
                                                     0.167
                                                                                      -1.091
                                                                                                                   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}
```

```
Weight
                                                                             \Delta_r H
                   Label
                                                                                                         Reaction
                                                                         eV/atom
503
                        244
                                                0.167
                                                                             -1.072
                                                                                                       0.1333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06667 \,\mathrm{MnO} + 0.06667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                1.000
                                                                                                       0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.8333 \, \text{MnO} + 0.1667 \, \text{MnO}_2 + 0.1667 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.3333 \, \text{TiO} + 0.1667 \, \text{TiO}_2 + 0.1667 \, \text{TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
504
                        245
                                                                             -1.458
505
                                                1.000
                                                                             -1.732
                                                                                                        1.667 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{TiO} + 0.3333 \,\mathrm{TiO}_2 + 0.3333 \,\mathrm{TiMnO}_3 + 0.1667 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2 \,\mathrm{O}_4
                        246
 506
                        247
                                                0.500
                                                                             -1.188
                                                                                                       0.125 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 1.25 \text{ Mn}_2 + 0.125 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.125 \text{ Ti}
507
                        247
                                                0.500
                                                                             -1.349
                                                                                                       0.1429 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 1.286 \, \text{MnO} + 0.2857 \, \text{MnO}_2 + 0.1429 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1429 \, \text{Ti}_0 + 0.1429 \, \text{Ti}_0 - \longrightarrow \text{Ti}_0 \text{Mn}_2 \text{O}_4
508
                        248
                                                1.000
                                                                             -0.758
                                                                                                       0.25 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.25 \text{ CoO} + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.5 \text{ Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{CoO}_3
 509
                        249
                                                0.500
                                                                             -2.274
                                                                                                       0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2222 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.1111 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5556 \text{ TiO} + 0.1111 \text{ TiO}_2 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
510
                        249
                                                0.500
                                                                             -2.145
                                                                                                       0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.125 \text{ Ti}_2 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_3
511
                        250
                                                1.000
                                                                             -2.019
                                                                                                       1.444 \text{ VO} + 1.556 \text{ VO}_2 + 0.2222 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_3 \text{O}_5
                                                1.000
                                                                                                       2 \operatorname{Cr} + 1.5 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{O}_3
512
                        251
                                                                           -11.812
513
                        252
                                                1.000
                                                                             -1.694
                                                                                                       1.833 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_{3} \,\mathrm{O}_{5} + 0.1667 \,\mathrm{Ti} \,\mathrm{O} + 0.1667 \,\mathrm{Ti} \,\mathrm{O}_{2} + 0.1667 \,\mathrm{Ti} \,\mathrm{MnO}_{3} + 0.1667 \,\mathrm{O}_{2} \longrightarrow \mathrm{Ti} \,\mathrm{Mn}_{2} \,\mathrm{O}_{4}
514
                        253
                                                1.000
                                                                             -0.495
                                                                                                       0.3333 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.6667 \text{ VO} + 0.3333 \text{ VO}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_3
515
                        254
                                                1.000
                                                                                                       0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_2 + 0.1667 \, \text{Mn}_2 + 0.3333 \, \text{TiO} + 0.5 \, \text{TiO}_2 + 0.1667 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_3 \, \text{TiMn}_3 \, \text{O}_4 = 0.1667 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 = 0.1667 \, \text{TiMn}_3 \,
                                                                             -1.155
516
                        255
                                                0.333
                                                                             -1.559
                                                                                                       0.6364 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09091 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5455 \,\mathrm{TiO} + 0.09091 \,\mathrm{TiO_2} + 0.09091 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
517
                        255
                                                0.333
                                                                             -1.479
                                                                                                       0.6 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{MnO} + 0.1 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.1 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
518
                        255
                                                0.333
                                                                             -1.637
                                                                                                       0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1111 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5556 \,\mathrm{TiO} + 0.1111 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
519
                        256
                                                1.000
                                                                             -2.087
                                                                                                       0.8333 \text{ MnO} + 0.1667 \text{ MnO}_2 + 0.1667 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1667 \text{ Ti}_0 + 0.1667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \text{MnO}_3
 520
                        257
                                                0.500
                                                                             -1.109
                                                                                                       0.5 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
 521
                        257
                                                0.500
                                                                             -1.372
                                                                                                       0.4286 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ VO} + 0.2857 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
 522
                        258
                                                0.250
                                                                             -1.045
                                                                                                       0.375 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.125 \text{ TiO} + 0.125 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
523
                        258
                                                0.250
                                                                             -1.018
                                                                                                       0.3636 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.09091 \,\mathrm{MnO} + 0.2727 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.09091 \,\mathrm{TiO} + 0.09091 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 524
                        258
                                                0.250
                                                                             -1.051
                                                                                                       0.3846 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07692 \text{ MnO} + 0.07692 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2308 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07692 \text{ TiO} + 0.07692 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 525
                        258
                                                0.250
                                                                             -1.083
                                                                                                       0.4 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiO} + 0.1 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
526
                        259
                                                0.250
                                                                             -1.875
                                                                                                       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}
 527
                         259
                                                0.250
                                                                             -1.917
                                                                                                       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
 528
                        259
                                                0.250
                                                                             -1.901
                                                                                                       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}
529
                        259
                                                0.250
                                                                             -1.971
                                                                                                       0.6667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.619 \,\mathrm{MnO} + 0.04762 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2857 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.4286 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 530
                        260
                                                0.500
                                                                             -1.810
                                                                                                       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
531
                        260
                                                0.500
                                                                             -1.771
                                                                                                       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
                                                1.000
 532
                        261
                                                                             -8.007
                                                                                                       5 \text{ FeO} + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} + 1.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
533
                        262
                                                1.000
                                                                           -17.367
                                                                                                       2 \text{ Al} + 1.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Al}_2 \text{O}_3
534
                        263
                                                0.500
                                                                             -0.327
                                                                                                       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
 535
                        263
                                                0.500
                                                                             -0.423
                                                                                                       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{Fe}\text{CuO}_2
536
                        264
                                                1.000
                                                                             -1.177
                                                                                                       0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.143 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.4286 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
537
                        265
                                                1.000
                                                                             -3.152
                                                                                                       1.238 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.5238 \text{ TiO} + 0.381 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{O}_5
                                                0.500
 538
                        266
                                                                             -2.674
                                                                                                       0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.8889 \,\mathrm{TiO} + 0.1111 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1111 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
539
                        266
                                                0.500
                                                                             -2.708
                                                                                                       0.6364 \,\mathrm{Mn}_3 \,\mathrm{O}_4 + 0.09091 \,\mathrm{Mn}_{2} + 0.9091 \,\mathrm{TiO} + 0.09091 \,\mathrm{TiO}_2 + 0.09091 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2 \,\mathrm{O}_4
 540
                        267
                                                0.250
                                                                             -1.759
                                                                                                       MnO + 0.1321 Ti_2O_3 + 0.2453 Ti_3O_5 + 0.1887 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
 541
                        267
                                                0.250
                                                                             -1.654
                                                                                                       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
                                                0.250
542
                        267
                                                                             -1.805
                                                                                                       MnO + 0.129 Ti_2O_3 + 0.2419 Ti_3O_5 + 0.01613 TiO + 0.1935 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
 543
                        267
                                                0.250
                                                                             -1.611
                                                                                                       MnO + 0.1186 Ti_2O_3 + 0.2203 Ti_3O_5 + 0.1017 TiO_2 + 0.1695 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
 544
                        268
                                                0.500
                                                                             -7.152
                                                                                                       0.125 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 4.5 \text{ FeO} + 0.125 \text{ Li}_2\text{O} + 0.125 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.125 \text{ Li}_5\text{FeO}_2 + 1.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8
                                                                                                       0.1429\,Fe_2O_3 + 4.571\,FeO + 0.1429\,Li_2O + 0.1429\,Li_5FeO_4 + 1.143\,O_2 \longrightarrow LiFe_5O_8
545
                         268
                                                0.500
                                                                             -7.293
```

```
Weight
                                                            \Delta_r H
               Label
                                                                                 Reaction
                                                         eV/atom
546
                   269
                                     1.000
                                                            -0.953
                                                                                 0.4444 \text{ FeO} + 0.4444 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1111 \text{ LiFe}_5\text{O}_8 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2
                   270
                                     1.000
                                                            -4.707
547
                                                                                 MnO + TiO + 0.5 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
548
                   271
                                     0.500
                                                                                 0.4286 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.09524 \text{ TiO} + 0.2381 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                            -1.158
549
                   271
                                     0.500
                                                            -1.473
                                                                                 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{ Ti}_2 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
550
                   272
                                     1.000
                                                            -4.767
                                                                                 2 \text{ MnO} + \text{TiO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
551
                   273
                                     0.167
                                                            -0.893
                                                                                 0.1871 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07143 \text{ MnO}_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
552
                   273
                                     0.167
                                                            -0.837
                                                                                 0.1842 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1316 \text{ MnO}_2 + 0.1053 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2105 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1579 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{MnO}_3
553
                   273
                                     0.167
                                                            -0.848
                                                                                 0.1793 \text{ Mn}_3\text{O4} + 0.02069 \text{ MnO} + 0.1379 \text{ MnO}_2 + 0.1034 \text{ Ti}_2\text{O3} + 0.2138 \text{ Ti}_3\text{O5} + 0.1517 \text{ TiMn}_2\text{O4} \longrightarrow \text{TiMnO}_3
554
                   273
                                     0.167
                                                            -1.066
                                                                                 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
555
                   273
                                     0.167
                                                            -1.028
                                                                                 0.1884 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07594 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1144 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1815 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.04734 \,\mathrm{TiO} + 0.1795 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.03945 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
556
                   273
                                     0.167
                                                            -0.937
                                                                                 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}
557
                   274
                                     1.000
                                                            -2.522
                                                                                 0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + \text{MnO} + 0.6667 \, \text{TiO} + 0.1667 \, \text{TiO}_2 + 0.1667 \, \text{TiMnO}_3 + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
558
                   275
                                     1.000
                                                            -1.076
                                                                                 0.1429 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 1.429 \, \text{Mn}_3 + 0.1429 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \text{O}_2 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \text{O}_3 + 0.07143 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3 \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.07143 \, \text{O}_3 + 0.07143 \,
559
                   276
                                     0.500
                                                            -2.248
                                                                                 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}
560
                  276
                                     0.500
                                                            -2.114
                                                                                 0.7143 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5714 \,\mathrm{MnO} + 0.7143 \,\mathrm{TiO} + 0.2857 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
561
                   277
                                     1.000
                                                            -2.008
                                                                                 0.5 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
562
                   278
                                     1.000
                                                            -1.288
                                                                                 V_2O_3 + 0.4444 VO + 0.5556 VO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow V_3O_5
                   279
                                     1.000
563
                                                             -0.637
                                                                                 0.5 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 2.5 \text{ Li}_2\text{O} \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4
564
                   280
                                     1.000
                                                            -2.274
                                                                                 0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.429 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.4286 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiO}_2 + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
565
                   281
                                     1.000
                                                            -0.292
                                                                                 0.5 \operatorname{Cr}_2 \operatorname{O}_3 + 0.25 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr} \operatorname{O}_2
                   282
566
                                     0.500
                                                             -0.311
                                                                                 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
567
                   282
                                     0.500
                                                            -0.449
                                                                                 0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.4048 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.1905 \text{ FeO} + 0.04762 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
568
                   283
                                     1.000
                                                            -1.809
                                                                                 0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiO}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
569
                   284
                                     0.500
                                                            -1.216
                                                                                 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}
570
                   284
                                     0.500
                                                            -1.207
                                                                                 0.1515 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1818 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.0303 \,\mathrm{MnO} + 0.1212 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1212 \,\mathrm{TiO} + 0.2121 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
571
                   285
                                     0.500
                                                            -2.078
                                                                                 0.1111 \, Mn_2O_3 + 0.1111 \, Mn_3O_4 + 1.222 \, MnO + 0.1111 \, MnO_2 + 0.1111 \, Ti_3O_5 + 0.4444 \, TiO + 0.1111 \, TiO_2 + 0.1111 \, TiMnO_3 + 0.1111 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
572
                   285
                                     0.500
                                                            -2.331
                                                                                 0.125\,Mn_2O_3 + 0.125\,Mn_3O_4 + 1.25\,MnO + 0.125\,MnO_2 + 0.125\,Ti_3O_5 + 0.5\,TiO + 0.125\,TiO_2 + 0.125\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
573
                   286
                                     1.000
                                                            -3.008
                                                                                 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.2 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.6 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
574
                   287
                                     1.000
                                                            -1.277
                                                                                 0.2 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.2 \text{ MnO} + 0.2 \text{ MnO}_2 + 0.2 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2 \text{ TiO} + 0.2 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.2 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
575
                                     1.000
                   288
                                                            -1.121
                                                                                 0.6667 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.1667 \,\mathrm{Ti}\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
576
                   289
                                     1.000
                                                            -1.181
                                                                                 0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.75 \text{ MnO} + 0.5 \text{ Ti}_2\text{O}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
577
                   290
                                     0.500
                                                            -1.432
                                                                                 0.1351 \,\mathrm{MnO} + 0.2432 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.08108 \,\mathrm{TiO} + 0.4324 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 + 0.1622 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
578
                   290
                                     0.500
                                                            -1.223
                                                                                 0.1294 \,\mathrm{MnO} + 0.2824 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.4353 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 + 0.1412 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
579
                   291
                                     1.000
                                                            -2.314
                                                                                1.482 \text{ Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1116 \text{ Li}_5 \text{Fe} \text{O}_4 + 0.4422 \text{ Li}_7 \text{Fe} \text{O}_2 + 0.3705 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_7 \text{Fe}_5 \text{O}_8
580
                   292
                                     0.500
                                                            -0.849
                                                                                 0.1429 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.286 \,\mathrm{MnO} + 0.2857 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1429 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                   292
                                     0.500
                                                                                 0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.25 \text{ MnO} + 0.25 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_7 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{MnO}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
581
                                                            -0.751
582
                   293
                                     1.000
                                                            -1.948
                                                                                 1.8 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti}_{2} \,\mathrm{O}_{3} + 0.2 \,\mathrm{Ti}_{0} + 0.2 \,\mathrm{Ti}_{0} + 0.2 \,\mathrm{Ti}_{0} \,\mathrm{MnO}_{3} + 0.2 \,\mathrm{O}_{2} \longrightarrow \mathrm{Ti}_{0} \,\mathrm{Mn}_{2} \,\mathrm{O}_{4}
583
                   294
                                     1.000
                                                            -2.323
                                                                                 2 \text{ MnO} + 0.4444 \text{ TiO} + 0.5556 \text{ TiO}_2 + 0.2222 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{ O}_4
584
                   295
                                     1.000
                                                            -0.221
                                                                                 0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{MnO} + 0.6667 \,\mathrm{MnO_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_2O_3}
585
                   296
                                     0.125
                                                            -0.907
                                                                                 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
586
                   296
                                     0.125
                                                            -1.007
                                                                                 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
587
                   296
                                     0.125
                                                             -0.948
                                                                                 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
                   296
                                                                                 0.1719 \text{ MnO} + 0.1641 \text{ Ti}_3 \text{ O}_5 + 0.02344 \text{ TiO} + 0.07031 \text{ TiO}_7 + 0.4141 \text{ TiMn}_7 \text{ O}_4 + 0.09375 \text{ O}_7 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
588
                                     0.125
                                                             -0.893
```

```
Weight
                                                         \Delta_r H
              Label
                                                                             Reaction
                                                      eV/atom
589
                 296
                                   0.125
                                                         -0.923
                                                                            0.1761 \text{ MnO} + 0.06977 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1296 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.0598 \text{ TiO}_2 + 0.412 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.09967 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                 296
                                   0.125
                                                         -1.035
                                                                            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
590
591
                                   0.125
                  296
                                                         -0.818
                                                                            0.1714 \text{ MnO} + 0.1714 \text{ Ti}_{3}\text{O}_{5} + 0.07143 \text{ Ti}_{O}_{2} + 0.4143 \text{ Ti}_{Mn}\text{O}_{4} + 0.08571 \text{ O}_{2} \longrightarrow \text{Ti}_{Mn}\text{O}_{3}
592
                 296
                                   0.125
                                                         -0.990
                                                                            0.1681 \,\mathrm{MnO} + 0.1858 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.02655 \,\mathrm{TiO} + 0.4159 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 + 0.1062 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
593
                  297
                                   1.000
                                                         -1.554
                                                                            0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5714 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiO}_2 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
594
                 298
                                   1.000
                                                       -14.844
                                                                            Co + 2 Cr + 2 O_2 \longrightarrow Cr_2 CoO_4
595
                  299
                                   0.500
                                                         -1.299
                                                                            0.4 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.4 \,\mathrm{MnO} + 0.06667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.4 \,\mathrm{TiO} + 0.4 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.03333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
596
                 299
                                   0.500
                                                         -1.205
                                                                            0.3846 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.3846 \text{ MnO} + 0.07692 \text{ MnO}_2 + 0.07692 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3846 \text{ TiO} + 0.3846 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
597
                  300
                                   1.000
                                                         -1.897
                                                                            Ti_2O_3 + 0.4444 TiO + 0.5556 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow Ti_3O_5
                                   1.000
                                                                            NiO + TiO_2 \longrightarrow TiNiO_3
598
                  301
                                                         -0.191
599
                  302
                                   1.000
                                                                            0.5 \text{ FeO} + 2.25 \text{ Li}_2\text{O} + 0.5 \text{ Li}_5\text{FeO}_2 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_4
                                                         -1.168
                  303
                                   0.500
                                                                            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}
600
                                                         -0.858
                  303
                                   0.500
                                                         -0.922
                                                                            0.1696 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07143 \text{ MnO} + 0.2768 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1518 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.2946 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.05357 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{MnO}_3
601
602
                  304
                                   1.000
                                                         -1.495
                                                                            0.4545 \text{ V}_2\text{O}_5 + 1.455 \text{ VO} + 0.6364 \text{ VO}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
603
                  305
                                   1.000
                                                         -2.408
                                                                            0.2857 \, Mn_2O_3 + 0.2857 \, Mn_3O_4 + 0.2857 \, MnO + 0.2857 \, MnO_2 + 0.1429 \, Ti_2O_3 + 0.7143 \, TiO \longrightarrow TiMn_2O_4
604
                  306
                                   0.091
                                                         -2.628
                                                                            0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.8 \,\mathrm{TiO} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
605
                  306
                                   0.091
                                                         -2.654
                                                                            0.6364 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09091 \,\mathrm{MnO_2} + 0.09091 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.8182 \,\mathrm{TiO} + 0.09091 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                   0.091
606
                  306
                                                         -2.668
                                                                            0.08333 \text{ Mn}_2\text{ O}_3 + 0.5833 \text{ Mn}_3\text{ O}_4 + 0.08333 \text{ Mn}_2\text{ O}_2 + 0.08333 \text{ Ti}_2\text{ O}_3 + 0.8333 \text{ Ti}_2\text{ O}_3 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{ Mn}_2\text{ O}_4
607
                  306
                                   0.091
                                                         -2.413
                                                                            0.07692 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6154 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07692 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.7692 \,\mathrm{TiO} + 0.07692 \,\mathrm{TiO_2} + 0.07692 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
608
                  306
                                   0.091
                                                         -2.392
                                                                            0.08333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5833 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.75 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.08333 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_3 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
609
                  306
                                   0.091
                                                         -2.449
                                                                            0.6429 \, \mathrm{Mn_3O_4} + 0.07143 \, \mathrm{MnO_2} + 0.07143 \, \mathrm{Ti_2O_3} + 0.7857 \, \mathrm{TiO} + 0.07143 \, \mathrm{TiO_2} + 0.07143 \, \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
610
                  306
                                   0.091
                                                         -2.432
                                                                            0.6154 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.07692 \, \text{Mn}_{\text{O}_2} + 0.07692 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.7692 \, \text{Ti}_0 + 0.07692 \, \text{Ti}_0 \text{Mn}_{\text{O}_3} + 0.07692 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_0 \text{Mn}_2 \text{O}_4
                  306
                                   0.091
                                                         -2.473
                                                                            0.06667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.06667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.8 \,\mathrm{TiO} + 0.06667 \,\mathrm{TiO_2} + 0.06667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
611
612
                  306
                                   0.091
                                                         -2.459
                                                                            0.07143 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5714 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07143 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.07143 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.7857 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.07143 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
613
                  306
                                   0.091
                                                         -2.253
                                                                            0.06667\,Mn_2O_3 + 0.6\,Mn_3O_4 + 0.06667\,Ti_2O_3 + 0.7333\,TiO + 0.06667\,TiO_2 + 0.06667\,TiMnO_3 + 0.06667\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
614
                  306
                                   0.091
                                                         -2.325
                                                                            0.05882\,Mn_{2}O_{3} + 0.5882\,Mn_{3}O_{4} + 0.05882\,MnO_{7} + 0.05882\,Ti_{2}O_{3} + 0.7647\,TiO + 0.05882\,TiO_{7} + 0.05882\,TiMnO_{3} + 0.05882\,O_{7} \longrightarrow TiMn_{2}O_{4} + 0.05882\,TiMnO_{7} 
615
                  307
                                   0.250
                                                         -1.016
                                                                            0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.333 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                  307
                                   0.250
616
                                                         -0.885
                                                                            0.1429 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.286 \,\mathrm{MnO} + 0.1429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2857 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1429 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
617
                  307
                                   0.250
                                                         -0.871
                                                                            0.09091 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.364 \text{ MnO} + 0.09091 \text{ MnO}_2 + 0.2727 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09091 \text{ Ti}_2 + 0.09091 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                   0.250
618
                  307
                                                         -0.921
                                                                            0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.3 \,\mathrm{MnO} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
619
                  308
                                   1.000
                                                         -1.294
                                                                            0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + \mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
620
                  309
                                   1.000
                                                         -2.110
                                                                            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}_6\text{Fe}\text{O}_2 + 0.3088 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_6\text{Fe}\text{O}_8
621
                  310
                                   1.000
                                                         -3.525
                                                                            1.667 \text{ TiO} + 0.3333 \text{ TiO}_2 + 0.3333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{O}_3
622
                 311
                                   1.000
                                                         -3.002
                                                                            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{LiFe}_5\text{O}_8
623
                 312
                                   1.000
                                                         -2.413
                                                                            1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.25 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
624
                  313
                                   1.000
                                                         -2.407
                                                                            3 \text{ MnO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Mn}_3 \text{O}_4
                 314
                                                                            0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + \text{MnO} + 0.25 \text{ MnO}_2 + 0.5 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiO}_2 + 0.25 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
625
                                   1.000
                                                         -1.653
                 315
                                   1.000
626
                                                         -2.865
                                                                            0.2075 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.5283 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.8679 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_5
627
                  316
                                   1.000
                                                         -1.947
                                                                            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
                 317
628
                                   0.333
                                                         -0.593
                                                                            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
629
                 317
                                   0.333
                                                         -0.538
                                                                            Cr_2O_3 + 0.381 Cu_2O + 0.2381 CuO + 0.1905 O_2 \longrightarrow Cr_2CuO_4
                                                         -0.718
630
                  317
                                   0.333
                                                                            Cr_2O_3 + 0.5 Cu_2O + 0.25 O_2 \longrightarrow Cr_2CuO_4
                  318
                                                                            0.3333 \,\mathrm{MnO} + 0.6667 \,\mathrm{TiO} + 0.3333 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.3333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
631
                                   1.000
                                                         -3.118
```

```
Weight
                                                                                                                                \Delta_r H
                                Label
                                                                                                                                                                             Reaction
                                                                                                                          eV/atom
632
                                        319
                                                                               1.000
                                                                                                                                -1.800
                                                                                                                                                                             1.857 \,\mathrm{MnO} + 0.1429 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.4286 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1429 \,\mathrm{TiO}_2 + 0.1429 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
                                         320
                                                                                                                                                                            0.08824 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1176 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05882 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.2647 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1176 \text{ Ti}_2\text{O}_4 + 0.1471 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.2059 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.05882 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.05882 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3
633
                                                                               0.200
                                                                                                                                -1.220
634
                                        320
                                                                               0.200
                                                                                                                                -0.937
                                                                                                                                                                            0.1129 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.09677 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.129 \, \text{Mn}_{2} + 0.2742 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.06452 \, \text{TiO} + 0.2097 \, \text{TiO}_2 + 0.1774 \, \text{TiMn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_{2} \text{O}_3 + 0.06452 \, \text{TiO}_4 + 0.109677 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.129 \, \text{Mn}_{2} + 0.2742 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.06452 \, \text{TiO}_4 + 0.2097 \, \text{TiO}_2 + 0.1774 \, \text{TiMn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.129 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.06452 \, \text{TiO}_4 + 0.2097 \, \text{TiO}_2 + 0.1774 \, \text{TiMn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.129 \, \text{Mn}_2 + 0.2097 \, \text{TiO}_2 + 0.2097 \, \text{TiO}_2 + 0.2097 \, \text{TiO}_3 + 0.06452 \, \text{TiO}_4 + 0.129 \, \text{Mn}_2 + 0.2097 \, \text{TiO}_3 + 0.06452 \, \text{TiO}_4 + 0.129 \, \text{Mn}_2 + 0.06452 \, \text{TiO}_4 + 0.064
 635
                                         320
                                                                               0.200
                                                                                                                                -1.230
                                                                                                                                                                            0.09774 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1278 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2632 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1128 \text{ TiO} + 0.1504 \text{ TiO}_2 + 0.2105 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.07519 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                         320
                                                                               0.200
                                                                                                                                                                            0.08559\,Mn_2O_3 + 0.1126\,Mn_3O_4 + 0.02703\,MnO + 0.05856\,MnO_2 + 0.2658\,Ti_2O_3 + 0.1171\,TiO + 0.1486\,TiO_2 + 0.2027\,TiMn_2O_4 + 0.06306\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.08559\,Mn_2O_3 + 0.08559\,Mn_2O_3 + 0.0856\,MnO_3 + 0.08560\,MnO_3 + 
636
                                                                                                                                -1.240
637
                                         320
                                                                               0.200
                                                                                                                                -1.251
                                                                                                                                                                            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 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.07945 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ O}_4 + 0.07945 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ O}_3 \text{ O}_4 + 0.07945 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}
 638
                                          321
                                                                               1.000
                                                                                                                                -2.312
                                                                                                                                                                            0.4 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.4 \,\mathrm{MnO} + 0.4 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.7 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
639
                                         322
                                                                               0.500
                                                                                                                                -0.559
                                                                                                                                                                            0.4286 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + 0.2857 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{MnO_2}
 640
                                        322
                                                                               0.500
                                                                                                                                -0.420
                                                                                                                                                                            0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{MnO_2}
                                          323
                                                                               0.500
                                                                                                                                                                            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
641
                                                                                                                                -1.496
                                        323
                                                                               0.500
                                                                                                                                                                            1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.5 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 \longrightarrow \mathrm{Ti}_2\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4
642
                                                                                                                                -1.573
                                         324
                                                                               1.000
                                                                                                                                                                            0.2857 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + 0.1429 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{TiO} + 0.5714 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 643
                                                                                                                                -0.793
                                          325
                                                                               1.000
                                                                                                                                -0.961
                                                                                                                                                                            0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 1.167 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.1667 \, \text{Mn} \, \text{O}_2 + 0.1667 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1667 \, \text{Ti} \, \text{Mn} \, \text{O}_3 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4
 644
645
                                         326
                                                                               0.500
                                                                                                                                -1.134
                                                                                                                                                                            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
 646
                                         326
                                                                               0.500
                                                                                                                                -1.045
                                                                                                                                                                            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
647
                                         327
                                                                               0.250
                                                                                                                                -1.839
                                                                                                                                                                            0.1586 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.2104 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.05178 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.411 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.178 \, \text{TiO} + 0.11 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
648
                                         327
                                                                               0.250
                                                                                                                                -1.803
                                                                                                                                                                            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}
                                        327
                                                                               0.250
649
                                                                                                                                -1.800
                                                                                                                                                                            0.1655 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.223 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.4101 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1799 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.1007 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_3
650
                                        327
                                                                               0.250
                                                                                                                                -1.764
                                                                                                                                                                            0.1481 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2037 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.09259 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.4074 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1852 \text{ Ti}\text{O} + 0.07407 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}\text{O}_3
651
                                          328
                                                                               0.500
                                                                                                                                -1.350
                                                                                                                                                                            0.2609 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04348 \text{ MnO} + 0.1739 \text{ MnO}_2 + 0.4348 \text{ TiO} + 0.5652 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
652
                                        328
                                                                               0.500
                                                                                                                                -1.362
                                                                                                                                                                            0.2778 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4444 \,\mathrm{TiO} + 0.5556 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
653
                                         329
                                                                               1.000
                                                                                                                                -1.955
                                                                                                                                                                            2 \text{ MnO} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Mn}_2 \text{O}_3
 654
                                         330
                                                                               0.143
                                                                                                                                -1.177
                                                                                                                                                                            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
655
                                         330
                                                                               0.143
                                                                                                                                -0.970
                                                                                                                                                                            0.2697 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07865 \,\mathrm{MnO} + 0.1124 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1461 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.236 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
656
                                         330
                                                                               0.143
                                                                                                                                -0.910
                                                                                                                                                                            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{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
657
                                         330
                                                                               0.143
                                                                                                                                -1.075
                                                                                                                                                                            0.2721 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08834 \text{ MnO} + 0.09541 \text{ MnO}_2 + 0.1319 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2014 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06243 \text{ TiO} + 0.06949 \text{ TiO}_2 + 0.01413 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
658
                                         330
                                                                               0.143
                                                                                                                                -0.998
                                                                                                                                                                            0.2723 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08926 \text{ MnO} + 0.0938 \text{ MnO}_2 + 0.1528 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2315 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.009077 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 659
                                         330
                                                                               0.143
                                                                                                                                -1.036
                                                                                                                                                                            0.2667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06667 \,\mathrm{MnO} + 0.1333 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2333 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.03333 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                        330
                                                                               0.143
                                                                                                                                -0.994
                                                                                                                                                                            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}
 660
                                                                               0.200
661
                                         331
                                                                                                                                -1.377
                                                                                                                                                                            0.08333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.75 \,\mathrm{MnO} + 0.08333 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 662
                                         331
                                                                               0.200
                                                                                                                                -1.439
                                                                                                                                                                            0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.778 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
663
                                         331
                                                                               0.200
                                                                                                                                -1.332
                                                                                                                                                                            0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.8 \,\mathrm{MnO} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
664
                                         331
                                                                               0.200
                                                                                                                                -1.463
                                                                                                                                                                            0.09091 \, Mn_2O_3 + 1.727 \, MnO + 0.09091 \, MnO_2 + 0.09091 \, Ti_2O_3 + 0.2727 \, Ti_3O_5 + 0.09091 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
 665
                                        331
                                                                               0.200
                                                                                                                                -1.299
                                                                                                                                                                            0.07692 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.769 \text{ MnO} + 0.07692 \text{ MnO}_2 + 0.3077 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07692 \text{ TiO}_2 + 0.07692 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                                                                                                                                                            0.06667\,Cr_2O_3 + 0.6\,Cr_3O_4 + 0.06667\,CrO_2 + 0.06667\,Fe_2O_3 + 0.06667\,Fe_3O_4 + 0.6667\,FeO + 0.06667\,O_2 \longrightarrow Cr_2FeO_4 \longrightarrow Cr_2FeO_4 + 0.06667\,O_2 \longrightarrow Cr_2FeO_4 \longrightarrow Cr_2F
666
                                        332
                                                                               0.250
                                                                                                                                -1.048
                                          332
                                                                               0.250
667
                                                                                                                                -1.091
                                                                                                                                                                            0.6667 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.08333 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.08333 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.5833 \text{ Fe}\text{O} + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Fe}\text{O}_4
                                         332
                                                                               0.250
                                                                                                                                -1.098
                                                                                                                                                                            0.6429 \text{ Cr}_3 \text{ O}_4 + 0.07143 \text{ Cr} \text{ O}_2 + 0.07143 \text{ Fe}_2 \text{ O}_3 + 0.07143 \text{ Fe}_3 \text{ O}_4 + 0.6429 \text{ Fe} \text{ O} + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2 \text{Fe} \text{ O}_4
668
                                         332
                                                                              0.250
669
                                                                                                                                -1.034
                                                                                                                                                                            0.07692 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.6154 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.07692 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.07692 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.6154 \text{ FeO} + 0.07692 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
670
                                        333
                                                                               1.000
                                                                                                                                -3.337
                                                                                                                                                                            0.2857 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.2857 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.2857 \text{ VO} + 0.2857 \text{ VO}_2 + 0.9286 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_5
                                         334
                                                                               1.000
671
                                                                                                                                -1.843
                                                                                                                                                                            FeO + 0.5 Li_2O + 0.25 O_2 \longrightarrow LiFeO_2
672
                                         335
                                                                               1.000
                                                                                                                                -2.568
                                                                                                                                                                           MnO + 0.4286 Ti_2O_3 + 0.1429 TiO + 0.2857 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
673
                                         336
                                                                               1.000
                                                                                                                                 -0.377
                                                                                                                                                                            0.5 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.5 \text{ VO} \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_3
                                          337
                                                                                                                                                                            0.6154 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07692 \text{ MnO} + 0.07692 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.07692 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.4615 \text{ TiO} + 0.07692 \text{ TiO}_2 + 0.07692 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
674
                                                                               0.250
                                                                                                                                -1.484
```

```
Label Weight
                                                                      \Delta_r H
                                                                                               Reaction
                                                                   eV/atom
675
                      337
                                           0.250
                                                                      -1.640
                                                                                              0.08333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5833 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08333 \text{ Mn}\text{O} + 0.08333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.08333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5 \text{ Ti}\text{O} + 0.08333 \text{ Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                      337
                                           0.250
                                                                                               0.625 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 0.125 \text{ MnO} + 0.125 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.5 \text{ TiO} + 0.125 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
676
                                                                      -1.546
                      337
                                           0.250
                                                                                              0.6364\,Mn_3O_4 + 0.09091\,MnO + 0.09091\,Ti_2O_3 + 0.09091\,Ti_3O_5 + 0.4545\,TiO + 0.09091\,TiO_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
677
                                                                      -1.533
678
                      338
                                           1.000
                                                                      -3.354
                                                                                              0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.1667 \, \text{Mn} \, \text{O}_2 + 0.8333 \, \text{TiO} + 0.1667 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 + 0.25 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_{03} \, \text{TiMn}_{03} \, \text{O}_{10} + 0.1667 \, \text{TiMn}_{10} \, \text{O}_{10} \, 
679
                      339
                                           0.250
                                                                       -0.762
                                                                                              0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.4 \,\mathrm{TiO_2} + 0.4 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
680
                      339
                                           0.250
                                                                      -0.846
                                                                                              0.08 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.02 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.14 \,\mathrm{MnO_2} + 0.24 \,\mathrm{TiO} + 0.44 \,\mathrm{TiO_2} + 0.32 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 681
                       339
                                           0.250
                                                                       -0.797
                                                                                              0.05556 \, Mn_3O_4 + 0.1667 \, MnO_2 + 0.2222 \, TiO + 0.4444 \, TiO_2 + 0.3333 \, TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3
682
                      339
                                           0.250
                                                                      -0.847
                                                                                              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}_2\text{O}_3
 683
                      340
                                           1.000
                                                                      -0.391
                                                                                              0.5 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.5 \, \text{Li}_2 \, \text{O} \longrightarrow \text{Li}_{2} \, \text{Fe}_{2} \, \text{C}_{2}
                                           0.250
                                                                                              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}
 684
                       341
                                                                      -1.211
                                                                                              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
685
                                           0.250
                      341
                                                                      -1.201
                      341
                                           0.250
                                                                      -1.229
                                                                                              0.08493 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1041 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.01918 \,\mathrm{MnO} + 0.3753 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2493 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.09315 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 686
                       341
                                           0.250
                                                                      -1.183
                                                                                              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}
 687
688
                      342
                                           1.000
                                                                      -1.540
                                                                                              0.25 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.75 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{TiO_2} + 0.25 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 689
                      343
                                           0.500
                                                                       -0.844
                                                                                              0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
690
                      343
                                           0.500
                                                                      -0.732
                                                                                              0.2857 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + \text{MnO} + 0.1429 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}_2 \text{O}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_3 \text{O}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
691
                       344
                                           0.500
                                                                      -1.038
                                                                                              0.375 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.125 \text{ TiO} + 0.125 \text{ TiO}_2 + 0.125 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                           0.500
 692
                       344
                                                                       -0.957
                                                                                              0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1111 \,\mathrm{MnO} + 0.1111 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1111 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1111 \,\mathrm{TiO} + 0.2222 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1111 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
693
                      345
                                           0.500
                                                                      -1.494
                                                                                              1.571 \text{ MnO} + 0.4286 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
694
                       345
                                           0.500
                                                                      -1.314
                                                                                              1.5 \text{ MnO} + 0.375 \text{ MnO}_2 + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.125 \text{ TiO} + 0.125 \text{ TiO}_2 + 0.125 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
 695
                      346
                                           1.000
                                                                      -1.587
                                                                                              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}
696
                      347
                                           0.500
                                                                      -1.556
                                                                                              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
 697
                       347
                                           0.500
                                                                      -1.608
                                                                                              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
698
                      348
                                           1.000
                                                                       -2.666
                                                                                               1.6 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.6 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO}_2 + 0.2 \,\mathrm{TiMnO}_3 + 0.2 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2 \,\mathrm{O}_4
699
                      349
                                           0.500
                                                                      -1.449
                                                                                              0.08333\,Mn_2O_3 + 0.08333\,Mn_3O_4 + 1.417\,MnO + 0.08333\,MnO_2 + 0.4167\,Ti_2O_3 + 0.08333\,TiO_2 + 0.08333\,TiMnO_3 + 0.08333\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.08333\,Mn_2O_3 + 0.08333\,Mn_2O
 700
                      349
                                           0.500
                                                                      -1.424
                                                                                              0.1 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.4 \text{ MnO} + 0.4 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1 \text{ TiO}_2 + 0.1 \text{ TiMnO}_3 + 0.1 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
701
                      350
                                           1.000
                                                                      -1.771
                                                                                              0.1429 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5714 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1429 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.5714 \,\mathrm{TiO} + 0.1429 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
702
                                           1.000
                      351
                                                                      -2.653
                                                                                              0.1667 \, Mn_2O_3 + 1.5 \, MnO + 0.1667 \, MnO_2 + 0.1667 \, Ti_3O_5 + 0.5 \, TiO + 0.1667 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
703
                      352
                                           0.500
                                                                      -1.267
                                                                                              1.818 \text{ MnO} + 0.09091 \text{ MnO}_2 + 0.2727 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09091 \text{ TiO}_2 + 0.09091 \text{ TiMnO}_3 + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                      352
                                           0.500
704
                                                                      -1.357
                                                                                              1.8 \,\mathrm{MnO} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
705
                      353
                                           0.500
                                                                      -2.023
                                                                                              CoO + 0.3333 Ti_2O_3 + 0.1111 TiO + 0.2222 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
 706
                      353
                                           0.500
                                                                      -1.715
                                                                                              CoO + 0.381 Ti_2O_3 + 0.2381 TiO_2 + 0.1905 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
707
                       354
                                           0.500
                                                                      -3.745
                                                                                              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}
708
                      354
                                           0.500
                                                                      -3.630
                                                                                              0.381 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2381 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.1905 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
709
                      355
                                           1.000
                                                                      -1.931
                                                                                              0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.5 \text{ MnO} + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiO}_2 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                                                                              1.667 \text{ MnO} + 0.1667 \text{ MnO}_2 + 0.1667 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1667 \text{ TiO} + 0.1667 \text{ Ti}_2 + 0.1667 \text{ Ti}_3\text{NnO}_3 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Nn}_2\text{O}_4
710
                      356
                                           1.000
                                                                      -1.461
711
                      357
                                           1.000
                                                                      -3.760
                                                                                              0.4 \text{ V}_2\text{O}_5 + 2.2 \text{ VO} + 0.4 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
712
                                           1.000
                                                                      -1.979
                                                                                              0.1667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1667 \,\mathrm{TiO} + 0.1667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                      358
713
                      359
                                           0.500
                                                                      -1.519
                                                                                              0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + \text{MnO} + 0.1667 \, \text{MnO}_2 + 0.1667 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.3333 \, \text{TiO} + 0.1667 \, \text{Ti}_2 \, \longrightarrow \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
                      359
                                                                                              0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2857 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiO}_2 + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
714
                                           0.500
                                                                      -1.310
715
                      360
                                           1.000
                                                                        0.057
                                                                                              Ti_2O_3 + TiO_2 \longrightarrow Ti_3O_5
716
                       361
                                           1.000
                                                                       -2.783
                                                                                              1.667 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.5 \text{ Li}_2\text{O} + 0.4167 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
                       362
                                                                                              0.4118 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1765 \text{ MnO} + 0.05882 \text{ MnO}_2 + 0.4706 \text{ TiO} + 0.5294 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
717
                                           0.500
                                                                      -1.202
```

```
Weight
                                                                                                             \Delta_r H
                            Label
                                                                                                                                                     Reaction
                                                                                                        eV/atom
718
                                   362
                                                                    0.500
                                                                                                             -1.046
                                                                                                                                                  0.4286 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + 0.4286 \,\mathrm{TiO} + 0.5714 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                    363
                                                                    0.250
                                                                                                                                                  0.07692 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.07692 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.538 \,\mathrm{MnO} + 0.3077 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07692 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.07692 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
719
                                                                                                             -1.198
720
                                                                    0.250
                                                                                                                                                  0.09091 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.545 \text{ MnO} + 0.09091 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2727 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                   363
                                                                                                             -1.372
 721
                                    363
                                                                    0.250
                                                                                                             -1.248
                                                                                                                                                  0.06667\,Mn_2O_3 + 0.06667\,Mn_3O_4 + 1.533\,MnO + 0.06667\,MnO_2 + 0.06667\,Ti_2O_3 + 0.2667\,Ti_3O_5 + 0.06667\,TiMnO_3 + 0.06667\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.06667\,MnO_3 + 0.06667\,MnO_3
722
                                    363
                                                                    0.250
                                                                                                             -1.262
                                                                                                                                                  0.08333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.08333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08333 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
723
                                    364
                                                                    1.000
                                                                                                             -1.366
                                                                                                                                                  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}
 724
                                    365
                                                                    0.143
                                                                                                             -1.025
                                                                                                                                                  0.1456 \, Mn_2O_3 + 0.2136 \, Mn_3O_4 + 0.06796 \, MnO + 0.3981 \, Ti_2O_3 + 0.2039 \, TiO_2 + 0.01942 \, O_2 \longrightarrow TiMnO_3
725
                                    365
                                                                    0.143
                                                                                                              -0.998
                                                                                                                                                  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}
726
                                   365
                                                                    0.143
                                                                                                              -0.928
                                                                                                                                                  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}
 727
                                                                    0.143
                                    365
                                                                                                              -0.996
                                                                                                                                                  0.1333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06667 \,\mathrm{MnO} + 0.06667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                    0.143
                                                                                                                                                  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}
728
                                    365
                                                                                                              -0.972
 729
                                                                    0.143
                                    365
                                                                                                             -0.917
                                                                                                                                                  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}
 730
                                    365
                                                                    0.143
                                                                                                             -0.989
                                                                                                                                                  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}
731
                                    366
                                                                    1.000
                                                                                                             -1.171
                                                                                                                                                  1.667 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.3333 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.3333 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4
 732
                                    367
                                                                    1.000
                                                                                                              -0.861
                                                                                                                                                  0.2857 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 1.286 \, \text{MnO} + 0.1429 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1429 \, \text{Ti} \, \text{O}_2 + 0.1429 \, \text{Ti} \, \text{MnO}_3 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4
 733
                                    368
                                                                    1.000
                                                                                                             -1.818
                                                                                                                                                  0.25 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.25 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{TiO_2} + 0.125 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
734
                                    369
                                                                    0.333
                                                                                                             -1.017
                                                                                                                                                  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}
 735
                                                                    0.333
                                    369
                                                                                                              -0.775
                                                                                                                                                  0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
736
                                   369
                                                                    0.333
                                                                                                             -1.086
                                                                                                                                                  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}
737
                                    370
                                                                    1.000
                                                                                                             -3.816
                                                                                                                                                  0.5 \text{ V}_3 \text{ O}_5 + 0.5 \text{ VO} + \text{ O}_2 \longrightarrow \text{ V}_2 \text{ O}_5
738
                                  371
                                                                    0.500
                                                                                                              -2.285
                                                                                                                                                  0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.125 \text{ MnO} + 0.125 \text{ MnO}_2 + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.5 \text{ TiO} + 0.125 \text{ TiO}_2 + 0.125 \text{ TiMnO}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
739
                                   371
                                                                    0.500
                                                                                                             -2.603
                                                                                                                                                  0.1429\,Mn_2O_3 + 0.1429\,Mn_3O_4 + 1.143\,MnO + 0.1429\,MnO_2 + 0.1429\,Ti_2O_3 + 0.5714\,TiO + 0.1429\,TiO_2 + 0.1429\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.1429\,MnO_2 + 0.1429\,MnO_2 + 0.1429\,MnO_2 + 0.1429\,MnO_3 + 0.1429\,MnO_2 + 0.1429\,MnO_3 + 0.1429\,M
740
                                   372
                                                                    1.000
                                                                                                             -2.950
                                                                                                                                                  VO + 0.5 O_2 \longrightarrow VO_2
741
                                    373
                                                                    1.000
                                                                                                             -1.289
                                                                                                                                                  0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.2 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                                                                                                                  0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.1667 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.5 \text{ Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{Co}_3
742
                                   374
                                                                    0.500
                                                                                                             -1.020
 743
                                    374
                                                                    0.500
                                                                                                             -0.913
                                                                                                                                                  0.2857 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.1429 \text{ CoO} + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ TiO} + 0.5714 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
 744
                                   375
                                                                    1.000
                                                                                                             -2.865
                                                                                                                                                  0.5 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
745
                                   376
                                                                    1.000
                                                                                                             -7.392
                                                                                                                                                  4.667 \text{ FeO} + 0.3333 \text{ Li}_{2}\text{O} + 0.3333 \text{ Li}_{7}\text{EO}_{2} + 1.167 \text{ O}_{2} \longrightarrow \text{Li}_{7}\text{Fe}_{5}\text{O}_{8}
                                   377
 746
                                                                    0.500
                                                                                                             -3.944
                                                                                                                                                  0.3171 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04878 \,\mathrm{MnO} + \mathrm{TiO} + 0.3415 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                   377
                                                                    0.500
                                                                                                             -3.905
747
                                                                                                                                                  0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{TiO} + 0.3333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
748
                                   378
                                                                    1.000
                                                                                                             -2.450
                                                                                                                                                  NiO + 0.4286 Ti_2O_3 + 0.1429 TiO + 0.2857 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
 749
                                   379
                                                                    1.000
                                                                                                             -1.389
                                                                                                                                                  1.4 \,\mathrm{MnO} + 0.4 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_2 \,\mathrm{O}_3 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_
 750
                                   380
                                                                    1.000
                                                                                                             -1.420
                                                                                                                                                  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}
751
                                   381
                                                                    0.167
                                                                                                             -2.031
                                                                                                                                                  0.65 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.05 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.65 \text{ TiO} + 0.05 \text{ TiO}_2 + 0.05 \text{ TiMnO}_3 + 0.05 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
 752
                                   381
                                                                    0.167
                                                                                                             -2.207
                                                                                                                                                  0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.06667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6667 \,\mathrm{TiO} + 0.06667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                                                                                                                  0.65 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05 \text{ Mn}_{2} + 0.05 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.05 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.7 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.05 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.05 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
 753
                                    381
                                                                    0.167
                                                                                                             -2.197
754
                                   381
                                                                    0.167
                                                                                                             -2.122
                                                                                                                                                  0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05556 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.05556 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6667 \,\mathrm{TiO} + 0.05556 \,\mathrm{TiO_2} + 0.05556 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                                                                             -2.125
 755
                                   381
                                                                    0.167
                                                                                                                                                  0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1111 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6667 \,\mathrm{TiO} + 0.05556 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
756
                                   381
                                                                    0.167
                                                                                                             -2.090
                                                                                                                                                  0.6471 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05882 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.05882 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.6471 \text{ TiO} + 0.05882 \text{ TiMnO}_3 + 0.05882 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
757
                                   382
                                                                    1.000
                                                                                                                                                  0.1667 \, Mn_2O_3 + 0.1667 \, Mn_3O_4 + MnO + 0.1667 \, MnO_2 + 0.8333 \, TiO + 0.1667 \, TiO_2 + 0.1667 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
                                                                                                              -3.074
 758
                                   383
                                                                    0.333
                                                                                                             -0.743
                                                                                                                                                  0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ Mn} \text{O} + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti} \text{O} + 0.5 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.125 \text{ Ti} \text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti} \text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti} \text{Mn}_2
 759
                                    383
                                                                    0.333
                                                                                                              -0.805
                                                                                                                                                  0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.4286 \text{ Ti}_3\text{O}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                    383
                                                                    0.333
760
                                                                                                              -0.949
                                                                                                                                                  0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
```

```
Weight
                                                                                    \Delta_r H
                     Label
                                                                                                                 Reaction
                                                                               eV/atom
761
                           384
                                                    1.000
                                                                                    -0.747
                                                                                                                2.5 \operatorname{Fe_2O_3} + 0.5 \operatorname{Li_2O} \longrightarrow \operatorname{LiFe_5O_8}
                           385
                                                                                                                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}
762
                                                    0.500
                                                                                    -1.671
763
                           385
                                                    0.500
                                                                                                                0.4286 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + 0.4286 \,\mathrm{TiO} + 0.5714 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                                    -1.356
 764
                           386
                                                    0.143
                                                                                    -0.750
                                                                                                                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}
765
                           386
                                                    0.143
                                                                                                                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}
                                                                                    -0.748
766
                           386
                                                    0.143
                                                                                    -0.726
                                                                                                                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
 767
                           386
                                                    0.143
                                                                                    -0.799
                                                                                                                0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{MnO} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
768
                           386
                                                    0.143
                                                                                    -0.761
                                                                                                                0.08701 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1288 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04181 \text{ Mn}\text{O} + 0.0452 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.2746 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1763 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.00678 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.00678 \text{ O}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3 \longrightarrow \text{Ti}
769
                           386
                                                    0.143
                                                                                    -0.737
                                                                                                                0.1429 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2857 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1429 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                                                                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}_3 \text{ Mn}_2 \text{ O}_4 + 0.02105 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3 \text{ MnO}_3
 770
                           386
                                                    0.143
                                                                                    -0.786
771
                                                    1.000
                                                                                    -0.835
                           387
                                                                                                                0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
772
                           388
                                                    1.000
                                                                                                                1.667 \text{ MnO} + 0.1667 \text{ MnO}_2 + 0.1667 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1667 \text{ TiMnO}_3 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                                                                    -1.362
 773
                           389
                                                    1.000
                                                                                    -2.267
                                                                                                                0.1429 \,\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3 + 0.5714 \,\mathrm{MnO} + 0.1429 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.1429 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.4286 \,\mathrm{TiO} + 0.1429 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_2 + 0.1429 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}\mathrm{MnO}_3
774
                           390
                                                    1.000
                                                                                    -1.803
                                                                                                                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}_2\text{O}_8
775
                           391
                                                    1.000
                                                                                    -0.883
                                                                                                                0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + \mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
776
                           392
                                                    1.000
                                                                                    -1.341
                                                                                                                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
777
                           393
                                                    1.000
                                                                                    -1.821
                                                                                                                0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 1.5 \, \text{MnO} + 0.1667 \, \text{MnO}_2 + 0.1667 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1667 \, \text{TiO} + 0.08333 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
778
                           394
                                                    1.000
                                                                                                                0.8571 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}_0 + 0.1429 \text{ Ti}_{0} + 0.1429 \text{ Ti}_{0} + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                                                    -1.833
779
                           395
                                                    0.167
                                                                                    -1.098
                                                                                                                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}
780
                           395
                                                    0.167
                                                                                    -1.198
                                                                                                                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}
781
                           395
                                                    0.167
                                                                                    -1.041
                                                                                                                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}
782
                           395
                                                    0.167
                                                                                    -1.106
                                                                                                                0.4091 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1818 \text{ MnO} + 0.1364 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2273 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04545 \text{ TiO} \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 783
                           395
                                                    0.167
                                                                                    -1.100
                                                                                                                0.4 \,\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3 + 0.2 \,\mathrm{MnO} + 0.1333 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.06667 \,\mathrm{TiO} + 0.06667 \,\mathrm{TiO}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
784
                           395
                                                    0.167
                                                                                    -1.023
                                                                                                                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}
 785
                           396
                                                    0.500
                                                                                    -1.595
                                                                                                                1.833 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.1667 \,\mathrm{TiMnO}_3 + 0.1667 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
 786
                           396
                                                    0.500
                                                                                    -1.420
                                                                                                                1.857 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}_0\text{O}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_0\text{MnO}_3 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_0\text{Mn}_2\text{O}_4
 787
                           397
                                                    1.000
                                                                                    -2.280
                                                                                                                1.333 \,\mathrm{MnO} + 0.6667 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.5 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
 788
                           398
                                                    0.500
                                                                                                                0.1176 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1176 \,\mathrm{MnO} + 0.2941 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1176 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1765 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1176 \,\mathrm{TiO} + 0.1176 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                                    -1.218
 789
                           398
                                                    0.500
                                                                                    -1.237
                                                                                                                0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2857 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}_0 + 0.1429 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 790
                           399
                                                    1.000
                                                                                                                0.25 \,\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3 + 0.25 \,\mathrm{Mn}_2\mathrm{O} + 0.25 \,\mathrm{Mn}_2\mathrm{O} + 0.75 \,\mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{TiO}_2 + 0.125 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_3\mathrm{O}_3
                                                                                    -2.769
791
                           400
                                                    1.000
                                                                                    -3.155
                                                                                                                0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.2 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.8 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.2 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 792
                           401
                                                    1.000
                                                                                    -0.854
                                                                                                                0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 793
                           402
                                                    0.500
                                                                                    -1.469
                                                                                                                0.1429\,Mn_2O_3 + 0.1429\,Mn_3O_4 + 1.286\,MnO + 0.1429\,Ti_2O_3 + 0.1429\,Ti_3O_5 + 0.1429\,TiO + 0.1429\,TiO_2 + 0.07143\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.07143\,O_2 
794
                           402
                                                    0.500
                                                                                    -1.293
                                                                                                                0.125 \text{ Mn}_2 \text{O}_3 + 0.125 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 1.25 \text{ Mn} \text{O} + 0.125 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.125 \text{ Ti} \text{O} + 0.125 \text{ Ti} \text{O}_2 + 0.125 \text{ Ti} \text{Mn} \text{O}_3 + 0.0625 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \text{Mn}_2 \text{O}_4
795
                           403
                                                    0.333
                                                                                    -1.687
                                                                                                                0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.667 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.4444 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                                    0.333
 796
                           403
                                                                                    -1.720
                                                                                                                0.1429 \,\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3 + 1.714 \,\mathrm{MnO} + 0.4286 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1429 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_2 + 0.1429 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}_3\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4
797
                           403
                                                    0.333
                                                                                    -1.852
                                                                                                                0.125 \text{ Mn}_2\text{ O}_3 + 1.625 \text{ MnO} + 0.125 \text{ MnO}_2 + 0.5 \text{ Ti}_2\text{ O}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{ O}_4
 798
                                                    1.000
                                                                                    -0.995
                           404
                                                                                                                0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.333 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
799
                           405
                                                    1.000
                                                                                    -2.453
                                                                                                                0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.08333 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
                                                    1.000
                                                                                    -1.080
 800
                           406
                                                                                                                0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + \mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{TiO} + 0.3333 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3333 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
 801
                           407
                                                    0.167
                                                                                    -0.944
                                                                                                                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}
 802
                           407
                                                    0.167
                                                                                    -0.824
                                                                                                                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}
                           407
803
                                                    0.167
                                                                                    -1.008
                                                                                                                0.3077 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07692 \text{ MnO}_2 + 0.2692 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1154 \text{ TiO} + 0.07692 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
```

```
Weight
                                                        \Delta_r H
              Label
                                                                            Reaction
                                                     eV/atom
804
                 407
                                  0.167
                                                        -1.139
                                                                           0.3022 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09333 \,\mathrm{MnO} + 0.3044 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08667 \,\mathrm{TiO} + 0.04444 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                 407
                                                        -0.794
805
                                  0.167
                                                                           0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                 407
                                  0.167
                                                        -1.077
                                                                           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}
806
807
                  408
                                  0.500
                                                        -1.203
                                                                           0.4918 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.3115 \text{ MnO} + 0.1475 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3443 \text{ TiO} + 0.2131 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                 408
                                  0.500
                                                                           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
808
                                                        -1.350
809
                 409
                                  1.000
                                                        -1.675
                                                                           0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.6 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.4 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
810
                 410
                                  1.000
                                                        -1.741
                                                                           1.8 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO}_2 + 0.1 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
811
                 411
                                  0.333
                                                        -1.086
                                                                            CoO + 0.3333 Cr_2O_3 + 0.3333 Cr_3O_4 + 0.3333 CrO_2 \longrightarrow Cr_2CoO_4
812
                 411
                                  0.333
                                                        -1.296
                                                                           CoO + 0.2903 Cr_2O_3 + 0.4194 Cr_3O_4 + 0.1613 CrO_2 + 0.06452 O_2 \longrightarrow Cr_2CoO_4
                                  0.333
                                                                           CoO + 0.5 Cr_3O_4 + 0.5 CrO_2 \longrightarrow Cr_2CoO_4
813
                 411
                                                        -1.346
                                                                           0.1667 \, Mn_3O_4 + 0.1667 \, MnO + 0.8333 \, TiO + 0.1667 \, TiMn_2O_4 + 0.3333 \, O_2 \longrightarrow TiMnO_3
                 412
                                  1.000
814
                                                        -3.511
815
                 413
                                  0.333
                                                                           0.1 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.7 \text{ CoO} + 0.1 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.6 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.1 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CoO}_4
                                                        -1.493
                 413
                                  0.333
                                                        -1.551
                                                                           0.09091 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.7273 \text{ CoO} + 0.6364 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.09091 \text{ Cr}_{O}_2 + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CoO}_4
816
817
                 413
                                  0.333
                                                        -1.469
                                                                           0.08333 \, \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.75 \, \text{CoO} + 0.08333 \, \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.5833 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.08333 \, \text{Cr}_{O_2} + 0.08333 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CoO}_4
818
                 414
                                  0.125
                                                                           0.1473 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2132 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.06593 \text{ MnO} + 0.1407 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2187 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06264 \text{ TiO} + 0.03077 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                        -1.163
819
                 414
                                  0.125
                                                        -0.930
                                                                           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}
820
                 414
                                  0.125
                                                        -0.986
                                                                           0.1447 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.2138 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.06914 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.1524 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.2318 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.0128 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn} \, \text{O}_3
                 414
                                  0.125
                                                                           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}
821
                                                         -0.950
822
                 414
                                  0.125
                                                        -0.961
                                                                           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}
                                                        -0.939
823
                 414
                                  0.125
                                                                           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
824
                 414
                                  0.125
                                                         -0.927
                                                                           0.1698 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.2075 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.03774 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.1321 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.2453 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
825
                 414
                                  0.125
                                                        -0.885
                                                                           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}_3\text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
826
                 415
                                  0.500
                                                         -2.208
                                                                           0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2222 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.1111 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.4444 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_3
827
                 415
                                  0.500
                                                         -2.032
                                                                           0.09524\,Mn_{2}O_{3} + 0.2381\,Mn_{3}O_{4} + 0.09524\,MnO_{2} + 0.09524\,Ti_{2}O_{3} + 0.09524\,Ti_{3}O_{5} + 0.4286\,TiO + 0.09524\,TiO_{2} + 0.09524\,O_{2} \longrightarrow TiMnO_{3}O_{4} + 0.09524\,TiO_{2} + 0.09524\,TiO_{3} + 0.00524\,TiO_{3} + 0.00524\,TiO_{3} + 0.00524\,TiO_{3} + 0.0
828
                 416
                                  1.000
                                                          0.023
                                                                           V_2O_3 + VO_2 \longrightarrow V_3O_5
829
                 417
                                  0.500
                                                        -1.499
                                                                           0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
830
                 417
                                  0.500
                                                        -1.535
                                                                           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}
                                  0.500
                                                                           0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.45 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3167 \,\mathrm{TiO} + 0.01667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
831
                 418
                                                        -1.556
832
                 418
                                  0.500
                                                        -1.562
                                                                           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}
                 419
                                                        -0.934
                                                                           0.1786 \text{ Mn}_2 \text{O}_3 + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.25 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.07143 \text{ TiO} + 0.1786 \text{ TiO}_2 + 0.25 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
833
                                  0.167
834
                 419
                                  0.167
                                                        -1.131
                                                                           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
835
                 419
                                  0.167
                                                        -1.199
                                                                           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}
836
                 419
                                  0.167
                                                        -1.189
                                                                           0.1563\,Mn_2O_3 + 0.0649\,MnO + 0.09145\,MnO_2 + 0.2448\,Ti_2O_3 + 0.1091\,TiO + 0.1357\,TiO_2 + 0.2655\,TiMn_2O_4 + 0.0531\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
837
                 419
                                  0.167
                                                        -0.934
                                                                           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}
838
                 419
                                  0.167
                                                        -1.135
                                                                           0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{TiO} + 0.1333 \,\mathrm{TiO_2} + 0.3 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.06667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
839
                                  1.000
                                                        -2.342
                 420
                                                                           1.22 \text{ Fe}_3 \text{O}_4 + 0.3415 \text{ FeO} + \text{LiFe}_{02} + 0.3902 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5 \text{O}_8
840
                 421
                                  1.000
                                                        -0.143
                                                                           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
                  422
                                                                           0.2913 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1261 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4087 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1826 \,\mathrm{TiO} + 0.08696 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
841
                                  0.500
                                                        -1.790
842
                 422
                                  0.500
                                                        -1.844
                                                                           0.2682 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 0.0728 \text{ MnO} + 0.1226 \text{ MnO}_2 + 0.41 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1801 \text{ TiO} + 0.09962 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                 423
                                  1.000
843
                                                        -1.568
                                                                           0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.4 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
844
                 424
                                  1.000
                                                        -3.184
                                                                           0.8095 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.381 \,\mathrm{MnO} + \mathrm{TiO} + 0.09524 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
845
                  425
                                  1.000
                                                        -1.094
                                                                           0.2 \text{ Fe}_3 \text{O}_4 + 0.2 \text{ FeO} + 2.4 \text{Li}_2 \text{O} + 0.2 \text{Li}_2 \text{FeO}_2 + 0.1 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2 \text{FeO}_4
                  426
846
                                  1.000
                                                        -1.241
                                                                           0.1 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.7 \text{ CoO} + 0.3 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.1 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{CoO}_3
```

	Label	Weight	$\Delta_r H$ eV/atom	Reaction
0.47	427	0.250		0.2020 C. O. (0.00140 C. O. (0.1200 T) O. (0.2024 T) O. (0.05521 T
847	427	0.250	-1.339	$0.3028 Co_3O_4 + 0.09148 CoO + 0.1388 Ti_2O_3 + 0.2224 Ti_3O_5 + 0.05521 TiO + 0.05678 O_2 \longrightarrow TiCoO_3$
848	427	0.250	-1.296	$0.3333 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.1398 \text{Ti}_2\text{O}_3 + 0.2204 \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.05914 \text{TiO} + 0.04301 \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3$
849	427	0.250	-1.126	$0.3333 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.1509 \text{Ti}_2\text{O}_3 + 0.2327 \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.02516 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{CoO}_3$
850	427	0.250	-1.182	$0.302 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.09392 \text{CoO} + 0.1492 \text{Ti}_2\text{O}_3 + 0.2339 \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.04052 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{CoO}_3$
851 852	428 429	1.000 1.000	-0.350 -3.318	$0.6667 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_2O_3}$ $1.75 \mathrm{MnO} + 0.25 \mathrm{MnO_2} + 0.75 \mathrm{TiO} + 0.25 \mathrm{TiO_2} + 0.25 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
853	430	0.500	-3.318 -0.941	$0.1429 \mathrm{MnO}_{2} + 0.73 \mathrm{HO}_{2} + 0.73 \mathrm{HO}_{2} + 0.23 \mathrm{G}_{2} \longrightarrow \mathrm{HMn}_{2}\mathrm{O}_{4}$ $0.1429 \mathrm{Mn}_{2}\mathrm{O}_{3} + 1.429 \mathrm{MnO}_{4} + 0.1429 \mathrm{MnO}_{2} + 0.1429 \mathrm{Ti}_{2}\mathrm{O}_{3} + 0.1429 \mathrm{Ti}_{2}\mathrm{O}_{2} + 0.1429 \mathrm{Ti}\mathrm{MnO}_{3} \longrightarrow \mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_{2}\mathrm{O}_{4}$
854	430	0.500	-1.088	$0.1667 \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 1.5 \text{MnO} + 0.1667 \text{MnO}_2 + 0.1667 \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1667 \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1667 \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1667 \text{Ti}_2 \text{O}_4$
855	431	1.000	-3.026	$0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.75 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3$
856	432	0.500	-1.561	$0.1154 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.5385 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1923 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.4615 \mathrm{TiO} + 0.1538 \mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
857	432	0.500	-1.383	$0.6 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.2 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.4 \mathrm{TiO} + 0.2 \mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
858	433	1.000	-2.637	$1.667 \mathrm{MnO} + 0.3333 \mathrm{MnO}_2 + 0.3333 \mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.3333 \mathrm{TiO} + 0.1667 \mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4$
859	434	1.000	-0.580	$0.1667 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \mathrm{MnO} + 0.1667 \mathrm{TiO} + 0.6667 \mathrm{TiO_2} + 0.1667 \mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
860	435	1.000	-0.053	$Al_2O_3 + NiO \longrightarrow Al_2NiO_4$
861	436	1.000	-1.101	$0.4286 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.1429 \text{ CuO} + 0.1429 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.7143 \text{ FeO} + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2$
862	437	0.500	-0.489	$0.3259 \text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.1534 \text{FeO} + 0.01278 \text{Li}_2\text{O} + 0.1949 \text{Li}_5\text{FeO}_4 + 0.03834 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}\text{FeO}_2$
863	437	0.500	-0.484	$0.3238 \text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.1524 \text{Fe}\text{O} + 0.2 \text{Li}_5 \text{Fe}\text{O}_4 + 0.0381 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{Fe}\text{O}_2$
864	438	1.000	-2.192	$0.2 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.4 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.2 \mathrm{MnO_2} + 0.8 \mathrm{TiO} + 0.2 \mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
865	439	1.000	-3.299	$0.6098 Mn_3O_4 + 0.1707 MnO + TiO + 0.1951 O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
866	440	1.000	-1.854	$0.25\mathrm{Mn_2O_3} + 1.25\mathrm{MnO} + 0.25\mathrm{Ti_2O_3} + 0.25\mathrm{TiO} + 0.25\mathrm{TiMnO_3} + 0.125\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
867	441	1.000	-1.046	$0.1818 \mathrm{V_2O_5} + 1.182 \mathrm{VO} + 0.4545 \mathrm{VO_2} \longrightarrow \mathrm{V_2O_3}$
868	442	1.000	-1.553	$0.3333Mn_{2}O_{3} + 0.3333MnO + 0.1111Ti_{3}O_{5} + 0.3333TiO + 0.3333TiO_{2} + 0.05556O_{2} \longrightarrow TiMnO_{3}$
869	443	1.000	-1.982	$0.3333 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.3333 \mathrm{MnO} + 0.2222 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.3333 \mathrm{TiO} + 0.1111 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
870	444	1.000	-2.978	$0.25 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.25 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \mathrm{MnO} + 0.5 \mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
871	445	0.333	-1.404	$0.09091Mn_2O_3 + 0.7273MnO + 0.09091MnO_2 + 0.09091Ti_2O_3 + 0.2727Ti_3O_5 + 0.09091O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
872	445	0.333	-1.312	$0.08333Mn_2O_3 + 0.75MnO + 0.08333MnO_2 + 0.08333Ti_2O_3 + 0.25Ti_3O_5 + 0.08333TiO_2 + 0.08333O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
873	445	0.333	-1.317	$0.08333 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.75 \mathrm{MnO} + 0.08333 \mathrm{MnO_2} + 0.3333 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.08333 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
874	446	0.200	-0.951	$0.1719\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08133\mathrm{MnO} + 0.09057\mathrm{MnO_2} + 0.2292\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07024\mathrm{TiO} + 0.2421\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.01848\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
875	446	0.200	-0.681	$0.1613\mathrm{Mn_2O_3} + 0.09677\mathrm{MnO} + 0.06452\mathrm{MnO_2} + 0.2258\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06452\mathrm{TiO_2} + 0.2581\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
876	446	0.200	-0.740	$0.1667 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.08333 \mathrm{MnO} + 0.08333 \mathrm{MnO_2} + 0.25 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.25 \mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
877	446	0.200	-0.868	$0.1795 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.06838 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.2393 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05128 \text{ TiO} + 0.2308 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
878	446	0.200	-0.682	$0.1765 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05882 \text{ MnO}_2 + 0.2353 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2941 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
879	447	1.000	-3.241	$1.5 \mathrm{MnO} + 0.25 \mathrm{MnO}_2 + 0.75 \mathrm{TiO} + 0.25 \mathrm{TiMnO}_3 + 0.25 \mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4$
880	448	1.000	-0.186	$0.3333 \mathrm{MnO} + 0.6667 \mathrm{TiO}_2 + 0.3333 \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3$
881	449	1.000	-1.266	$1.333 \mathrm{MnO} + 0.3333 \mathrm{MnO}_2 + 0.3333 \mathrm{TiO} + 0.3333 \mathrm{TiMnO}_3 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4$
882	450	0.500	-0.921	$0.3 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.1 \text{Co}_0 + 0.1 \text{Ti}_2\text{O}_3 + 0.1 \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.1 \text{Ti}_0 + 0.4 \text{Ti}_0 - 0.3232 $
883	450 451	0.500	-0.994 1.005	$0.3333 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.1111 \text{Ti}_0 + 0.3333 \text{Ti}_0 \longrightarrow \text{Ti}_0\text{Co}_3$
884 885	451 452	1.000 0.500	-1.005 -1.818	$0.3333 \mathrm{Mn_2O_3} + 1.333 \mathrm{MnO} + 0.3333 \mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$ $2 \mathrm{MnO} + 0.381 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.2381 \mathrm{TiO_2} + 0.1905 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
886	452	0.500	-2.126	$2 \text{ MnO} + 0.3331 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2381 \text{ TiO}_2 + 0.1903 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4$ $2 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ TiO} + 0.2222 \text{ TiO}_2 + 0.2222 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4$
887	453	1.000	-2.120 -9.234	$3 \text{ Co} + 2 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Co}_3 \text{O}_4$
888	454	0.250	-9.234	$0.1 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.1 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.45 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1 \text{ LiFe}_5\text{O}_8 + 0.025 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFeO}_2$
889	454	0.250	-0.438	$0.11e_2O_3 + 0.11e_3O_4 + 0.45 \text{ Li}_2O + 0.11 \text{ Lite}_3O_8 + 0.025 O_2 \longrightarrow \text{Lite}_5O_8 + 0.04545 O_2 \longrightarrow \text{LiFe}O_2$ $0.09091 \text{ Fe}_2O_3 + 0.09091 \text{ Fe}_3O_4 + 0.09091 \text{ Fe}O + 0.4545 \text{ Li}_2O + 0.09091 \text{ LiFe}_5O_8 + 0.04545 O_2 \longrightarrow \text{LiFe}O_2$
- 009	7,74	0.230	-0.500	0.070711c203 + 0.070711c304 + 0.070711c0 + 0.4343 Lizo + 0.07071 Life308 + 0.04343 Oz LifeOz

```
Weight
                                                                         \Delta_r H
                  Label
                                                                                                   Reaction
                                                                     eV/atom
890
                      454
                                             0.250
                                                                         -0.450
                                                                                                  0.125 \text{ Fe}_3 \text{O}_4 + 0.4375 \text{ Li}_2 \text{O} + 0.125 \text{ Li}_2 \text{Fe}_5 \text{O}_8 + 0.03125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2 \text{Fe}_5 \text{O}_2
                       454
                                             0.250
                                                                                                  0.1429 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.4286 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.1429 \, \text{Li}_{65} \, \text{O}_8 \longrightarrow \text{Li}_{60} \, \text{Li}_{60} \, \text{C}_{70}
891
                                                                         -0.284
                                                                                                  0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + \mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 892
                                             1.000
                                                                         -3.729
                       455
 893
                       456
                                             0.111
                                                                         -0.839
                                                                                                  0.1591 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.02273 \text{ Ti}_3\text{O}_4 + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{MnO}_3
894
                                             0.111
                                                                                                  0.05932 \text{ Ti}_{2}\text{O}_{3} + 0.1102 \text{ Ti}_{3}\text{O}_{5} + 0.05085 \text{ Ti}_{2} + 0.5 \text{ Ti}_{3}\text{Mn}_{2}\text{O}_{4} + 0.08475 \text{ O}_{2} \longrightarrow \text{Ti}_{3}\text{Mn}_{2}\text{O}_{3}
                       456
                                                                         -0.776
 895
                       456
                                             0.111
                                                                         -0.850
                                                                                                  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
 896
                       456
                                             0.111
                                                                         -0.768
                                                                                                  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
897
                       456
                                             0.111
                                                                         -0.671
                                                                                                  0.05263 \text{ MnO}_2 + 0.1579 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.05263 \text{ TiO}_2 + 0.4737 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.05263 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
 898
                       456
                                             0.111
                                                                         -0.797
                                                                                                  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{TiMn}_2\text{O}_3
 899
                       456
                                             0.111
                                                                         -0.753
                                                                                                  0.14 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.02 \text{ TiO} + 0.06 \text{ TiO}_2 + 0.5 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.08 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                                                                  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{TiMnO}_3
                                             0.111
900
                       456
                                                                         -0.873
                                                                                                  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
901
                       456
                                             0.111
                                                                         -0.690
902
                       457
                                             1.000
                                                                         -3.064
                                                                                                  0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.8 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.2 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
903
                       458
                                             0.500
                                                                         -1.228
                                                                                                  0.09091 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.09091 \text{ MnO} + 0.2727 \text{ MnO}_2 + 0.4545 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
904
                       458
                                             0.500
                                                                         -1.317
                                                                                                  0.125 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.125 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.125 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
905
                       459
                                             0.500
                                                                         -1.475
                                                                                                  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}
906
                       459
                                             0.500
                                                                         -1.436
                                                                                                  0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
907
                       460
                                             0.500
                                                                         -1.694
                                                                                                  CoO + 0.3182 Ti_3O_5 + 0.04545 TiO + 0.1818 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
908
                       460
                                             0.500
                                                                         -1.553
                                                                                                  CoO + 0.3333 Ti_3O_5 + 0.1667 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
909
                       461
                                             1.000
                                                                         -0.053
                                                                                                  0.5 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \,\mathrm{MnO_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_2O_3}
910
                      462
                                             1.000
                                                                         -1.363
                                                                                                  0.125\,Mn_3O_4 + 1.375\,MnO + 0.125\,MnO_2 + 0.125\,Ti_2O_3 + 0.125\,Ti_3O_5 + 0.125\,TiO + 0.125\,TiO_2 + 0.125\,TiMnO_3 + 0.0625\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.0000\,TiMnO_3 +
911
                       463
                                             1.000
                                                                         -2.293
                                                                                                  1.462 \text{ Fe}_3 \text{O}_4 + 0.1929 \text{ Li}_2 \text{O} + 0.6142 \text{ Li}_{2} \text{Fe}_{2} + 0.3655 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_{2} \text{Fe}_{5} \text{O}_{8}
912
                       464
                                             0.333
                                                                         -2.292
                                                                                                  0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.125 \text{ Mn}_2\text{O} + 0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.125 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
913
                       464
                                             0.333
                                                                         -2.611
                                                                                                  0.1429 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1429 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 1.143 \, \text{MnO} + 0.1429 \, \text{MnO}_2 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.5714 \, \text{TiO} + 0.1429 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
                                                                                                  0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.143 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.4286 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
914
                       464
                                             0.333
                                                                         -2.138
915
                       465
                                             1.000
                                                                         -1.442
                                                                                                  0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + \mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
916
                       466
                                             1.000
                                                                         -1.794
                                                                                                  0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.6 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.6 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
917
                       467
                                             0.143
                                                                         -0.707
                                                                                                  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}_2 \, \text{O}_4 + 0.01187 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{Mn}_{O_3} \, \text{Ti}_{O_3} + 0.01187 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{O_3} \, \text{Ti}_{O_3} + 0.01187 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{O_3} \, \text{Ti}_{O_3} + 0.01187 \, \text{O}_3 + 0.01187 \, \text{O}_3
918
                       467
                                             0.143
                                                                         -0.670
                                                                                                  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}
                                             0.143
919
                       467
                                                                         -0.803
                                                                                                  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
920
                      467
                                             0.143
                                                                         -0.695
                                                                                                  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
921
                       467
                                             0.143
                                                                         -0.771
                                                                                                  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
922
                       467
                                             0.143
                                                                         -0.732
                                                                                                  0.2308 \,\mathrm{MnO_2} + 0.07692 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1538 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.3846 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
923
                       467
                                             0.143
                                                                         -0.868
                                                                                                  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
924
                       468
                                             0.333
                                                                         -0.989
                                                                                                  0.5909 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.2273 \, \text{CrO}_2 + \text{CuO} + 0.09091 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4
925
                                             0.333
                       468
                                                                         -1.196
                                                                                                  0.6667 \, \text{Cr}_3 \, \text{O}_4 + \text{CuO} + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2 \, \text{CuO}_4
926
                       468
                                             0.333
                                                                         -0.800
                                                                                                  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
927
                                             0.250
                                                                                                  0.6364 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.09091 \,\mathrm{MnO_2} + 0.09091 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6364 \,\mathrm{TiO} + 0.09091 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                       469
                                                                         -1.860
928
                       469
                                             0.250
                                                                         -1.760
                                                                                                  0.6154 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07692 \,\mathrm{MnO_2} + 0.07692 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6154 \,\mathrm{TiO} + 0.07692 \,\mathrm{TiO_2} + 0.07692 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
929
                                             0.250
                       469
                                                                         -1.921
                                                                                                  0.625 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.125 \,\mathrm{MnO_2} + 0.125 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.625 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
930
                       469
                                             0.250
                                                                         -1.783
                                                                                                  0.6429\,Mn_3O_4 + 0.07143\,MnO_2 + 0.07143\,Ti_2O_3 + 0.07143\,Ti_3O_5 + 0.5714\,TiO + 0.07143\,TiO_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
931
                       470
                                             1.000
                                                                         -0.868
                                                                                                  0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + \text{MnO} + 0.1667 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1667 \, \text{Ti} \, \text{MnO}_3 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4
                       471
932
                                             1.000
                                                                         -1.608
                                                                                                  1.717 \text{ Fe}_{2}\text{O}_{3} + 0.8078 \text{ Fe}\text{O} + 0.06026 \text{ Li}_{5}\text{Fe}\text{O}_{4} + 0.6987 \text{ Li}_{7}\text{Fe}\text{O}_{2} + 0.202 \text{ O}_{2} \longrightarrow \text{Li}_{7}\text{Fe}_{5}\text{O}_{8}
```

```
Weight
                                                                                            \Delta_r H
                       Label
                                                                                                                            Reaction
                                                                                       eV/atom
933
                             472
                                                         0.333
                                                                                            -2.553
                                                                                                                           1.583 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ Li}_2\text{O} + 0.125 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.125 \text{ Li}_7\text{Fe}\text{O}_2 + 0.3958 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_7\text{Fe}\text{O}_8
934
                            472
                                                         0.333
                                                                                            -2.574
                                                                                                                            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
935
                             472
                                                         0.333
                                                                                            -2.634
                                                                                                                           1.619 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1429 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1429 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.4048 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_8
936
                             473
                                                         1.000
                                                                                            -3.179
                                                                                                                           0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.5 \text{ MnO} + 0.75 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiO}_2 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
937
                             474
                                                         1.000
                                                                                            -2.698
                                                                                                                           1.667 \text{ VO} + 0.3333 \text{ VO}_2 + 0.3333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_3
938
                             475
                                                         0.333
                                                                                            -2.646
                                                                                                                           0.4444 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1111 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1111 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6667 \,\mathrm{TiO} + 0.1111 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
 939
                             475
                                                         0.333
                                                                                            -2.257
                                                                                                                           0.4615 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07692 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.07692 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.07692 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5385 \text{ TiO} + 0.07692 \text{ Ti}_2 + 0.07692 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
940
                             475
                                                         0.333
                                                                                            -2.389
                                                                                                                           0.4545 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ MnO}_2 + 0.09091 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5455 \text{ TiO} + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
941
                             476
                                                         0.500
                                                                                            -2.066
                                                                                                                           MnO + 0.3333 Ti_2O_3 + 0.1111 TiO + 0.2222 TiO_2 + 0.2222 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
942
                                                         0.500
                             476
                                                                                            -1.759
                                                                                                                           MnO + 0.381 Ti_2O_3 + 0.2381 TiO_2 + 0.1905 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
943
                             477
                                                         0.500
                                                                                            -7.123
                                                                                                                           0.125 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 4.375 \, \text{Fe} \, \text{O} + 0.125 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.125 \, \text{Li}_5 \, \text{Fe} \, \text{O}_4 + 0.125 \, \text{Li} \, \text{Fe} \, \text{O}_2 + 1.125 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li} \, \text{Fe}_5 \, \text{O}_8
 944
                            477
                                                         0.500
                                                                                                                           0.1429 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 4.429 \text{ Fe}\text{O} + 0.1429 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1429 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 1.143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_8
                                                                                            -7.260
945
                             478
                                                         1.000
                                                                                            -1.919
                                                                                                                           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}
946
                             479
                                                         0.500
                                                                                            -0.634
                                                                                                                           0.3171 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04878 \,\mathrm{MnO} + 0.3415 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{MnO_2}
947
                             479
                                                         0.500
                                                                                            -0.595
                                                                                                                           0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{MnO_2}
948
                             480
                                                         0.500
                                                                                            -1.499
                                                                                                                           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
949
                             480
                                                         0.500
                                                                                            -1.626
                                                                                                                           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
                                                         1.000
950
                            481
                                                                                            -0.986
                                                                                                                           0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.333 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
951
                              482
                                                         1.000
                                                                                            -2.070
                                                                                                                           1.75 \text{ MnO} + 0.25 \text{ MnO}_2 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiO}_2 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
952
                             483
                                                         0.500
                                                                                            -1.524
                                                                                                                           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}
953
                            483
                                                         0.500
                                                                                            -1.397
                                                                                                                           0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.25 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
954
                             484
                                                         1.000
                                                                                            -1.449
                                                                                                                           1.429 \text{ MnO} + 0.4286 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
955
                             485
                                                         1.000
                                                                                            -1.467
                                                                                                                           0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.8333 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.1667 \, \text{Mn}_2 + 0.1667 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.3333 \, \text{Ti} \, \text{O} + 0.1667 \, \text{Ti}_4 \, \text{Nn}_3 \, \longrightarrow \, \text{Ti}_4 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.8333 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.8333 \, \text{
 956
                             486
                                                         1.000
                                                                                            -2.130
                                                                                                                           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}_{3} \, \text{O}_{8}
957
                              487
                                                         1.000
                                                                                            -0.605
                                                                                                                           0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.4 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
958
                              488
                                                         0.143
                                                                                            -0.755
                                                                                                                           0.1731 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.03846 \text{ MnO} + 0.09615 \text{ MnO}_2 + 0.2308 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03846 \text{ TiO} + 0.09615 \text{ Ti}_2 + 0.1731 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3 + 0.03846 \text{ MnO}_4 + 0.03846 \text{ MnO}_4
 959
                             488
                                                         0.143
                                                                                            -0.688
                                                                                                                           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
960
                                                                                                                           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}
                            488
                                                         0.143
                                                                                            -0.855
 961
                             488
                                                         0.143
                                                                                            -0.891
                                                                                                                           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{ O}_4 + 0.02632 \text{ O}_4 + 0.02632 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ O}_4 + 0.02632 \text{ O}_4 + 0.02
                                                         0.143
                                                                                                                           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} \, \text{O}_2 + 0.1855 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{MnO}_3
 962
                              488
                                                                                            -0.666
963
                             488
                                                         0.143
                                                                                            -0.645
                                                                                                                           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}
 964
                             488
                                                         0.143
                                                                                            -0.755
                                                                                                                           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
 965
                             489
                                                         1.000
                                                                                            -0.532
                                                                                                                           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}
966
                            490
                                                         0.500
                                                                                            -1.991
                                                                                                                           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
                                                                                                                           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
967
                              490
                                                         0.500
                                                                                            -2.033
                                                         0.333
 968
                             491
                                                                                            -1.284
                                                                                                                           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
969
                            491
                                                         0.333
                                                                                            -1.486
                                                                                                                           0.5455 \,\mathrm{MnO} + 0.4545 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.1515 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1818 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.1212 \,\mathrm{TiO} + 0.0303 \,\mathrm{TiO}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
970
                             491
                                                         0.333
                                                                                            -1.500
                                                                                                                           0.5385 \text{ MnO} + 0.4615 \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
971
                              492
                                                         0.500
                                                                                            -0.914
                                                                                                                           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} \, \text{O}_4
                             492
                                                         0.500
972
                                                                                            -0.982
                                                                                                                           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
973
                             493
                                                         1.000
                                                                                            -1.149
                                                                                                                           0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
974
                              494
                                                         0.200
                                                                                            -0.872
                                                                                                                           0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.08333 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08333 \text{ MnO} + 0.08333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08333 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                              494
                                                         0.200
975
                                                                                            -0.977
                                                                                                                           0.2727 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.09091 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2727 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.09091 \,\mathrm{TiO} + 0.09091 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
```

	Label	Weight	$\Delta_r H$ eV/atom	Reaction
976	494	0.200	-1.003	$0.3125\mathrm{Mn_2O_3} + 0.0625\mathrm{Mn_3O_4} + 0.0625\mathrm{MnO} + 0.0625\mathrm{Ti_2O_3} + 0.25\mathrm{Ti_3O_5} + 0.0625\mathrm{TiO} + 0.0625\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
977	494	0.200	-1.016	$0.3077\mathrm{Mn_2O_3} + 0.07692\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07692\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2308\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07692\mathrm{TiO} + 0.07692\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
978	494	0.200	-0.970	$0.2857Mn_2O_3 + 0.07143Mn_3O_4 + 0.07143MnO + 0.2857Ti_3O_5 + 0.07143TiO + 0.07143TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3$
979	495	1.000	-1.159	$0.2 \mathrm{Mn_2O_3} + 1.2 \mathrm{MnO} + 0.2 \mathrm{MnO_2} + 0.4 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
980	496	1.000	-0.651	$0.2222Mn_3O_4 + 0.1111MnO + 0.1111Ti_3O_5 + 0.1111TiO + 0.4444TiO_2 + 0.1111TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3$
981	497	0.500	-1.680	$0.3043 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08696 \text{ MnO} + 0.4783 \text{ TiO} + 0.5217 \text{ TiO}_2 + 0.08696 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
982	497	0.500	-1.624	$0.3333 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.4815 \mathrm{TiO} + 0.5185 \mathrm{TiO_2} + 0.07407 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
983	498	0.500	-1.575	$0.09091Mn_2O_3 + 0.09091Mn_3O_4 + 1.455MnO + 0.09091MnO_2 + 0.4545Ti_2O_3 + 0.09091TiO_2 + 0.09091O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
984	498	0.500	-1.575	$0.1111Mn_2O_3 + 0.1111Mn_3O_4 + 1.444MnO + 0.4444Ti_2O_3 + 0.1111TiO_2 + 0.1111O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
985	499	0.333	-0.929	$0.1429\mathrm{Mn_3O_4} + 1.429\mathrm{MnO} + 0.1429\mathrm{MnO_2} + 0.2857\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1429\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
986	499	0.333	-0.820	$0.125Mn_{3}O_{4} + 1.375MnO + 0.125MnO_{2} + 0.25Ti_{3}O_{5} + 0.125TiO_{2} + 0.125TiMnO_{3} \longrightarrow TiMn_{2}O_{4}$
987	499	0.333	-0.952	$0.1 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.1 \mathrm{Mn_3O_4} + 1.4 \mathrm{MnO} + 0.1 \mathrm{MnO_2} + 0.3 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
988	500	1.000	-3.126	$0.2 \mathrm{Mn_3O_4} + 1.2 \mathrm{MnO} + 0.2 \mathrm{MnO_2} + 0.8 \mathrm{TiO} + 0.2 \mathrm{TiO_2} + 0.2 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
989	501	1.000	-0.576	$0.3333 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.3333 \text{ VO} \longrightarrow \text{VO}_2$
990	502	1.000	-2.728	$1.362 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 0.3814 \text{FeO} + 0.1169 \text{Li}_5 \text{FeO}_4 + 0.4156 \text{Li} \text{FeO}_2 + 0.4359 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li} \text{Fe}_5 \text{O}_8$
991	503	1.000	-1.569	$0.5 \mathrm{MnO_2} + 0.25 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.25 \mathrm{TiO} + 0.25 \mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
992	504	1.000	-1.644	$1.25 \mathrm{MnO} + 0.5 \mathrm{MnO}_2 + 0.25 \mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.25 \mathrm{TiO} + 0.25 \mathrm{TiMnO}_3 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4$
993	505	0.500	-2.219	$0.2941 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1176 \text{ Mn}_2 + 0.1176 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5294 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.1176 \text{ Ti}_2 + 0.1176 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3$
994	505	0.500	-2.487	$0.2857 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1429 \mathrm{MnO_2} + 0.1429 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.5714 \mathrm{TiO} + 0.1429 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
995	506	1.000	-3.008	$0.3333 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.3333 \text{ V}_2\text{O}_5 + 1.667 \text{ VO} + 0.3333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5$
996	507	1.000	-1.947	$0.7698 \text{Fe}_2\text{O}_3 + 1.087 \text{Fe}_3\text{O}_4 + 0.2 \text{Li}_5 \text{Fe}\text{O}_4 + 0.2717 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{Fe}_5\text{O}_8$
997	508	1.000	-0.733	$0.25\mathrm{Mn_3O_4} + 1.25\mathrm{MnO} + 0.25\mathrm{Ti_3O_5} + 0.25\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
998	509	0.200	-0.873	$0.2297 \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.09459 \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1486 \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.04054 \text{TiO} + 0.05405 \text{TiO}_2 + 0.2703 \text{TiMn}_2 \text{O}_4 + 0.02703 \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
999	509	0.200	-0.835	$0.2261 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1087 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1696 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2739 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02609 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}\text{O}_3$
1000	509	0.200	-0.755	$0.2266 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.1016 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.1563 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.05469 \mathrm{TiO_2} + 0.2734 \mathrm{TiMn_2O_4} + 0.01562 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
1001	509	0.200	-0.689	$0.25\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08333\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08333\mathrm{TiO_2} + 0.25\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
1002	509	0.200	-0.953	$0.2293 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1015 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1617 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04135 \text{ TiO} + 0.2707 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.03759 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3$
1003	510	1.000	-2.316	$0.5 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \mathrm{MnO} + 0.25 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.5 \mathrm{TiO} + 0.125 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1004	511	1.000	-3.690	$0.3333 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.3333 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.3333 \text{ VO} + \text{O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_5$
1005	512	1.000	-2.896	$0.2 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.2 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.6 \mathrm{TiO} + 0.2 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1006	513	0.125	-1.241	$0.08861 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2911 \text{ TiO} + 0.3418 \text{ TiO}_2 + 0.3671 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1013 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_3$
1007	513	0.125	-1.250	$0.08571 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.01143 \text{ MnO} + 0.2914 \text{ TiO} + 0.3429 \text{ TiO}_2 + 0.3657 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1029 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
1008	513	0.125	-1.236	$0.048 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.052 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.044 \mathrm{MnO_2} + 0.304 \mathrm{TiO} + 0.344 \mathrm{TiO_2} + 0.352 \mathrm{TiMn_2O_4} + 0.08 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
1009	513	0.125	-1.240	$0.07212 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.009615 \mathrm{MnO} + 0.05288 \mathrm{MnO_2} + 0.2981 \mathrm{TiO} + 0.3413 \mathrm{TiO_2} + 0.3606 \mathrm{TiMn_2O_4} + 0.08654 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
1010 1011	513 513	0.125 0.125	-1.232 -1.239	$0.07447 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05319 \text{ MnO}_2 + 0.2979 \text{ TiO} + 0.3404 \text{ TiO}_2 + 0.3617 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.08511 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$ $0.04762 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05128 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.003663 \text{ MnO} + 0.04396 \text{ MnO}_2 + 0.304 \text{ TiO} + 0.3443 \text{ TiO}_2 + 0.3516 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.08059 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
1011	513	0.125	-1.239	
1012	513	0.125	-1.245	$0.0553 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05991 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2995 \text{ TiO} + 0.3456 \text{ TiO}_2 + 0.3548 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.09217 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$ $0.05485 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05907 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.004219 \text{ MnO} + 0.2996 \text{ TiO} + 0.346 \text{ TiO}_2 + 0.3544 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.09283 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
1013	514	0.123	-1.240	$0.05485 \text{ Min}_2 O_3 + 0.05907 \text{ Min}_3 O_4 + 0.004219 \text{ Min}O + 0.2990 \text{ Ti}O + 0.540 \text{ Ti}O_2 + 0.5344 \text{ Ti}MnO_3$ $0.4894 \text{ Mn}O + 0.5106 \text{ Mn}O_2 + 0.4043 \text{ Ti}_2 O_3 + 0.1915 \text{ Ti}O + 0.04255 O_2 \longrightarrow \text{TiMn}O_3$
1014	514	0.500	-1.770	$0.4286 \mathrm{MnO} + 0.5714 \mathrm{MnO}_2 + 0.4286 \mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1429 \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3$
1015	515	0.500	-0.800	$0.4280 \text{ MnO} + 0.5714 \text{ MnO}_2 + 0.4280 \text{ H2O}_3 + 0.1429 \text{ HO} \longrightarrow \text{HMnO}_3$ $0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1429 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.2857 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2857 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1429 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
1010	515	0.500	-0.897	$0.1429 \text{ Min}_3O_4 + 0.1429 \text{ Min}_3O_4 + 0.1429 \text{ Min}_3O_2 + 0.2837 \text{ H}_2O_3 + 0.2837 \text{ H}_2O_3 + 0.1111 \text{ Mn}_2O_4$
1017	516	0.500	-0.897	$0.3333 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.1717 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1717 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.4043 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.1915 \mathrm{TiO} + 0.04255 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
1010	510	0.500	-1.790	0.5555 Milizor + 0.150 Milio + 0.1775 Miloz + 0.4045 Mizor + 0.1715 Mo + 0.04255 Oz

```
Weight
                                                                          \Delta_r H
                    Label
                                                                                                    Reaction
                                                                       eV/atom
1019
                        516
                                               0.500
                                                                          -1.584
                                                                                                   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}
                        517
                                               1.000
1020
                                                                          -1.187
                                                                                                   0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                               1.000
                                                                          -2.643
1021
                         518
                                                                                                   0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.1667 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1022
                         519
                                               0.250
                                                                          -0.485
                                                                                                   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
                         519
                                               0.250
1023
                                                                           -0.558
                                                                                                   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
1024
                        519
                                               0.250
                                                                          -0.501
                                                                                                   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
1025
                         519
                                               0.250
                                                                          -0.539
                                                                                                   0.122 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.1695 \, \text{Fe}_3 \, \text{O}_4 + 0.04746 \, \text{Fe} \, \text{O} + 0.2 \, \text{Li}_5 \, \text{Fe} \, \text{O}_4 + 0.05424 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_7 \, \text{Fe} \, \text{O}_2
1026
                        520
                                               1.000
                                                                             0.038
                                                                                                   Cr_2O_3 + NiO \longrightarrow Cr_2NiO_4
1027
                         521
                                               0.500
                                                                          -1.914
                                                                                                   0.625 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ Mn}_{\text{O}_2} + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.625 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{Mn}_2\text{O}_4
                                               0.500
1028
                         521
                                                                          -1.773
                                                                                                   0.6 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.6 \,\mathrm{TiO} + 0.1 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                        522
                                               0.125
1029
                                                                          -2.407
                                                                                                   0.6364 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.8182 \,\mathrm{TiO} + 0.09091 \,\mathrm{TiO_2} + 0.09091 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.09091 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                         522
                                               0.125
1030
                                                                          -2.502
                                                                                                   0.07143 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5714 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07143 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.8571 \text{ TiO} + 0.07143 \text{ TiO}_2 + 0.07143 \text{ TiMn}_3 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                         522
                                               0.125
                                                                           -2.717
1031
                                                                                                   0.08333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5833 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08333 \text{ Mn}_2 + 0.9167 \text{ TiO} + 0.08333 \text{ TiO}_2 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1032
                         522
                                               0.125
                                                                          -2.721
                                                                                                   0.09091 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.5455 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.09091 \, \text{Mn}_2 + 0.9091 \, \text{TiO} + 0.09091 \, \text{TiMn}_3 + 0.09091 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
1033
                         522
                                               0.125
                                                                           -2.689
                                                                                                   0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5556 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.8889 \text{ TiO} + 0.1111 \text{ TiMnO}_3 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1034
                         522
                                               0.125
                                                                          -2.687
                                                                                                   0.1 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.6 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.9 \text{ TiO} + 0.1 \text{ TiO}_2 + 0.1 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1035
                         522
                                               0.125
                                                                          -2.478
                                                                                                   0.6154 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07692 \text{ MnO}_2 + 0.8462 \text{ TiO} + 0.07692 \text{ TiO}_2 + 0.07692 \text{ TiMnO}_3 + 0.07692 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                         522
                                               0.125
1036
                                                                           -2.441
                                                                                                   0.08333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5833 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.8333 \text{ TiO} + 0.08333 \text{ TiO}_2 + 0.08333 \text{ TiMnO}_3 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1037
                         523
                                               1.000
                                                                          -1.190
                                                                                                    1.667 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.3333 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
1038
                         524
                                               1.000
                                                                          -0.967
                                                                                                   0.09091 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ Mn}_2\text{O}_4 + 0.09091 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09091 \text{ Ti}_3\text{O
                        525
1039
                                               1.000
                                                                          -1.793
                                                                                                   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
1040
                        526
                                               1.000
                                                                          -7.351
                                                                                                   4.667 \text{ FeO} + 0.1667 \text{ Li}_5 \text{FeO}_4 + 0.1667 \text{ Li}_5 \text{FeO}_2 + 1.167 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{Fe}_5 \text{O}_8
                         527
                                               1.000
                                                                          -0.985
1041
                                                                                                   1.75 \text{ MnO} + 0.25 \text{ MnO}_2 + 0.25 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.25 \text{ Ti}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
1042
                         528
                                               1.000
                                                                          -1.755
                                                                                                   0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 2.333 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_3O_4}
1043
                         529
                                               1.000
                                                                          -0.989
                                                                                                   0.3333 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                         530
                                               1.000
                                                                          -1.504
                                                                                                   0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + \text{MnO} + 0.25 \text{ MnO}_2 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1044
1045
                         531
                                               0.500
                                                                          -2.043
                                                                                                   0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.5 \text{ Mn}\text{O} + 0.125 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.375 \text{ Ti}\text{O} + 0.125 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.125 \text{ Ti}\text{Mn}\text{O}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4
                         531
                                               0.500
1046
                                                                          -2.326
                                                                                                   0.1429 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 1.571 \, \text{MnO} + 0.1429 \, \text{MnO}_2 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.4286 \, \text{TiO} + 0.1429 \, \text{TiO}_2 + 0.1429 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
                         532
1047
                                               1.000
                                                                          -0.507
                                                                                                   0.3333 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 2.333 \, \text{Li}_2 \, \text{O} + 0.3333 \, \text{Li}_2 \, \text{Fe}_2 \, \longrightarrow \, \text{Li}_5 \, \text{Fe}_4 \, \text{O}_4
                         533
                                               0.333
                                                                           -2.556
1048
                                                                                                   0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.125 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.625 \,\mathrm{TiO} + 0.125 \,\mathrm{TiO_2} + 0.125 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1049
                         533
                                               0.333
                                                                          -2.957
                                                                                                   0.4286 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1429 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.7143 \,\mathrm{TiO} + 0.1429 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1050
                        533
                                               0.333
                                                                           -2.640
                                                                                                   0.4444 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.1111 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.6667 \text{ TiO} + 0.1111 \text{ TiO}_2 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1051
                         534
                                               0.500
                                                                          -1.034
                                                                                                   0.1613 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2903 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.4194 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.06452 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1052
                        534
                                               0.500
                                                                          -1.153
                                                                                                   0.1008 \,\mathrm{MnO} + 0.1429 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.3109 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.3782 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 + 0.08403 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
1053
                         535
                                               0.200
                                                                          -1.046
                                                                                                   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}
                                                                          -0.979
                         535
                                               0.200
1054
                                                                                                   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
1055
                         535
                                               0.200
                                                                          -1.027
                                                                                                   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}
1056
                         535
                                               0.200
                                                                          -1.105
                                                                                                   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
1057
                         535
                                               0.200
                                                                          -0.850
                                                                                                   0.2778 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1111 \,\mathrm{MnO} + 0.05556 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                         536
                                               1.000
                                                                                                   0.1667\,Mn_3O_4 + 1.333\,MnO + 0.1667\,MnO_2 + 0.1667\,Ti_2O_3 + 0.5\,TiO + 0.1667\,TiO_2 + 0.1667\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.1667\,TiO_2 
                                                                           -2.568
1058
                         537
                                               0.500
                                                                          -1.708
                                                                                                   0.4286 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.1429 \, \text{Mn}_{2} + 0.1429 \, \text{Ti}_{3} \text{O}_{5} + 0.4286 \, \text{Ti}_{2} + 0.1429 \, \text{Ti}_{2} \longrightarrow \text{Ti}_{3} \text{Mn}_{2}
1059
1060
                         537
                                               0.500
                                                                          -1.603
                                                                                                   0.4444 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.1111 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3333 \text{ TiO} + 0.1111 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                         538
1061
                                               1.000
                                                                           -3.066
                                                                                                   0.25 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.25 \,\mathrm{MnO} + 0.75 \,\mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{TiO_2} + 0.25 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
```

	Label	Weight	$\Delta_r H$ eV/atom	Reaction
1062	539	0.250	-0.645	$0.09091 \text{Fe}_2 \text{O}_3 + 0.09091 \text{Fe}_3 \text{O}_4 + 2.409 \text{Li}_2 \text{O} + 0.09091 \text{Li} \text{Fe}_5 \text{O}_8 + 0.09091 \text{Li} \text{Fe} \text{O}_2 + 0.02273 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \text{Fe} \text{O}_4$
1063	539	0.250	-0.672	$0.1111 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Fe}O + 2.389 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1111 \text{ Li}_2\text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Li}_2\text{Fe}_2 + 0.02778 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}_2\text{O}_3$
1064	539	0.250	-0.495	$0.125 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 2.375 \text{ Li}_2\text{O} + 0.125 \text{ Li}\text{Fe}_5\text{O}_8 + 0.125 \text{ Li}\text{Fe}\text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_4$
1065	539	0.250	-0.531	$0.1429 \text{Fe}_2\text{O}_3 + 2.429 \text{Li}_2\text{O} + 0.1429 \text{Li}_5\text{Fe}_0\text{O}_8 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_0\text{O}_4$
1066	540	0.250	-0.427	$0.5 \operatorname{Cr}_2 \operatorname{O}_3 + \operatorname{Cr} \operatorname{O}_2 + 0.5 \operatorname{Cu}_2 \operatorname{O} \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{Cu} \operatorname{O}_4$
1067	540	0.250	0.038	$Cr_2O_3 + CuO \longrightarrow Cr_2CuO_4$
1068	540	0.250	-0.431	$0.7909 \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.4182 \text{CrO}_2 + 0.3909 \text{Cu}_2\text{O} + 0.2182 \text{CuO} + 0.09091 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CuO}_4$
1069	540	0.250	-0.241	$0.7 \text{Cr}_2 \text{O}_3 + 0.6 \text{Cr} \text{O}_2 + 0.3 \text{Cu}_2 \text{O} + 0.4 \text{CuO} \longrightarrow \text{Cr}_2 \text{CuO}_4$
1070	541	1.000	-0.868	$CuO + FeO \longrightarrow FeCuO_2$
1071	542	1.000	-2.632	$0.6667 \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.6667 \text{MnO} + 0.1667 \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.6667 \text{TiO} + 0.08333 \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4$
1072	543	1.000	-1.534	$1.667 \mathrm{MnO} + 0.3333 \mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.3333 \mathrm{TiMnO}_3 + 0.1667 \mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4$
1073	544	1.000	-1.844	$0.25\mathrm{Mn_2O_3} + 0.25\mathrm{MnO} + 0.25\mathrm{MnO_2} + 0.25\mathrm{Ti_2O_3} + 0.08333\mathrm{Ti_3O_5} + 0.25\mathrm{TiO} + 0.04167\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
1074	545	0.500	-0.993	$0.1429\mathrm{Mn_2O_3} + 1.571\mathrm{MnO} + 0.1429\mathrm{MnO_2} + 0.2857\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1429\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1075	545	0.500	-0.877	$0.125Mn_2O_3 + 1.5MnO + 0.125MnO_2 + 0.25Ti_3O_5 + 0.125TiO_2 + 0.125TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1076	546	0.500	-0.549	$0.6667 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + 0.3333 \operatorname{Fe}_3 \operatorname{O}_4 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{FeO}_4$
1077	546	0.500	-0.651	$0.6667 \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.3008 \text{Fe}_3\text{O}_4 + 0.09756 \text{FeO} + 0.01626 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4$
1078	547	1.000	-3.929	$0.25 \mathrm{Mn_2O_3} + 1.25 \mathrm{MnO} + 0.25 \mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.25 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1079	548	0.500	-0.849	$0.1905 \text{Ti}_2\text{O}_3 + 0.119 \text{Ti}\text{O}_2 + 0.5 \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.09524 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}\text{O}_3$
1080	548	0.500	-1.003	$0.1667 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.05556 \text{ TiO} + 0.1111 \text{ TiO}_2 + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
1081	549	1.000	-1.321	$0.1667\mathrm{Mn_2O_3} + 1.667\mathrm{MnO} + 0.1667\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1667\mathrm{TiO_2} + 0.08333\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1082	550	0.200	-0.908	$0.3099 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.07042 \text{CoO} + 0.2817 \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.02817 \text{TiO} + 0.1268 \text{TiO}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3$
1083	550	0.200	-0.970	$0.3333 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.2778 \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.05556 \text{TiO} + 0.1111 \text{TiO}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3$
1084	550	0.200	-0.873	$0.3 \operatorname{Co}_{3} \operatorname{O}_{4} + 0.1 \operatorname{CoO} + 0.3 \operatorname{Ti}_{3} \operatorname{O}_{5} + 0.1 \operatorname{Ti}_{2} \longrightarrow \operatorname{TiCoO}_{3}$
1085	550	0.200	-1.090	$0.3333 \text{Co}_3\text{O}_4 + 0.2733 \text{Ti}_3\text{O}_5 + 0.08667 \text{TiO} + 0.09333 \text{TiO}_2 + 0.01333 \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3$
1086	550	0.200	-1.131	$0.3014 \mathrm{Co}_3\mathrm{O}_4 + 0.09589 \mathrm{CoO} + 0.274 \mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.08219 \mathrm{TiO} + 0.09589 \mathrm{TiO}_2 + 0.0274 \mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiCoO}_3$
1087	551	1.000	-0.665	$0.7931 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.3103 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.5172 \text{ VO} + 0.2759 \text{ VO}_2 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5$
1088	552	0.500	-1.653	$0.1667Mn_2O_3 + 0.1667Mn_3O_4 + 1.167MnO + 0.1667Ti_2O_3 + 0.1667Ti_3O_5 + 0.1667TiO + 0.08333O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1089	552	0.500	-1.425	$0.1429Mn_2O_3 + 0.1429Mn_3O_4 + 1.143MnO + 0.1429Ti_2O_3 + 0.1429Ti_3O_5 + 0.1429TiO + 0.1429TiMnO_3 + 0.07143O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1090	553	0.500	-0.920	$0.1667Mn_2O_3 + 0.1667Mn_3O_4 + 1.167MnO + 0.1667Ti_2O_3 + 0.1667Ti_3O_5 + 0.1667TiO_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1091	553	0.500	-0.797	$0.1429\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429\mathrm{Mn_3O_4} + 1.143\mathrm{MnO} + 0.1429\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1429\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1429\mathrm{TiO_2} + 0.1429\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1092	554	1.000	-1.582	$0.25\mathrm{Mn_2O_3} + 1.25\mathrm{MnO} + 0.25\mathrm{MnO_2} + 0.25\mathrm{Ti_2O_3} + 0.25\mathrm{TiO} + 0.25\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1093	555	0.333	-1.061	$0.3333 \text{ MnO}_2 + 0.1111 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1111 $
1094	555	0.333	-1.201	$0.125 \text{ MnO} + 0.375 \text{ MnO}_2 + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.125 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
1095	555	0.333	-0.986	$0.1\mathrm{MnO} + 0.3\mathrm{MnO}_2 + 0.1\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.1\mathrm{Ti}_0\mathrm{O} + 0.1\mathrm{Ti}_0\mathrm{O}_2 + 0.3\mathrm{Ti}\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4 \longrightarrow \mathrm{Ti}\mathrm{MnO}_3$
1096	556	0.333	-1.868	$0.09091 Mn_2O_3 + 0.5455 Mn_3O_4 + 0.09091 MnO_2 + 0.09091 Ti_2O_3 + 0.6364 TiO + 0.09091 TiO_2 + 0.09091 TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1097	556	0.333	-1.932	$0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.625 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.125 \text{ Ti}_3\text{Mn}_3$ \longrightarrow TiMn ₂ O ₄
1098	556	0.333	-2.014	$0.1111 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.5556 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1111 \mathrm{MnO_2} + 0.1111 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.6667 \mathrm{TiO} + 0.1111 \mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1099	557	1.000	-1.355	$0.3333 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.3333 \mathrm{MnO} + 0.3333 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.1111 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.05556 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
1100	558	1.000	-1.696	$0.6667 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.6667 \mathrm{TiO} + 0.3333 \mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1101	559	1.000	-2.010	$0.75 \text{ MnO} + 0.25 \text{ MnO}_2 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ TiO}_4 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3$
1102	560	1.000	-3.098	$0.2 \mathrm{Mn_2O_3} + 1.4 \mathrm{MnO} + 0.2 \mathrm{MnO_2} + 0.2 \mathrm{Ti}_2\mathrm{O_3} + 0.6 \mathrm{TiO} + 0.2 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1103	561	1.000	-0.724	$0.2 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \mathrm{MnO} + 0.2 \mathrm{TiO} + 0.6 \mathrm{TiO_2} + 0.2 \mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
1104	562	1.000	-0.463	$0.25 \mathrm{Cu_2O} + 0.5 \mathrm{CuO} + 0.25 \mathrm{Fe_3O_4} + 0.25 \mathrm{FeO} \longrightarrow \mathrm{FeCuO_2}$

```
Weight
                                                                \Delta_r H
                                                                                     Reaction
                 Label
                                                            eV/atom
1105
                     563
                                        1.000
                                                                -0.944
                                                                                     0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.167 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1667 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                        1.000
                                                                -0.957
1106
                     564
                                                                                     0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.8 \,\mathrm{MnO} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                        1.000
                                                                -3.022
                                                                                     0.1667 \, Mn_2O_3 + 0.1667 \, Mn_3O_4 + 0.8333 \, MnO + 0.1667 \, MnO_2 + 0.8333 \, TiO + 0.1667 \, TiMnO_3 + 0.1667 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
1107
                     565
                      566
                                        1.000
                                                                -2.176
                                                                                     0.2857 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.2857 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.2857 \, \text{Mn}_3
1108
                     567
                                        0.500
1109
                                                                -1.439
                                                                                     MnO + 0.2927 Ti_3O_5 + 0.122 TiO_2 + 0.1463 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1110
                     567
                                        0.500
                                                                -1.566
                                                                                     MnO + 0.28 Ti_3O_5 + 0.04 TiO + 0.12 TiO_2 + 0.16 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1111
                      568
                                        0.500
                                                                -3.839
                                                                                     0.1887 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2075 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{TiO} + 0.3019 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1112
                     568
                                        0.500
                                                                -3.853
                                                                                     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}
1113
                     569
                                        1.000
                                                                -0.125
                                                                                     0.5 \text{ TiO}_2 + 0.5 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                        1.000
1114
                     570
                                                                -3.160
                                                                                     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}
                     571
                                        0.333
                                                                                     0.1667 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.5 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.1667 \text{ Cr}\text{O}_2 + 0.1667 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.6667 \text{ Fe}\text{O} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Fe}\text{O}_4
1115
                                                                -0.753
                     571
                                        0.333
1116
                                                                -1.110
                                                                                     0.6667 \, \text{Cr}_3 \, \text{O}_4 + 0.1667 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.6667 \, \text{FeO} + 0.08333 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2 \, \text{FeO}_4
                                                                -0.831
                     571
                                        0.333
1117
                                                                                     0.6 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.2 \text{ Cr}\text{O}_2 + 0.2 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.6 \text{ Fe}\text{O} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{Fe}\text{O}_4
                     572
                                        1.000
                                                                -1.721
                                                                                     1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.25 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.25 \,\mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{TiO}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
1118
                     573
                                        1.000
                                                                -0.360
1119
                                                                                     Cr_2O_3 + FeO \longrightarrow Cr_2FeO_4
1120
                     574
                                        1.000
                                                                -2.493
                                                                                     0.2857 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.2857 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.2857 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.2857 \, \text{Mn} \, \text{O}_2 + 0.8571 \, \text{TiO} + 0.1429 \, \text{TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
1121
                     575
                                        1.000
                                                                -1.368
                                                                                     0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 1.5 \, \text{MnO} + 0.1667 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1667 \, \text{TiO} + 0.1667 \, \text{TiO}_2 + 0.1667 \, \text{TiMnO}_3 + 0.08333 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
1122
                     576
                                        0.500
                                                                -0.887
                                                                                     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{Li}_2\text{FeO}_2
1123
                     576
                                        0.500
                                                                -0.798
                                                                                     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
1124
                     577
                                        0.143
                                                                -1.372
                                                                                     0.08333 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 1.75 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.08333 \, \text{Mn} \, \text{O}_2 + 0.08333 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.25 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.08333 \, \text{Ti}_{O_2} + 0.08333 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4
1125
                     577
                                        0.143
                                                                -1.211
                                                                                     0.07143 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.714 \,\mathrm{MnO} + 0.07143 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2857 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07143 \,\mathrm{TiO_2} + 0.07143 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.07143 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1126
                     577
                                        0.143
                                                                -1.346
                                                                                     0.08333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.667 \text{ MnO} + 0.08333 \text{ MnO}_2 + 0.08333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08333 \text{ Ti}_3\text{MnO}_3 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
1127
                     577
                                        0.143
                                                                -1.216
                                                                                     0.09091 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.727 \text{ MnO} + 0.2727 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09091 \text{ TiO}_2 + 0.09091 \text{ TiMnO}_3 + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1128
                     577
                                        0.143
                                                                -1.276
                                                                                     0.07692 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.692 \text{ MnO} + 0.07692 \text{ MnO}_2 + 0.3077 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07692 \text{ Ti} \text{MnO}_3 + 0.07692 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \text{Mn}_2\text{O}_4
1129
                     577
                                        0.143
                                                                -1.301
                                                                                     0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.7 \,\mathrm{MnO} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1130
                     577
                                        0.143
                                                                -1.271
                                                                                     0.07692 \text{ Mn} 2 \text{O}_3 + 1.692 \text{ Mn} \text{O}_4 + 0.07692 \text{ Mn} \text{O}_2 + 0.07692 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.2308 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.07692 \text{ Ti} \text{O}_7 + 0.07692 \text{ Ti} \text{Mn} \text{O}_3 + 0.07692 \text{ O}_7 - \cdots \rightarrow \text{Ti} \text{Mn}_2 \text{O}_4
1131
                     578
                                        1.000
                                                                -0.859
                                                                                     0.1667 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ TiO}_2 + 0.1667 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                     579
1132
                                        1.000
                                                                -1.557
                                                                                     0.2 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.4 \text{ MnO} + 0.2 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2 \text{ TiO} + 0.2 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.2 \text{ TiMnO}_3 + 0.1 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1133
                     580
                                        1.000
                                                                -2.847
                                                                                     0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                        1.000
1134
                     581
                                                                -1.037
                                                                                     0.1667 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.333 \text{ MnO} + 0.1667 \text{ MnO}_2 + 0.1667 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1667 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1135
                     582
                                        0.500
                                                                -3.151
                                                                                     0.3051 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.4237 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1186 \text{ MnO} + \text{TiO} + 0.1356 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1136
                     582
                                        0.500
                                                                -3.050
                                                                                     0.3208 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.4528 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{TiO} + 0.1132 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1137
                      583
                                        1.000
                                                                -2.037
                                                                                     0.5 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \,\mathrm{MnO_2} + 0.75 \,\mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1138
                     584
                                        0.500
                                                                -1.582
                                                                                    1.75 \text{ MnO} + 0.125 \text{ MnO}_2 + 0.375 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ TiO}_2 + 0.125 \text{ TiMnO}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1139
                     584
                                        0.500
                                                                -1.756
                                                                                     1.714 \,\mathrm{MnO} + 0.1429 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.4286 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1429 \,\mathrm{TiMnO}_3 + 0.1429 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4
1140
                      585
                                        1.000
                                                                -1.463
                                                                                     0.6415 \, \text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.9057 \, \text{Fe}_3\text{O}_4 + \text{LiFe}\text{O}_2 + 0.2264 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
                      586
                                        1.000
                                                                -2.715
1141
                                                                                     0.6667 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.8333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_5
                                                                                     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}
1142
                     587
                                        0.500
                                                                -1.427
1143
                      587
                                        0.500
                                                                -1.559
                                                                                     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}
                     588
1144
                                        0.500
                                                                -1.397
                                                                                     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}
                      588
                                        0.500
                                                                -1.261
1145
                                                                                     0.25 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.25 \text{ MnO}_2 + 0.5 \text{ Ti}_2\text{O}_3 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1146
                      589
                                        0.250
                                                                -1.179
                                                                                     0.07143 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.643 \text{ MnO} + 0.07143 \text{ MnO}_2 + 0.2857 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07143 \text{ TiO}_2 + 0.07143 \text{ TiMnO}_3 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                      589
1147
                                        0.250
                                                                -1.241
                                                                                     0.07692 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.615 \text{ MnO} + 0.07692 \text{ MnO}_2 + 0.3077 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07692 \text{ TiMnO}_3 + 0.07692 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
```

```
Weight
                                                                   \Delta_r H
                  Label
                                                                                          Reaction
                                                               eV/atom
1148
                       589
                                          0.250
                                                                   -1.256
                                                                                         0.1 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.6 \,\mathrm{MnO} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                      589
                                          0.250
                                                                   -1.339
1149
                                                                                         0.08333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.667 \,\mathrm{MnO} + 0.08333 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                          1.000
1150
                      590
                                                                   -1.668
                                                                                         1.6 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_2 \,\mathrm{O}_3 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_2 
                       591
                                          1.000
                                                                   -1.260
                                                                                        0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.2 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1151
                      592
                                          1.000
1152
                                                                   -1.243
                                                                                         1.75 \text{ MnO} + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ TiO}_2 + 0.25 \text{ TiMnO}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1153
                      593
                                          1.000
                                                                   -1.531
                                                                                        0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1154
                       594
                                          1.000
                                                                   -3.166
                                                                                        0.25 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.75 \,\mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 + 0.25 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
1155
                      595
                                          1.000
                                                                   -0.060
                                                                                        MnO + TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4
1156
                      596
                                          0.125
                                                                   -2.282
                                                                                        0.0625 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.625 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.0625 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.75 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.0625 \text{ Ti}_2 + 0.0625 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
                                                                   -2.256
1157
                       596
                                          0.125
                                                                                        0.06667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.7333 \,\mathrm{TiO} + 0.06667 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.06667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                      596
                                          0.125
1158
                                                                   -2.203
                                                                                        0.6316 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05263 \,\mathrm{MnO_2} + 0.05263 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.7368 \,\mathrm{TiO} + 0.05263 \,\mathrm{TiO_2} + 0.05263 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.05263 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                          0.125
                                                                   -2.217
1159
                       596
                                                                                        0.6429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.07143 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.7143 \text{ Ti}\text{O} + 0.07143 \text{ Ti}\text{MnO}_3 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4
1160
                      596
                                          0.125
                                                                   -2.125
                                                                                        0.6471 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05882 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.7059 \text{ Ti}\text{O} + 0.05882 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.05882 \text{ Ti}\text{Mn}\text{O}_3 + 0.05882 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4
                       596
                                          0.125
                                                                   -2.163
                                                                                        0.05556 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.6111 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.05556 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.7222 \, \text{Ti} \, \text{O} + 0.05556 \, \text{Ti}_{O_2} + 0.05556 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_{O_3} + 0.05556 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4
1161
                       596
                                          0.125
                                                                   -2.247
                                                                                        0.6667 \, Mn_3O_4 + 0.06667 \, Ti_3O_5 + 0.7333 \, TiO + 0.06667 \, TiO_2 + 0.06667 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
1162
1163
                       596
                                          0.125
                                                                   -2.233
                                                                                        0.05\,Mn_2O_3 + 0.6\,Mn_3O_4 + 0.05\,MnO_2 + 0.05\,Ti_3O_5 + 0.75\,TiO + 0.05\,TiO_2 + 0.05\,TiMnO_3 + 0.05\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
1164
                      597
                                          1.000
                                                                   -1.285
                                                                                        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}
                                          1.000
1165
                      598
                                                                   -1.753
                                                                                        0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.7143 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiO}_2 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1166
                      599
                                          0.500
                                                                   -0.585
                                                                                        0.2222 \text{ Mn}_3 \text{ O}_4 + 0.1111 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ Ti}_2 \text{ O}_3 + 0.1111 \text{ Ti}_3 \text{ O}_5 + 0.3333 \text{ TiO}_2 + 0.1111 \text{ TiMn}_2 \text{ O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1167
                       599
                                          0.500
                                                                   -0.757
                                                                                        0.09091\,Mn_2O_3 + 0.1818\,Mn_3O_4 + 0.09091\,MnO + 0.09091\,Ti_2O_3 + 0.09091\,Ti_3O_5 + 0.09091\,TiO + 0.3636\,TiO_2 + 0.09091\,TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3
1168
                      600
                                          1.000
                                                                   -1.322
                                                                                        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}
1169
                      601
                                          1.000
                                                                   -0.914
                                                                                        0.4048 \, \text{Fe}_2\text{O}_3 + 0.1905 \, \text{FeO} + 2.5 \, \text{Li}_2\text{O} + 0.04762 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_4
                      602
                                          1.000
                                                                   -3.101
                                                                                        0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.25 \text{ MnO} + 0.75 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiMnO}_3 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1170
                       603
                                          0.500
                                                                   -0.714
1171
                                                                                        0.1667 \, \text{Cr}_2\text{O}_3 + 0.5 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.1667 \, \text{Cr}_{O_2} + 0.1667 \, \text{Fe}_3\text{O}_4 + 0.5 \, \text{FeO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
1172
                      603
                                          0.500
                                                                   -0.685
                                                                                        0.1111 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.5556 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ Cr}\text{O}_2 + 0.1111 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.4444 \text{ FeO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
1173
                      604
                                          0.500
                                                                   -1.612
                                                                                        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
1174
                      604
                                          0.500
                                                                   -1.573
                                                                                        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
1175
                      605
                                          1.000
                                                                   -1.137
                                                                                        0.1667 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.5 \text{ CoO} + 0.1667 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.5 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.1667 \text{ Cr}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{CoO}_4
                      606
                                          0.500
                                                                   -1.247
1176
                                                                                        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
                                         0.500
1177
                      606
                                                                   -1.188
                                                                                        0.3333 \operatorname{Co}_3 \operatorname{O}_4 + 0.6667 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{CoO}_4
1178
                      607
                                          0.333
                                                                   -1.037
                                                                                        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{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.01533 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1179
                      607
                                          0.333
                                                                   -0.978
                                                                                        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}
1180
                      607
                                          0.333
                                                                   -0.969
                                                                                        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}
1181
                      608
                                          0.500
                                                                   -1.449
                                                                                        NiO + 0.28 Ti_3O_5 + 0.04 TiO + 0.12 TiO_2 + 0.16 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
1182
                      608
                                          0.500
                                                                   -1.322
                                                                                        NiO + 0.2927 Ti_3O_5 + 0.122 TiO_2 + 0.1463 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
                                          1.000
1183
                      609
                                                                   -0.894
                                                                                        1.5 \text{ MnO} + 0.25 \text{ MnO}_2 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.25 \text{ Ti}_3\text{MnO}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
                      610
                                          0.500
                                                                   -1.049
                                                                                        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}
1184
1185
                      610
                                          0.500
                                                                   -1.155
                                                                                        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}
1186
                      611
                                          1.000
                                                                   -0.325
                                                                                        0.5 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5 \text{ TiO} \longrightarrow \text{Ti}_2\text{O}_3
                      612
                                          0.333
                                                                   -0.647
                                                                                        0.11111 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 2.389 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1111 \text{ LiFe}_5\text{O}_8 + 0.1111 \text{ LiFe}_0^2 + 0.02778 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_0^4
1187
                      612
                                          0.333
                                                                   -0.682
                                                                                        0.1429 \, \text{FeO} + 2.357 \, \text{Li}_2\text{O} + 0.1429 \, \text{Li}_{\text{Fe}} \cdot O_8 + 0.1429 \, \text{Li}_{\text{Fe}} \cdot O_2 + 0.03571 \, O_2 \longrightarrow \text{Li}_5 \cdot \text{Fe} \cdot O_4
1188
1189
                      612
                                          0.333
                                                                   -0.791
                                                                                        0.1 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1 \text{ Fe}\text{O} + 2.4 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1 \text{ Li}_2\text{Fe}\text{O}_8 + 0.1 \text{ Li}_2\text{Fe}\text{O}_2 + 0.05 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}\text{O}_4
                      613
1190
                                          0.333
                                                                   -1.226
                                                                                        0.6364 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.09091 \, \text{Cr}_2 + 0.09091 \, \text{Fe}_3\text{O}_4 + 0.7273 \, \text{FeO} + 0.09091 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
```

```
Weight
                                                                                              \Delta_r H
                          Label
                                                                                                                              Reaction
                                                                                         eV/atom
1191
                                613
                                                           0.333
                                                                                              -1.157
                                                                                                                             0.1 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.6 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.1 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.7 \text{ FeO} + 0.1 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
                                613
                                                           0.333
                                                                                                                             0.08333 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.5833 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.08333 \text{ Cr}_2 + 0.08333 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.75 \text{ FeO} + 0.08333 \text{ O}_7 \longrightarrow \text{Cr}_7\text{FeO}_4
1192
                                                                                              -1.154
                                                           0.250
                                                                                              -1.529
1193
                                614
                                                                                                                             0.08642 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1049 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.0679 \,\mathrm{MnO_2} + 0.321 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1358 \,\mathrm{TiO} + 0.2222 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.09877 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1194
                                614
                                                           0.250
                                                                                              -1.564
                                                                                                                             0.09565 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.113 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.01739 \,\mathrm{MnO} + 0.3217 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1304 \,\mathrm{TiO} + 0.2261 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.1217 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                614
                                                           0.250
1195
                                                                                              -1.549
                                                                                                                             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}
1196
                                614
                                                           0.250
                                                                                              -1.544
                                                                                                                             0.08475 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1017 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.01695 \text{ MnO} + 0.0678 \text{ MnO}_2 + 0.322 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1356 \text{ TiO} + 0.2203 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1017 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ TiMn}_2\text{ O}_4 + 0.1017 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ TiMn}_2\text{ O}_4 + 0.1017 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ TiMn}_2\text{ O}_4 + 0.1017 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \text{ O}_4 + 0.1017 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_4 + 0.1017 
1197
                                615
                                                           0.333
                                                                                              -1.594
                                                                                                                             0.6667 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + \operatorname{FeO} + 0.1667 \operatorname{O}_2 \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{FeO}_4
1198
                                615
                                                           0.333
                                                                                              -1.198
                                                                                                                             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
1199
                               615
                                                           0.333
                                                                                              -1.387
                                                                                                                             0.5909 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.2273 \, \text{CrO}_2 + \text{FeO} + 0.09091 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
                                                           0.333
                                                                                              -1.952
1200
                               616
                                                                                                                             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}_{04}
                                                           0.333
                                                                                              -1.684
1201
                                616
                                                                                                                             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
                                                           0.333
1202
                               616
                                                                                              -1.748
                                                                                                                             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
                                617
                                                           1.000
                                                                                              -1.769
                                                                                                                             0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.571 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1203
1204
                               618
                                                           1.000
                                                                                              -2.085
                                                                                                                             1.75 \text{ MnO} + 0.25 \text{ MnO}_2 + 0.25 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.25 \text{ TiO} + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
1205
                               619
                                                           0.500
                                                                                              -1.252
                                                                                                                             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}
1206
                                619
                                                           0.500
                                                                                              -1.437
                                                                                                                             0.1818 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1364 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2273 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4545 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.09091 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1207
                               620
                                                           1.000
                                                                                              -0.641
                                                                                                                             0.25 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.25 \text{ Ti}_3\text{MnO}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
1208
                               621
                                                           1.000
                                                                                               -0.754
                                                                                                                             0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.25 \text{ MnO} + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.25 \text{ Ti}_3\text{MnO}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
1209
                                622
                                                           1.000
                                                                                              -2.658
                                                                                                                             0.25 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 1.25 \text{ TiO} + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2 \text{O}_3
1210
                               623
                                                           1.000
                                                                                              -0.807
                                                                                                                             0.25 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{TiO} + 0.75 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1211
                                624
                                                           1.000
                                                                                               -0.800
                                                                                                                             1.6 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.2 \,\mathrm{Ti} \,\mathrm{O}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti} \,\mathrm{MnO}_3 \longrightarrow \mathrm{Ti} \,\mathrm{Mn}_2 \,\mathrm{O}_4
1212
                               625
                                                           0.333
                                                                                              -1.094
                                                                                                                             0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ Mn}_0 + 0.1111 \text{ Mn}_0 + 0.3333 \text{ TiO} + 0.5556 \text{ TiO}_2 + 0.1111 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_3\text{O}_3 + 0.1111 \text{ TiMn}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1111
                                625
                                                           0.333
                                                                                              -0.970
                                                                                                                             0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1429 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.2857 \text{ TiO} + 0.5714 \text{ TiO}_2 + 0.1429 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1213
1214
                                625
                                                           0.333
                                                                                               -0.817
                                                                                                                             0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ MnO} + 0.25 \text{ TiO} + 0.625 \text{ TiO}_2 + 0.125 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1215
                                626
                                                           1.000
                                                                                              -0.934
                                                                                                                             0.1429 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5714 \,\mathrm{MnO} + 0.1429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2857 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1429 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1216
                                627
                                                           1.000
                                                                                              -1.308
                                                                                                                             0.3333 \text{ V}_2\text{O}_5 + 1.333 \text{ VO} \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_3
1217
                                628
                                                           0.500
                                                                                              -0.929
                                                                                                                             0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.167 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                           0.500
1218
                                628
                                                                                              -0.805
                                                                                                                             0.1429 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.143 \,\mathrm{MnO} + 0.2857 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1429 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1219
                               629
                                                           0.500
                                                                                               -3.796
                                                                                                                             0.2727 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1818 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.2727 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                           0.500
1220
                               629
                                                                                              -3.830
                                                                                                                             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}
1221
                                630
                                                           0.500
                                                                                              -1.139
                                                                                                                             0.5 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{TiO} + 0.25 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1222
                                                           0.500
                                                                                              -1.181
                                                                                                                             0.5056 \, Mn_3O_4 + 0.2921 \, MnO + 0.1685 \, Ti_2O_3 + 0.06742 \, Ti_3O_5 + 0.2697 \, TiO + 0.191 \, TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4
                                630
1223
                                631
                                                           1.000
                                                                                              -1.754
                                                                                                                             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}
1224
                               632
                                                           0.500
                                                                                              -1.133
                                                                                                                             0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.4286 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1225
                                632
                                                           0.500
                                                                                              -1.312
                                                                                                                             0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1226
                                633
                                                           1.000
                                                                                              -1.350
                                                                                                                             0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.4 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1227
                                634
                                                           0.167
                                                                                              -1.664
                                                                                                                             0.08333 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5833 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.08333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5833 \text{ Ti}_0 + 0.08333 \text{ Ti}
1228
                                634
                                                           0.167
                                                                                              -1.631
                                                                                                                             0.06667 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.6 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.06667 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.06667 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5333 \text{ TiO} + 0.06667 \text{ TiO}_2 + 0.06667 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1229
                               634
                                                           0.167
                                                                                              -1.614
                                                                                                                             0.08333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5833 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.08333 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.08333 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1230
                               634
                                                           0.167
                                                                                              -1.646
                                                                                                                             0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5556 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.5556 \text{ TiO} + 0.1111 \text{ TiO}_2 + 0.1111 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                634
                                                           0.167
                                                                                              -1.578
                                                                                                                             0.07143\,Mn_2O_3 + 0.5714\,Mn_3O_4 + 0.07143\,MnO + 0.07143\,Ti_2O_3 + 0.07143\,Ti_3O_5 + 0.5\,TiO + 0.07143\,TiO_2 + 0.07143\,TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4
1231
1232
                                634
                                                           0.167
                                                                                              -1.695
                                                                                                                             0.07692 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6154 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07692 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.07692 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5385 \,\mathrm{TiO} + 0.07692 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                635
1233
                                                           1.000
                                                                                              -1.511
                                                                                                                             0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.6 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
```

```
Weight
                                                                                                                                   \Delta_r H
                                                                                                                                                                                Reaction
                                   Label
                                                                                                                             eV/atom
1234
                                            636
                                                                                  1.000
                                                                                                                                   -2.583
                                                                                                                                                                              0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_{O_2}} + 0.1667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                            637
                                                                                                                                   -1.921
1235
                                                                                  1.000
                                                                                                                                                                               0.4 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.4 \,\mathrm{MnO} + 0.6 \,\mathrm{TiO} + 0.4 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                                                  0.500
1236
                                           638
                                                                                                                                   -1.718
                                                                                                                                                                              0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5556 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2778 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.4444 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1237
                                            638
                                                                                  0.500
                                                                                                                                   -1.713
                                                                                                                                                                              0.1522 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5652 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2391 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.02174 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.4565 \text{ TiO} \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                            639
                                                                                  1.000
1238
                                                                                                                                   -1.257
                                                                                                                                                                              1.75 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{Ti}_{3} \,\mathrm{O}_{5} + 0.25 \,\mathrm{Ti}_{3} \,\mathrm{MnO}_{3} + 0.125 \,\mathrm{O}_{2} \longrightarrow \mathrm{Ti}_{3} \,\mathrm{Mn}_{2} \,\mathrm{O}_{4}
1239
                                           640
                                                                                  1.000
                                                                                                                                   -1.870
                                                                                                                                                                              0.1667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1240
                                           641
                                                                                  1.000
                                                                                                                                   -3.217
                                                                                                                                                                              0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.4 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.8 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1241
                                             642
                                                                                  1.000
                                                                                                                                   -0.973
                                                                                                                                                                              0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{TiO} + 0.6667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1242
                                            643
                                                                                  0.250
                                                                                                                                   -1.474
                                                                                                                                                                              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
                                                                                  0.250
1243
                                            643
                                                                                                                                   -1.428
                                                                                                                                                                              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
                                                                                  0.250
                                                                                                                                   -1.492
1244
                                            643
                                                                                                                                                                              0.1765 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.05882 \,\mathrm{MnO} + 0.2941 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1176 \,\mathrm{TiO} + 0.2941 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.1176 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                                  0.250
1245
                                            643
                                                                                                                                   -1.417
                                                                                                                                                                              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
                                                                                  1.000
                                                                                                                                   -1.549
1246
                                            644
                                                                                                                                                                              0.1429 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 1.429 \, \text{MnO}_7 + 0.1429 \, \text{MnO}_7 + 0.1429 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \text{O}_7 + 0.07143 \, \text{O
                                            645
                                                                                  1.000
                                                                                                                                   -0.492
                                                                                                                                                                              1.143 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.7143 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1247
                                            646
                                                                                  0.125
                                                                                                                                   -1.045
                                                                                                                                                                              0.2075 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1114 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1829 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.03986 \,\mathrm{TiO} + 0.1887 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.06331 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1248
1249
                                            646
                                                                                  0.125
                                                                                                                                   -0.930
                                                                                                                                                                              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}
1250
                                           646
                                                                                  0.125
                                                                                                                                   -0.836
                                                                                                                                                                              0.2069 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1102 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.175 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06487 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1897 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03917 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
                                                                                  0.125
1251
                                            646
                                                                                                                                    -0.975
                                                                                                                                                                              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
1252
                                            646
                                                                                  0.125
                                                                                                                                   -1.085
                                                                                                                                                                              0.1953 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05336 \,\mathrm{MnO} + 0.1121 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1857 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.03842 \,\mathrm{TiO} + 0.1804 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.07044 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1253
                                            646
                                                                                  0.125
                                                                                                                                   -0.880
                                                                                                                                                                              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}
                                                                                  0.125
1254
                                            646
                                                                                                                                    -0.950
                                                                                                                                                                              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}
1255
                                            646
                                                                                  0.125
                                                                                                                                   -0.989
                                                                                                                                                                              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 + 0.05769 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4 + 0.05769 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3 + 0.05769 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4 + 0.05769 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3 + 0.05769 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_3 + 0
1256
                                            647
                                                                                  1.000
                                                                                                                                   -1.923
                                                                                                                                                                              0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.14
                                            648
                                                                                  0.500
                                                                                                                                   -1.307
1257
                                                                                                                                                                              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}
1258
                                            648
                                                                                  0.500
                                                                                                                                   -1.210
                                                                                                                                                                              0.5 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1259
                                            649
                                                                                  1.000
                                                                                                                                   -2.342
                                                                                                                                                                              1.75 \text{ MnO} + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ TiO} + 0.25 \text{ TiMnO}_3 + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1260
                                            650
                                                                                  0.333
                                                                                                                                   -1.272
                                                                                                                                                                              0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.8 \,\mathrm{MnO} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                                  0.333
1261
                                            650
                                                                                                                                   -1.379
                                                                                                                                                                              0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.7778 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1262
                                                                                  0.333
                                                                                                                                   -1.240
                                                                                                                                                                              0.07692 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.7692 \,\mathrm{MnO} + 0.07692 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3077 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07692 \,\mathrm{TiO_2} + 0.07692 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                            650
                                                                                  1.000
1263
                                            651
                                                                                                                                   -1.119
                                                                                                                                                                              0.3333 \text{ Co}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ TiO} + 0.6667 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiCoO}_3
                                            652
                                                                                  0.250
                                                                                                                                   -0.891
                                                                                                                                                                              0.146 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.06569 \text{ MnO} + 0.08029 \text{ MnO}_2 + 0.2847 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1496 \text{ TiO}_2 + 0.281 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.0292 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1264
1265
                                            652
                                                                                  0.250
                                                                                                                                   -0.798
                                                                                                                                                                              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}
1266
                                            652
                                                                                  0.250
                                                                                                                                   -0.783
                                                                                                                                                                              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}
1267
                                            652
                                                                                  0.250
                                                                                                                                    -0.831
                                                                                                                                                                              0.161 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.08475 \text{ MnO}_2 + 0.2797 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1441 \text{ TiO}_2 + 0.2966 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.01695 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1268
                                            653
                                                                                  1.000
                                                                                                                                   -1.220
                                                                                                                                                                              0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.4 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1269
                                            654
                                                                                  0.125
                                                                                                                                   -0.767
                                                                                                                                                                              0.1799 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.03704 \,\mathrm{MnO} + 0.1058 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1005 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1852 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08466 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1587 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1270
                                           654
                                                                                  0.125
                                                                                                                                    -0.755
                                                                                                                                                                              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{ TiO}_2 + 0.1688 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                                                  0.125
1271
                                            654
                                                                                                                                   -0.788
                                                                                                                                                                              0.1806\,Mn_3O_4 + 0.03472\,MnO + 0.1111\,MnO_2 + 0.09722\,Ti_2O_3 + 0.184\,Ti_3O_5 + 0.01042\,TiO + 0.08681\,TiO_2 + 0.1562\,TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3
1272
                                            654
                                                                                  0.125
                                                                                                                                    -0.939
                                                                                                                                                                              0.1904\,Mn_3O_4 + 0.07295\,MnO_2 + 0.1068\,Ti_2O_3 + 0.1673\,Ti_3O_5 + 0.04626\,TiO + 0.0605\,TiO_2 + 0.1779\,TiMn_2O_4 + 0.02847\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3O_4 + 0.02840\,O_2 + 0.02840\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3O_4 + 0.02840\,O_2 + 0.02840\,O_2
                                                                                  0.125
1273
                                            654
                                                                                                                                    -0.806
                                                                                                                                                                              0.1892 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06851 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1145 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1759 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06135 \,\mathrm{TiO_2} + 0.182 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.01636 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1274
                                            654
                                                                                  0.125
                                                                                                                                    -0.789
                                                                                                                                                                              0.1885 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.1066 \, \text{Mn}_2 + 0.09836 \, \text{Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1803 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.01639 \, \text{Ti} \text{O} + 0.08197 \, \text{Ti} \text{O}_2 + 0.1639 \, \text{Ti} \text{Mn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti} \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.1803 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.01639 \, \text{Ti} \text{O}_4 + 0.08197 \, \text{Ti}_2 + 0.1639 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.01639 \, \text{Ti}_4 + 0.08197 \, \text{Ti}_4 + 0.0819
1275
                                            654
                                                                                  0.125
                                                                                                                                    -0.849
                                                                                                                                                                              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}_3 \text{ O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMnO}_4
                                             654
1276
                                                                                  0.125
                                                                                                                                    -0.976
                                                                                                                                                                              0.1786 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05357 \text{ MnO} + 0.07143 \text{ MnO}_2 + 0.1071 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1696 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04464 \text{ TiO} + 0.0625 \text{ TiO}_2 + 0.1696 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.03571 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
```

```
Weight
                                                                                                                      \Delta_r H
                                                                                                                                                              Reaction
                                Label
                                                                                                                eV/atom
1277
                                        655
                                                                          0.500
                                                                                                                      -1.496
                                                                                                                                                             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
                                        655
1278
                                                                          0.500
                                                                                                                      -1.450
                                                                                                                                                             0.1321 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2453 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1887 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_2\text{O}_2
                                                                          0.333
1279
                                        656
                                                                                                                      -0.757
                                                                                                                                                             0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{CuO}
1280
                                        656
                                                                          0.333
                                                                                                                      -0.676
                                                                                                                                                             0.1887 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.2075 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.3019 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{O}_2
                                                                          0.333
                                                                                                                       -0.909
1281
                                         656
                                                                                                                                                             0.3333 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{CrO}_2
1282
                                        657
                                                                          0.500
                                                                                                                      -1.396
                                                                                                                                                             CoO + 0.2927 Ti_3O_5 + 0.122 TiO_2 + 0.1463 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
1283
                                        657
                                                                          0.500
                                                                                                                      -1.523
                                                                                                                                                             CoO + 0.28 Ti_3O_5 + 0.04 TiO + 0.12 TiO_2 + 0.16 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
1284
                                        658
                                                                          1.000
                                                                                                                      -1.623
                                                                                                                                                             1.8 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_2 \,\mathrm{O}_3 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.1 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti} \,\mathrm{Mn}_2 \,\mathrm{O}_4
1285
                                       659
                                                                          1.000
                                                                                                                      -0.786
                                                                                                                                                             0.25 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.25 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                          0.500
1286
                                        660
                                                                                                                       -0.843
                                                                                                                                                             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
                                                                          0.500
                                                                                                                                                             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
1287
                                        660
                                                                                                                      -0.876
                                                                          0.250
1288
                                       661
                                                                                                                      -1.242
                                                                                                                                                             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
                                                                          0.250
                                                                                                                      -1.214
                                                                                                                                                             0.1567\,Mn_3O_4 + 0.07511\,MnO_2 + 0.2575\,Ti_2O_3 + 0.1116\,TiO + 0.1459\,TiO_2 + 0.2275\,TiMn_2O_4 + 0.06867\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.1116\,TiO_2 + 0.1116\,TiO_3 + 0.1116\,TiO_4 + 0.1
1289
                                        661
1290
                                       661
                                                                          0.250
                                                                                                                      -1.256
                                                                                                                                                             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}
                                        661
                                                                          0.250
                                                                                                                      -1.226
                                                                                                                                                             0.1756 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2545 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1043 \,\mathrm{TiO} + 0.1501 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2366 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.0916 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1291
1292
                                        662
                                                                          0.500
                                                                                                                      -1.305
                                                                                                                                                             0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.143 \text{ MnO} + 0.2857 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1293
                                        662
                                                                          0.500
                                                                                                                      -1.513
                                                                                                                                                             0.1667 \, Mn_3O_4 + 1.167 \, MnO + 0.3333 \, MnO_2 + 0.1667 \, Ti_2O_3 + 0.1667 \, Ti_3O_5 + 0.1667 \, TiO \longrightarrow TiMn_2O_4
                                                                          1.000
                                                                                                                       -2.592
1294
                                        663
                                                                                                                                                             0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 1.333 \, \text{MnO} + 0.1667 \, \text{MnO}_2 + 0.1667 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.5 \, \text{TiO} + 0.1667 \, \text{TiMnO}_3 + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
1295
                                        664
                                                                          1.000
                                                                                                                      -1.747
                                                                                                                                                             2 \text{ Cu} + 0.5 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Cu}_2\text{O}
1296
                                        665
                                                                          1.000
                                                                                                                      -1.987
                                                                                                                                                             0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.1111 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3333 \text{ TiO} + 0.1111 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1297
                                        666
                                                                          1.000
                                                                                                                      -1.466
                                                                                                                                                             0.2 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.2 \text{ MnO} + 0.2 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2 \text{ TiO} + 0.2 \text{ TiO}_2 + 0.2 \text{ TiMnO}_3 + 0.1 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1298
                                        667
                                                                          0.200
                                                                                                                      -0.963
                                                                                                                                                             0.1432 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2142 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07094 \,\mathrm{MnO} + 0.2729 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.09004 \,\mathrm{TiO} + 0.09141 \,\mathrm{TiO_2} + 0.002729 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3} + 0.002729 \,\mathrm{O_2} + 0.002729 \,\mathrm{O_2} + 0.002729 \,\mathrm{O_3} + 0.002729 \,\mathrm{
1299
                                        667
                                                                          0.200
                                                                                                                       -0.943
                                                                                                                                                             0.1453 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.2137 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.06838 \text{ MnO} + 0.2735 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08547 \text{ TiO} + 0.09402 \text{ TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                        667
                                                                          0.200
                                                                                                                       -0.991
1300
                                                                                                                                                             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}
1301
                                        667
                                                                          0.200
                                                                                                                      -1.057
                                                                                                                                                             0.1333 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.2333 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.03333 \, \text{Mn} \text{O}_2 + 0.2667 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1333 \, \text{TiO} + 0.06667 \, \text{TiO}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1302
                                        667
                                                                          0.200
                                                                                                                      -1.029
                                                                                                                                                             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}
1303
                                        668
                                                                          0.500
                                                                                                                      -1.987
                                                                                                                                                             0.125 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 1.375 \text{ MnO} + 0.125 \text{ MnO}_2 + 0.125 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.375 \text{ TiO} + 0.125 \text{ Ti}_3 \text{O}_2 + 0.125 \text{ TiMnO}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
1304
                                                                          0.500
                                       668
                                                                                                                      -2.262
                                                                                                                                                             0.1429 \text{ Mn}_3 \text{ O}_4 + 1.429 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_3 \text{ O}_5 + 0.4286 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ Ti}_3 \text{ O}_2 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{ O}_4
1305
                                        669
                                                                          1.000
                                                                                                                      -0.689
                                                                                                                                                             0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.4 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                                          1.000
1306
                                       670
                                                                                                                      -0.846
                                                                                                                                                             0.25 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.5 \text{ MnO} + 0.25 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.25 \text{ Ti}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1307
                                        671
                                                                          0.500
                                                                                                                      -1.192
                                                                                                                                                             0.05634 \,\mathrm{MnO} + 0.09859 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2676 \,\mathrm{TiO} + 0.3099 \,\mathrm{TiO_2} + 0.4225 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.08451 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1308
                                        671
                                                                          0.500
                                                                                                                      -1.130
                                                                                                                                                             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
1309
                                        672
                                                                          0.500
                                                                                                                      -1.028
                                                                                                                                                             0.1111\,Mn_{2}O_{3} + 0.1111\,Mn_{3}O_{4} + 0.1111\,MnO + 0.1111\,MnO_{2} + 0.1111\,Ti_{2}O_{3} + 0.2222\,TiO + 0.4444\,TiO_{2} + 0.1111\,TiMn_{2}O_{4} \longrightarrow TiMnO_{3}
1310
                                       672
                                                                          0.500
                                                                                                                      -0.885
                                                                                                                                                             0.1429 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + 0.1429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1429 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{TiO} + 0.4286 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1429 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1311
                                        673
                                                                          0.200
                                                                                                                      -0.760
                                                                                                                                                             0.1923 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.07692 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1154 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1538 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.03846 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2692 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                          0.200
1312
                                        673
                                                                                                                      -0.940
                                                                                                                                                             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 + 0.25 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.009259 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.009259 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1019 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1019 \text{ M
                                       673
                                                                          0.200
                                                                                                                       -0.802
1313
                                                                                                                                                             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
                                                                         0.200
1314
                                        673
                                                                                                                      -0.898
                                                                                                                                                             0.2016 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1129 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1048 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1694 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.04032 \,\mathrm{TiO} + 0.2419 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1315
                                       673
                                                                          0.200
                                                                                                                      -0.866
                                                                                                                                                             0.2 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1 \text{ MnO}_2 + 0.1 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.15 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05 \text{ TiO} + 0.05 \text{ TiO}_2 + 0.25 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                       674
                                                                          0.500
                                                                                                                      -1.419
                                                                                                                                                             0.125\,Mn_2O_3 + 1.5\,MnO + 0.125\,MnO_2 + 0.125\,Ti_2O_3 + 0.125\,Ti_3O_5 + 0.125\,TiO + 0.125\,TiO_2 + 0.125\,TiMnO_3 + 0.0625\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.062
1316
                                        674
                                                                          0.500
                                                                                                                                                             0.1429\,Mn_2O_3 + 1.571\,MnO + 0.1429\,MnO_2 + 0.1429\,Ti_2O_3 + 0.1429\,Ti_3O_5 + 0.1429\,TiO + 0.1429\,TiO_2 + 0.07143\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
1317
                                                                                                                      -1.614
1318
                                        675
                                                                          1.000
                                                                                                                      -1.234
                                                                                                                                                             0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                         676
                                                                                                                                                             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.
1319
                                                                          0.167
                                                                                                                       -0.927
```

```
Weight
                                                                                                      \Delta_r H
                            Label
                                                                                                                                         Reaction
                                                                                                 eV/atom
1320
                                  676
                                                                0.167
                                                                                                      -0.911
                                                                                                                                       0.1436 \text{ MnO} + 0.1649 \text{ MnO}_2 + 0.09574 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1543 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3457 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1543 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3457 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1543 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3457 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1543 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3457 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1543 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3457 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1543 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3457 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1543 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.3457 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04255 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1543 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1543 \text{ Ti}_3
1321
                                  676
                                                                0.167
                                                                                                      -1.002
                                                                                                                                       0.1432 \text{ MnO} + 0.1686 \text{ MnO}_2 + 0.09007 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1478 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03233 \text{ TiO} + 0.3441 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.05081 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                                0.167
1322
                                  676
                                                                                                      -0.724
                                                                                                                                       0.1233 \text{ MnO} + 0.2192 \text{ MnO}_2 + 0.06849 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1507 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08219 \text{ TiO}_2 + 0.3288 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1323
                                  676
                                                                0.167
                                                                                                      -0.803
                                                                                                                                       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{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3
                                  676
                                                                0.167
1324
                                                                                                       -0.838
                                                                                                                                       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}_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 + 0.1415 \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}_3 + 0.05276 \text{ Ti}_3\text{O}_3 + 0.0527
1325
                                  677
                                                                1.000
                                                                                                      -0.659
                                                                                                                                       0.25 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1326
                                  678
                                                                1.000
                                                                                                       -0.967
                                                                                                                                       0.25 \text{ MnO} + 0.25 \text{ MnO}_2 + 0.25 \text{ TiO} + 0.5 \text{ TiO}_2 + 0.25 \text{ TiMn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1327
                                  679
                                                                1.000
                                                                                                       -0.710
                                                                                                                                       0.2727 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.2727 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1818 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1328
                                  680
                                                                1.000
                                                                                                      -0.925
                                                                                                                                       0.75 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.25 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.25 \,\mathrm{Ti}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{MnO}_3
                                                                0.500
1329
                                  681
                                                                                                       -0.982
                                                                                                                                       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
                                                                0.500
1330
                                  681
                                                                                                      -1.161
                                                                                                                                       0.1489 \text{ MnO} + 0.1915 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.06383 \text{ TiO} + 0.1277 \text{ TiO}_2 + 0.4255 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1277 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                                0.500
1331
                                  682
                                                                                                      -1.628
                                                                                                                                       0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.6667 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.4444 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ TiO}_2 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1332
                                  682
                                                                0.500
                                                                                                      -1.660
                                                                                                                                       0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.7143 \text{ MnO} + 0.4286 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1333
                                  683
                                                                1.000
                                                                                                      -0.667
                                                                                                                                       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{Li}_2 \, \text{FeO}_2
1334
                                  684
                                                                0.167
                                                                                                       -0.615
                                                                                                                                       0.2453 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.03774 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2075 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1698 \text{ Ti}_2 + 0.1321 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4
1335
                                  684
                                                                0.167
                                                                                                      -0.588
                                                                                                                                       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}
1336
                                  684
                                                                0.167
                                                                                                      -0.720
                                                                                                                                       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}_2\text{O}_3
1337
                                  684
                                                                0.167
                                                                                                       -0.905
                                                                                                                                       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
1338
                                  684
                                                                0.167
                                                                                                      -0.677
                                                                                                                                       0.1959 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2371 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08247 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2062 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.02062 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1339
                                  684
                                                                0.167
                                                                                                      -0.867
                                                                                                                                       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}
                                                                0.333
1340
                                  685
                                                                                                       -0.771
                                                                                                                                       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
1341
                                  685
                                                                0.333
                                                                                                      -0.785
                                                                                                                                       0.07317 \text{ MnO} + 0.2439 \text{ MnO}_2 + 0.2195 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.02439 \text{ TiO} + 0.1951 \text{ Ti}_2 + 0.3415 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1342
                                  685
                                                                0.333
                                                                                                      -0.737
                                                                                                                                       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
1343
                                  686
                                                                0.500
                                                                                                      -1.234
                                                                                                                                       0.6667 \, \text{Cr}_3 \, \text{O}_4 + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2 \, \text{O}_3
1344
                                  686
                                                                0.500
                                                                                                      -1.027
                                                                                                                                       0.5909 \, \text{Cr}_3\text{O}_4 + 0.2273 \, \text{CrO}_2 + 0.09091 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Cr}_2\text{O}_3
1345
                                  687
                                                                1.000
                                                                                                      -0.845
                                                                                                                                       0.25 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 2.375 \text{ Li}_2\text{O} + 0.25 \text{ Li}_2\text{Fe}\text{O}_2 + 0.0625 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}\text{O}_4
1346
                                  688
                                                                0.333
                                                                                                      -0.687
                                                                                                                                       0.25 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn
1347
                                                                0.333
                                  688
                                                                                                      -0.874
                                                                                                                                       0.3333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{TiO} + 0.5 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                0.333
                                                                                                      -0.645
                                                                                                                                       0.2222 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.1111 \, \text{MnO} + 0.1111 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1111 \, \text{TiO} + 0.5556 \, \text{TiO}_2 + 0.1111 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1348
                                  688
                                                                1.000
1349
                                  689
                                                                                                      -0.172
                                                                                                                                       0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.5 \text{ Fe}_2\text{O}_3 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
1350
                                  690
                                                                1.000
                                                                                                                                       0.4 \,\mathrm{Mn_2O_3} + \mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                                                                      -1.166
1351
                                  691
                                                                1.000
                                                                                                       -0.963
                                                                                                                                       0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{TiO} + 0.3333 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1667 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1352
                                  692
                                                                1.000
                                                                                                      -1.370
                                                                                                                                       0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.286 \text{ MnO} + 0.2857 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1353
                                  693
                                                                0.200
                                                                                                       -0.863
                                                                                                                                       0.191 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1011 \text{ Mn}_2 + 0.2247 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06742 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.2584 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4
1354
                                  693
                                                                0.200
                                                                                                      -0.826
                                                                                                                                       0.1897 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08621 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1983 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07759 \,\mathrm{TiO} + 0.06034 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2672 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                0.200
1355
                                  693
                                                                                                      -0.855
                                                                                                                                       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
                                  693
                                                                0.200
                                                                                                       -0.823
                                                                                                                                       0.1757 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08108 \,\mathrm{MnO} + 0.09459 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2095 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06081 \,\mathrm{TiO} + 0.07432 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2365 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1356
                                                               0.200
1357
                                  693
                                                                                                      -0.883
                                                                                                                                       0.1898 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09595 \text{ MnO}_2 + 0.2217 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07249 \text{ TiO} + 0.2623 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.004264 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1358
                                  694
                                                                1.000
                                                                                                      -1.131
                                                                                                                                       0.6667 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.3333 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
                                  695
1359
                                                                1.000
                                                                                                      -1.513
                                                                                                                                       0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.5 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
1360
                                  696
                                                                1.000
                                                                                                      -3.439
                                                                                                                                       V_2O_3 + O_2 \longrightarrow V_2O_5
1361
                                  697
                                                                0.167
                                                                                                       -0.927
                                                                                                                                       0.1228 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2105 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08772 \,\mathrm{MnO} + 0.03509 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1579 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2105 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05263 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                   697
1362
                                                                0.167
                                                                                                      -1.047
                                                                                                                                       0.1333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.06667 \,\mathrm{MnO} + 0.06667 \,\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}
```

```
Weight
                                                                                                         \Delta_r H
                            Label
                                                                                                                                             Reaction
                                                                                                   eV/atom
1363
                                  697
                                                                  0.167
                                                                                                         -0.974
                                                                                                                                           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
                                   697
1364
                                                                  0.167
                                                                                                         -1.100
                                                                                                                                           0.1429 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2143 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07143 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1429 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2143 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07143 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                                  0.167
1365
                                   697
                                                                                                         -1.084
                                                                                                                                           0.1389 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1944 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05556 \,\mathrm{MnO} + 0.08333 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1389 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2222 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05556 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                  697
                                                                  0.167
                                                                                                         -1.144
                                                                                                                                           0.1345 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1989 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.06439 \text{ Mn}\text{O} + 0.07008 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.142 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2159 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06818 \text{ Ti}\text{O} + 0.01136 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}\text{O}_3
1366
                                   698
                                                                  0.500
                                                                                                         -2.204
1367
                                                                                                                                           0.625 \,\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_3 + 0.625 \,\mathrm{Mn}_2 + 0.125 \,\mathrm{Mn}_2 + 0.125 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.625 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O} \longrightarrow \mathrm{Ti}_3\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4
1368
                                   698
                                                                  0.500
                                                                                                         -2.427
                                                                                                                                           0.6667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6667 \,\mathrm{MnO} + 0.1111 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6667 \,\mathrm{TiO} + 0.05556 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1369
                                   699
                                                                  1.000
                                                                                                         -2.559
                                                                                                                                           0.1429\,Mn_{2}O_{3} + 0.1429\,Mn_{3}O_{4} + MnO + 0.1429\,MnO_{2} + 0.1429\,Ti_{2}O_{3} + 0.5714\,TiO + 0.1429\,TiMnO_{3} + 0.1429\,O_{2} \longrightarrow TiMn_{2}O_{4} + 0.000\,TiMn_{2}O_{4} + 0.0
1370
                                  700
                                                                  1.000
                                                                                                         -1.709
                                                                                                                                           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}
1371
                                   701
                                                                  0.500
                                                                                                         -1.456
                                                                                                                                           0.125 \text{ Mn}_3\text{O4} + 1.5 \text{ MnO} + 0.375 \text{ Ti}_2\text{O3} + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O2} + 0.125 \text{ Ti}_3\text{MnO} + 0.125 \text{ O2} \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O4}
                                                                  0.500
1372
                                    701
                                                                                                         -1.480
                                                                                                                                           0.1 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                   702
                                                                  0.167
1373
                                                                                                         -1.851
                                                                                                                                           0.06667 \operatorname{Mn_2O_3} + 0.6 \operatorname{Mn_3O_4} + 0.06667 \operatorname{MnO_2} + 0.06667 \operatorname{Ti_2O_3} + 0.06667 \operatorname{Ti_3O_5} + 0.6 \operatorname{TiO} + 0.06667 \operatorname{TiO_2} \longrightarrow \operatorname{TiMn_2O_4}
                                   702
1374
                                                                  0.167
                                                                                                         -2.020
                                                                                                                                           0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5556 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.1111 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.6667 \text{ TiO} \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1375
                                    702
                                                                  0.167
                                                                                                         -1.835
                                                                                                                                           0.07143 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.5714 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.07143 \, \text{Mn}_2 + 0.07143 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.6429 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_7 + 0.07143 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_
1376
                                   702
                                                                  0.167
                                                                                                         -1.873
                                                                                                                                           0.09091 \, \text{Mn}_2 \text{O}_3 + 0.5455 \, \text{Mn}_3 \text{O}_4 + 0.09091 \, \text{Mn}_2 + 0.09091 \, \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.6364 \, \text{TiO} + 0.09091 \, \text{TiMn}_2 \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
1377
                                   702
                                                                  0.167
                                                                                                         -1.939
                                                                                                                                           0.08333\,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5833\,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.08333\,\mathrm{MnO_2} + 0.08333\,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6667\,\mathrm{TiO} + 0.08333\,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1378
                                   702
                                                                  0.167
                                                                                                         -1.754
                                                                                                                                           0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6 \,\mathrm{TiO} + 0.1 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1379
                                   703
                                                                  0.500
                                                                                                         -0.618
                                                                                                                                           2.375 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Li}_2\text{O} + 0.125 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 + 0.125 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_8
1380
                                  703
                                                                  0.500
                                                                                                         -0.656
                                                                                                                                           2.429 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1429 \text{ Li}_5\text{Fe}\text{O}_4 \longrightarrow \text{Li}_7\text{Fe}_5\text{O}_8
1381
                                    704
                                                                  0.500
                                                                                                         -1.749
                                                                                                                                           0.1429 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 1.571 \, \text{MnO} + 0.1429 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1429 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1429 \, \text{TiO} + 0.1429 \, \text{TiO}_2 + 0.1429 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
1382
                                   704
                                                                  0.500
                                                                                                         -1.537
                                                                                                                                           0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.5 \text{ MnO} + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.125 \text{ TiO} + 0.125 \text{ TiO}_7 + 0.125 \text{ TiMnO}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1383
                                  705
                                                                  1.000
                                                                                                         -1.378
                                                                                                                                           0.5714 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1429 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.4286 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiO}_2 + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1384
                                   706
                                                                  1.000
                                                                                                         -1.421
                                                                                                                                           0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.4 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1385
                                   707
                                                                  1.000
                                                                                                         -0.488
                                                                                                                                           2.4 \text{Li}_2\text{O} + 0.2 \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_6\text{O}_4
                                   708
                                                                  1.000
                                                                                                         -1.785
                                                                                                                                           0.4286 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5714 \,\mathrm{TiO} + 0.4286 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1386
1387
                                    709
                                                                  0.500
                                                                                                         -1.288
                                                                                                                                           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
1388
                                   709
                                                                  0.500
                                                                                                         -1.308
                                                                                                                                           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}
1389
                                  710
                                                                  1.000
                                                                                                         -1.198
                                                                                                                                           0.2 \,\mathrm{MnO} + 0.4 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.4 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.2 \,\mathrm{TiMn}_2\mathrm{O}_4 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
                                                                  1.000
1390
                                  711
                                                                                                         -1.028
                                                                                                                                           0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_O} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                  712
                                                                                                                                           0.0625\,Mn_2O_3 + 0.0625\,Mn_3O_4 + 1.563\,MnO + 0.0625\,MnO_2 + 0.0625\,Ti_2O_3 + 0.25\,Ti_3O_5 + 0.0625\,TiO_2 + 0.0625\,TiMnO_3 + 0.0625\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
1391
                                                                  0.200
                                                                                                         -1.193
                                  712
                                                                                                         -1.333
1392
                                                                  0.200
                                                                                                                                           0.07143 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07143 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.571 \text{ MnO} + 0.07143 \text{ MnO}_2 + 0.07143 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2857 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1393
                                  712
                                                                  0.200
                                                                                                         -1.288
                                                                                                                                           0.08333 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.08333 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 1.583 \, \text{MnO} + 0.08333 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.25 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.08333 \, \text{Ti}_2 + 0.08333 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
1394
                                  712
                                                                  0.200
                                                                                                         -1.194
                                                                                                                                           0.07692\,Mn_2O_3 + 0.07692\,Mn_3O_4 + 1.538\,MnO + 0.07692\,Ti_2O_3 + 0.2308\,Ti_3O_5 + 0.07692\,TiO_2 + 0.07692\,TiMnO_3 + 0.07692\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.07692\,TiMnO_3 + 0.07692\,TiM
1395
                                   712
                                                                  0.200
                                                                                                         -1.268
                                                                                                                                           0.06667\,Mn_2O_3 + 0.06667\,Mn_3O_4 + 1.6\,MnO + 0.06667\,MnO_2 + 0.06667\,Ti_2O_3 + 0.2667\,Ti_3O_5 + 0.06667\,TiO_2 + 0.06667\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.06667\,MnO_2 + 0
1396
                                 713
                                                                  1.000
                                                                                                         -2.029
                                                                                                                                           0.25 \text{ V}_3\text{O}_5 + 1.25 \text{ VO} + 0.25 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_3
1397
                                  714
                                                                  1.000
                                                                                                         -2.516
                                                                                                                                           0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 1.167 \, \text{Mn}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_2 + 0.1667 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.5 \, \text{Ti}_3 + 0.1667 \, \text{Ti}_4 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_4 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4
1398
                                   715
                                                                  1.000
                                                                                                         -0.598
                                                                                                                                           0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.2 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                                                                                                           0.09091 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ Mn}_2\text{O}_4 + 0.09091 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2727 \text{ Ti}_3\text{O} + 0.09091 \text{ Ti}_3\text{O}_2 + 0.3636 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_3 + 0.09091 \text{ Mn}_2\text{O}_4 + 0.09091 \text{ O}_3 + 0.09091
1399
                                  716
                                                                  1.000
                                                                                                         -1.421
                                  717
                                                                                                                                           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
1400
                                                                  1.000
                                                                                                         -1.426
1401
                                   718
                                                                  0.500
                                                                                                         -1.656
                                                                                                                                           2 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.1667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
                                  718
1402
                                                                  0.500
                                                                                                         -1.798
                                                                                                                                           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
                                  719
                                                                  1.000
                                                                                                         -2.218
                                                                                                                                           0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.286 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.4286 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1403
1404
                                   720
                                                                  1.000
                                                                                                         -2.272
                                                                                                                                           0.1667 \, Mn_2O_3 + 0.5 \, Mn_3O_4 + 0.1667 \, MnO_2 + 0.8333 \, TiO + 0.1667 \, TiO_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
                                   721
1405
                                                                  1.000
                                                                                                         -1.075
                                                                                                                                           0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.8 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
```

```
Weight
                                                                                                    \Delta_r H
                                                                                                                                       Reaction
                           Label
                                                                                               eV/atom
1406
                                 722
                                                               1.000
                                                                                                    -2.478
                                                                                                                                      0.561 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.3171 \text{ VO}_2 + 0.7805 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_5
                                 723
                                                               1.000
                                                                                                                                      0.2222 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2222 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.3889 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1667 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1407
                                                                                                     -0.558
                                 724
                                                               0.500
                                                                                                                                      0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.286 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1408
                                                                                                    -1.505
1409
                                 724
                                                               0.500
                                                                                                    -1.746
                                                                                                                                      0.1667 \, Mn_3O_4 + 1.333 \, MnO + 0.1667 \, MnO_2 + 0.1667 \, Ti_2O_3 + 0.1667 \, Ti_3O_5 + 0.1667 \, TiO + 0.08333 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
                                 725
                                                               1.000
1410
                                                                                                    -1.320
                                                                                                                                      0.25 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1411
                                 726
                                                               0.500
                                                                                                    -0.865
                                                                                                                                      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
1412
                                 726
                                                               0.500
                                                                                                    -0.774
                                                                                                                                      0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.2857 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2143 \text{ TiO}_2 + 0.2143 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1413
                                 727
                                                               1.000
                                                                                                    -1.515
                                                                                                                                      0.09091\,Mn_2O_3 + 0.09091\,Mn_3O_4 + 0.4545\,MnO + 0.09091\,MnO_2 + 0.4545\,Ti_2O_3 + 0.09091\,TiO_2 + 0.09091\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1414
                                 728
                                                               0.250
                                                                                                    -0.289
                                                                                                                                      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
                                                               0.250
1415
                                  728
                                                                                                     -0.402
                                                                                                                                      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
                                                               0.250
1416
                                 728
                                                                                                    -0.204
                                                                                                                                      0.2 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.2 \text{ V}_3\text{O}_5 \longrightarrow \text{VO}_2
                                 728
                                                               0.250
                                                                                                    -0.234
                                                                                                                                      0.2105 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.1842 \text{ V}_3\text{O}_5 + 0.02632 \text{ VO} \longrightarrow \text{VO}_2
1417
                                 729
                                                               1.000
                                                                                                     -2.257
1418
                                                                                                                                      0.2 \text{ V}_2\text{O}_5 + 1.6 \text{ VO} + 0.2 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_3
1419
                                 730
                                                               1.000
                                                                                                    -2.173
                                                                                                                                      0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.6667 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                 731
                                                               1.000
                                                                                                    -2.485
1420
                                                                                                                                      0.1667 \, Mn_2O_3 + 0.1667 \, Mn_3O_4 + 1.167 \, MnO + 0.1667 \, Ti_3O_5 + 0.5 \, TiO + 0.1667 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
1421
                                  732
                                                               0.500
                                                                                                    -1.342
                                                                                                                                      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}
1422
                                 732
                                                               0.500
                                                                                                    -1.511
                                                                                                                                      0.4545 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.09091 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1818 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1364 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2273 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                 733
                                                               1.000
1423
                                                                                                    -1.120
                                                                                                                                      0.4 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.2 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1424
                                 734
                                                               1.000
                                                                                                    -0.924
                                                                                                                                      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}
1425
                                 735
                                                               1.000
                                                                                                    -1.550
                                                                                                                                      0.1667 \text{ MnO} + 0.5 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ TiO} + 0.1667 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1426
                                 736
                                                               0.083
                                                                                                     -0.913
                                                                                                                                      0.09452\,Mn_2O_3 + 0.1366\,Mn_3O_4 + 0.0421\,MnO + 0.05242\,MnO_2 + 0.1279\,Ti_2O_3 + 0.197\,Ti_3O_5 + 0.1533\,TiMn_2O_4 + 0.02065\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1427
                                  736
                                                               0.083
                                                                                                    -0.905
                                                                                                                                      0.1132\,Mn_2O_3 + 0.1321\,Mn_3O_4 + 0.01887\,MnO + 0.09434\,MnO_2 + 0.1132\,Ti_2O_3 + 0.2075\,Ti_3O_5 + 0.01887\,TiO + 0.1321\,TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3
1428
                                 736
                                                               0.083
                                                                                                    -0.877
                                                                                                                                      0.09845 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1442 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05268 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.1278 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1952 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1589 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.01382 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.01382 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2 \longrightarrow \text{T
1429
                                 736
                                                               0.083
                                                                                                    -1.071
                                                                                                                                      0.1063 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1471 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04077 \,\mathrm{MnO} + 0.1175 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1886 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.04636 \,\mathrm{TiO} + 0.1527 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.04956 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1430
                                 736
                                                               0.083
                                                                                                    -1.057
                                                                                                                                      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_3 + 0.09709\,Mn_2O_3 
1431
                                 736
                                                               0.083
                                                                                                    -1.027
                                                                                                                                      0.1009 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1446 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05723 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.119 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1852 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05271 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.1536 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02711 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1852 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05271 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1536 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.02711 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1446 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.02711 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1446 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.02711 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1852 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05271 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05
1432
                                 736
                                                               0.083
                                                                                                    -0.863
                                                                                                                                      0.109 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1327 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.0237 \,\mathrm{MnO} + 0.08531 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1185 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2085 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1374 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                 736
                                                               0.083
1433
                                                                                                    -0.938
                                                                                                                                      0.1033 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1458 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04244 \,\mathrm{MnO} + 0.1255 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1974 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1568 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.0369 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1434
                                 736
                                                               0.083
                                                                                                     -0.902
                                                                                                                                      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{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.03009 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                               0.083
1435
                                 736
                                                                                                     -0.850
                                                                                                                                      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
1436
                                 736
                                                               0.083
                                                                                                     -0.904
                                                                                                                                      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}
1437
                                 736
                                                               0.083
                                                                                                    -1.040
                                                                                                                                      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}
1438
                                  737
                                                               0.250
                                                                                                    -1.053
                                                                                                                                      0.2931 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1207 \text{ Mn}_{\text{O}_2} + 0.1379 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2241 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.05172 \text{ Ti}_2\text{O} \longrightarrow \text{TiMn}_{\text{O}_3}
1439
                                 737
                                                               0.250
                                                                                                    -0.945
                                                                                                                                      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}
1440
                                 737
                                                               0.250
                                                                                                    -1.119
                                                                                                                                      0.2988 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1036 \text{ Mn}_{\text{O}_2} + 0.142 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.216 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06805 \text{ Ti}_{\text{O}} + 0.01183 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_{\text{Mn}}\text{O}_3
                                  737
                                                               0.250
1441
                                                                                                    -1.020
                                                                                                                                      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}
1442
                                 738
                                                               1.000
                                                                                                    -2.555
                                                                                                                                      0.2 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.4 \text{ MnO} + 0.6 \text{ TiO} + 0.2 \text{ TiO}_2 + 0.2 \text{ TiMnO}_3 + 0.2 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                                               1.000
1443
                                 739
                                                                                                    -1.030
                                                                                                                                      0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1444
                                  740
                                                               0.143
                                                                                                    -0.688
                                                                                                                                      0.03846 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.03846 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.03846 \text{ Mn}_2 + 0.1923 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03846 \text{ Ti}_2 + 0.3846 \text{ Ti}_2 + 0.3846 \text{ Ti}_3 + 0.03846 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3 + 0.03846 \text{ Mn}_3 +
1445
                                 740
                                                               0.143
                                                                                                     -0.687
                                                                                                                                      0.04545 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04545 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1818 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.04545 \,\mathrm{TiO_2} + 0.4091 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.04545 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                 740
                                                               0.143
                                                                                                    -0.766
                                                                                                                                      0.05 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.05 \text{ MnO} + 0.05 \text{ MnO}_2 + 0.2 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.4 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.05 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
1446
1447
                                  740
                                                               0.143
                                                                                                     -0.696
                                                                                                                                      0.04762 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.04762 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1905 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.04762 \,\mathrm{TiO_2} + 0.381 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.04762 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1448
                                  740
                                                               0.143
                                                                                                     -0.735
                                                                                                                                      0.04167 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.04167 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04167 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2083 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.375 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.04167 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
```

```
Weight
                                                                                                   \Delta_r H
                          Label
                                                                                                                                    Reaction
                                                                                              eV/atom
1449
                                 740
                                                              0.143
                                                                                                   -0.708
                                                                                                                                   0.04545 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.04545 \text{ MnO} + 0.04545 \text{ MnO}_2 + 0.1818 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04545 \text{ Ti}_2 + 0.4091 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04545 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{MnO}_3
1450
                                 740
                                                              0.143
                                                                                                   -0.718
                                                                                                                                    0.04 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.04 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04 \text{ Mn}\text{O} + 0.04 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.2 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.04 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.36 \text{ Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.04 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}\text{O}_3
                                                              1.000
1451
                                 741
                                                                                                   -2.464
                                                                                                                                   0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.2 \,\mathrm{MnO} + 0.6 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.2 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1452
                                 742
                                                              1.000
                                                                                                   -2.525
                                                                                                                                   CoO + 0.4286 Ti_2O_3 + 0.1429 TiO + 0.2857 O_2 \longrightarrow TiCoO_3
                                 743
                                                              1.000
                                                                                                   -1.569
                                                                                                                                   0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.429 \text{ Mn}\text{O}_4 + 0.1429 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}\text{O}_4 + 0.1429 \text{ Ti}\text{Mn}\text{O}_3 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4
1453
1454
                                 744
                                                              1.000
                                                                                                   -0.949
                                                                                                                                   0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.429 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.2857 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1455
                                 745
                                                              0.500
                                                                                                   -1.254
                                                                                                                                   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
1456
                                 745
                                                              0.500
                                                                                                   -1.076
                                                                                                                                   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
1457
                                 746
                                                              1.000
                                                                                                   -1.333
                                                                                                                                   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}
                                                              1.000
1458
                                 747
                                                                                                   -0.669
                                                                                                                                   0.125 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.125 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.125 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.375 \,\mathrm{TiO_2} + 0.125 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                 748
                                                              1.000
                                                                                                   -1.019
1459
                                                                                                                                   0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                749
                                                              0.500
1460
                                                                                                   -0.813
                                                                                                                                   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}
                                 749
                                                              0.500
                                                                                                   -0.844
1461
                                                                                                                                   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
1462
                                 750
                                                              0.250
                                                                                                   -1.541
                                                                                                                                   0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.333 \text{ MnO} + 0.4444 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ TiMnO}_3 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                 750
                                                              0.250
                                                                                                   -1.726
                                                                                                                                   0.125 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.125 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.375 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.125 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1463
1464
                                 750
                                                              0.250
                                                                                                   -1.547
                                                                                                                                   0.09091 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.364 \text{ MnO} + 0.09091 \text{ MnO}_2 + 0.4545 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ TiMnO}_3 + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1465
                                 750
                                                              0.250
                                                                                                   -1.695
                                                                                                                                   0.1 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.4 \,\mathrm{MnO} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                              0.250
1466
                                751
                                                                                                   -1.397
                                                                                                                                   0.1597 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2269 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1541 \,\mathrm{TiO} + 0.1793 \,\mathrm{TiO_2} + 0.05042 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1467
                                 751
                                                              0.250
                                                                                                   -1.417
                                                                                                                                   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 + 0.3333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1569 \text{ TiO} + 0.1765 \text{ TiO}_2 + 0.03922 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1468
                                 751
                                                              0.250
                                                                                                   -1.437
                                                                                                                                   0.1515 \text{ Mn}_2 \text{O}_3 + 0.2121 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 0.06061 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.1515 \text{ TiO} + 0.1818 \text{ TiO}_2 + 0.06061 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1469
                                751
                                                              0.250
                                                                                                   -1.378
                                                                                                                                   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
1470
                                752
                                                              1.000
                                                                                                   -1.891
                                                                                                                                   0.5714 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.7143 \,\mathrm{TiO} + 0.1429 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1429 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1471
                                 753
                                                              1.000
                                                                                                   -1.630
                                                                                                                                   0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.6 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                 754
                                                              1.000
                                                                                                   -1.945
                                                                                                                                   0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.667 \,\mathrm{MnO} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1472
1473
                                 755
                                                              0.200
                                                                                                   -0.919
                                                                                                                                   0.07778\,Mn_2O_3 + 0.1074\,Mn_3O_4 + 0.02963\,MnO + 0.04815\,MnO_2 + 0.3074\,Ti_2O_3 + 0.163\,TiO_2 + 0.2222\,TiMn_2O_4 + 0.03704\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1474
                                 755
                                                              0.200
                                                                                                   -0.895
                                                                                                                                   0.08065 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1129 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.04839 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.3065 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1613 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.2258 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 + 0.03226 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1613 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1613 \text{ Ti}_2\text{O}_4 + 0.03226 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_3 + 0.1613 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1613 \text{ Ti}_2\text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1613 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1613 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0
1475
                                 755
                                                              0.200
                                                                                                   -0.914
                                                                                                                                   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}
                                755
                                                              0.200
                                                                                                   -0.939
1476
                                                                                                                                   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} \, \text{O}_2 + 0.2253 \, \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4 + 0.0515 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn} \, \text{O}_3 + 0.1652 \, \text{Ti} \, \text{O}_4 + 0.0515 \, \text{O}_4 + 0.0
1477
                                 755
                                                              0.200
                                                                                                   -0.801
                                                                                                                                   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}
                                                              0.500
1478
                                 756
                                                                                                   -1.013
                                                                                                                                   0.1667 \, Mn_3O_4 + 1.333 \, MnO + 0.1667 \, MnO_2 + 0.1667 \, Ti_2O_3 + 0.1667 \, Ti_3O_5 + 0.1667 \, TiO_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
1479
                                756
                                                              0.500
                                                                                                   -0.877
                                                                                                                                   0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.286 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_7 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{
1480
                                 757
                                                              1.000
                                                                                                   -1.196
                                                                                                                                   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}
1481
                                 758
                                                              0.200
                                                                                                   -0.945
                                                                                                                                   0.2076\,Mn_2O_3 + 0.09357\,MnO + 0.09649\,Ti_2O_3 + 0.155\,Ti_3O_5 + 0.03801\,TiO + 0.05848\,TiO_2 + 0.2456\,TiMn_2O_4 + 0.04094\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3 + 0.02076\,Mn_2O_4 + 0.02076\,Mn
1482
                                758
                                                              0.200
                                                                                                   -0.836
                                                                                                                                   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}
1483
                                 758
                                                              0.200
                                                                                                   -1.031
                                                                                                                                   0.2078 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.09091 \text{ MnO} + 0.1039 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1688 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.03896 \text{ TiO} + 0.2468 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.05195 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                              0.200
1484
                                 758
                                                                                                   -0.700
                                                                                                                                   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
1485
                                758
                                                              0.200
                                                                                                   -0.920
                                                                                                                                   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
                                                              1.000
1486
                                 759
                                                                                                   -3.363
                                                                                                                                   0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{MnO} + 0.8 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.3 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1487
                                 760
                                                              0.500
                                                                                                   -2.712
                                                                                                                                   0.6 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.9 \,\mathrm{TiO} + 0.1 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1488
                                 760
                                                              0.500
                                                                                                   -2.674
                                                                                                                                   0.625 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.875 \,\mathrm{TiO} + 0.125 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.125 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                 761
                                                              1.000
                                                                                                   -0.287
                                                                                                                                   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}_4
1489
1490
                                 762
                                                              0.500
                                                                                                   -0.575
                                                                                                                                   0.6667 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.2222 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ FeO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{FeO}_4
1491
                                 762
                                                              0.500
                                                                                                   -0.620
                                                                                                                                   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
```

	Label	Weight	$\Delta_r H$	Reaction
			eV/atom	
1492	763	0.333	-1.427	$0.5652 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.2609 \mathrm{MnO} + 0.04348 \mathrm{MnO_2} + 0.3333 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.2754 \mathrm{TiO} + 0.05797 \mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1493	763	0.333	-1.333	$0.5833 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.25 \mathrm{MnO} + 0.3333 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.25 \mathrm{TiO} + 0.08333 \mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1494	763	0.333	-1.489	$0.561 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.2439 \mathrm{MnO} + 0.07317 \mathrm{MnO_2} + 0.3659 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.2683 \mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1495	764	1.000	-3.272	$0.2 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.8 \mathrm{TiO} + 0.2 \mathrm{TiMn_2O_4} + 0.3 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
1496	765	1.000	-1.563	$0.8 \mathrm{MnO} + 0.2 \mathrm{MnO}_2 + 0.2 \mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.2 \mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.1 \mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}\mathrm{MnO}_3$
1497	766	1.000	-1.239	$0.4 \mathrm{Mn_2O_3} + 1.2 \mathrm{MnO} + 0.2 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.2 \mathrm{TiO} + 0.2 \mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1498	767	1.000	-3.083	$0.2 \mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \mathrm{MnO_2} + 0.8 \mathrm{TiO} + 0.2 \mathrm{TiMn_2O_4} + 0.2 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
1499	768	1.000	-1.530	$0.1395\mathrm{Mn_2O_3} + 0.4651\mathrm{Mn_3O_4} + 0.3256\mathrm{MnO} + 0.1977\mathrm{Ti_3O_5} + 0.407\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1500	769	1.000	-1.210	$0.4286Mn_2O_3 + MnO + 0.1429Ti_2O_3 + 0.1429Ti_3O_5 + 0.1429TiO + 0.1429TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1501	770	0.500	-1.838	$1.875MnO + 0.125Ti_2O_3 + 0.125Ti_3O_5 + 0.125TiO + 0.125TiO_2 + 0.125TiMnO_3 + 0.1875O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1502	770	0.500	-2.048	$1.857MnO + 0.1429Ti_2O_3 + 0.1429Ti_3O_5 + 0.1429TiO + 0.1429TiMnO_3 + 0.2143O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1503	771	1.000	-1.079	$1.8 \mathrm{MnO} + 0.2 \mathrm{Ti}_3 \mathrm{O}_5 + 0.2 \mathrm{TiO}_2 + 0.2 \mathrm{TiMnO}_3 + 0.1 \mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2 \mathrm{O}_4$
1504	772	1.000	-0.967	$0.1667Mn_2O_3 + 0.1667Mn_3O_4 + MnO + 0.1667Ti_3O_5 + 0.1667TiO + 0.1667TiO_2 + 0.1667TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1505	773	1.000	-2.593	$0.1667Mn_2O_3 + 0.5MnO + 0.1667MnO_2 + 0.1667Ti_3O_5 + 0.5TiO + 0.1667O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
1506	774	0.250	-1.210	$0.3028Mn_3O_4 + 0.09148MnO + 0.1388Ti_2O_3 + 0.2224Ti_3O_5 + 0.05521TiO + 0.05678O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
1507	774	0.250	-1.053	$0.302Mn_3O_4 + 0.09392MnO + 0.1492Ti_2O_3 + 0.2339Ti_3O_5 + 0.04052O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
1508	774	0.250	-0.944	$0.3013Mn_3O_4 + 0.09603MnO + 0.1391Ti_2O_3 + 0.2152Ti_3O_5 + 0.07616TiO_2 + 0.02649O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
1509	774	0.250	-1.099	$0.3021Mn_3O_4 + 0.09362MnO + 0.1291Ti_2O_3 + 0.2043Ti_3O_5 + 0.0539TiO + 0.07518TiO_2 + 0.04255O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
1510	775	0.500	-1.501	$1.889 \mathrm{MnO} + 0.1111 \mathrm{MnO_2} + 0.3333 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.1111 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1511	775	0.500	-1.388	$1.9 \mathrm{MnO} + 0.1 \mathrm{MnO_2} + 0.3 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \mathrm{TiO_2} + 0.1 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1512	776	1.000	-1.959	$1.8 \mathrm{MnO} + 0.2 \mathrm{Ti}_3 \mathrm{O}_5 + 0.2 \mathrm{TiO} + 0.2 \mathrm{TiMnO}_3 + 0.2 \mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2 \mathrm{O}_4$
1513	777	1.000	-1.232	$0.2 \mathrm{Mn_2O_3} + 1.4 \mathrm{MnO} + 0.2 \mathrm{MnO_2} + 0.2 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1514	778	0.333	-1.602	$0.6667 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.08333 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.08333 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.5 \mathrm{TiO} + 0.08333 \mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1515	778	0.333	-1.505	$0.6364Mn_3O_4 + 0.09091Ti_2O_3 + 0.09091Ti_3O_5 + 0.4545TiO + 0.09091TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1516	778	0.333	-1.546	$0.6429Mn_3O_4 + 0.07143Ti_2O_3 + 0.07143Ti_3O_5 + 0.5TiO + 0.07143TiO_2 + 0.07143TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1517	779	0.500	-1.594	$0.2959 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1122 \mathrm{MnO_2} + 0.4898 \mathrm{TiO} + 0.5102 \mathrm{TiO_2} + 0.04082 \mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$
1518	779	0.500	-1.647	$0.2703Mn_3O_4 + 0.08108MnO + 0.1081MnO_2 + 0.4865TiO + 0.5135TiO_2 + 0.05405O_2 \longrightarrow TiMnO_3$
1519	780	1.000	-1.181	$1.667 \mathrm{MnO} + 0.3333 \mathrm{MnO_2} + 0.1667 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \mathrm{Ti_3O_5} + 0.1667 \mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1520	781	0.500	-1.849	$1.714MnO + 0.1429MnO_2 + 0.1429Ti_2O_3 + 0.1429Ti_3O_5 + 0.1429TiO + 0.1429TiMnO_3 + 0.1429O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1521	781	0.500	-1.664	$1.75MnO + 0.125MnO_2 + 0.125Ti_2O_3 + 0.125Ti_3O_5 + 0.125TiO + 0.125TiO_2 + 0.125TiMnO_3 + 0.125O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1522	782	1.000	-0.936	$0.2\mathrm{V}_2\mathrm{O}_5 + 0.2\mathrm{V}_3\mathrm{O}_5 + \mathrm{VO} \longrightarrow \mathrm{V}_2\mathrm{O}_3$
1523	783	0.500	-2.045	$0.6\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2\mathrm{MnO_2} + 0.2\mathrm{Ti_2O_3} + 0.6\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1524	783	0.500	-1.806	$0.5714 \mathrm{Mn_3O_4} + 0.1429 \mathrm{MnO_2} + 0.1429 \mathrm{Ti_2O_3} + 0.5714 \mathrm{TiO} + 0.1429 \mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}$
1525	784	1.000	-1.293	$0.1667Mn_3O_4 + 1.333MnO + 0.1667Ti_3O_5 + 0.1667TiO + 0.1667TiO_2 + 0.1667TiMnO_3 + 0.08333O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1526	785	1.000	-2.130	$0.1429Mn_2O_3 + 0.1429Mn_3O_4 + 1.143MnO + 0.1429Ti_2O_3 + 0.4286TiO + 0.1429TiO_2 + 0.1429TiMnO_3 + 0.1429O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1527	786	0.143	-0.677	$0.08287Mn_2O_3 + 0.1326Mn_3O_4 + 0.04972MnO + 0.03315MnO_2 + 0.2486Ti_3O_5 + 0.07735TiO_2 + 0.1768TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3$
1528	786	0.143	-0.718	$0.1216Mn_2O_3 + 0.1486Mn_3O_4 + 0.2365Ti_3O_5 + 0.03378TiO + 0.1014TiO_2 + 0.1554TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3$
1529	786	0.143	-0.712	$0.1222Mn_2O_3 + 0.1444Mn_3O_4 + 0.02222MnO + 0.2389Ti_3O_5 + 0.02778TiO + 0.1056TiO_2 + 0.15TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3$
1530	786	0.143	-0.645	$0.09836Mn_2O_3 + 0.1475Mn_3O_4 + 0.2459Ti_3O_5 + 0.08197TiO_2 + 0.1803TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3$
1531	786	0.143	-0.681	$0.09408Mn_{2}O_{3} + 0.1394Mn_{3}O_{4} + 0.0453MnO + 0.2474Ti_{3}O_{5} + 0.08362TiO_{2} + 0.1742TiMn_{2}O_{4} + 0.006969O_{2} \longrightarrow TiMnO_{3}O_{5} + 0.08362TiO_{2} + 0.08362TiO_{2} + 0.08362TiO_{3} + 0.08362TiO_{4} + 0.006969O_{5} \longrightarrow TiMnO_{3}O_{5} + 0.08362TiO_{5} + 0.08$
1532	786	0.143	-0.655	$0.08219Mn_2O_3 + 0.1438Mn_3O_4 + 0.02055MnO_2 + 0.2466Ti_3O_5 + 0.06849TiO_2 + 0.1918TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3$
1533	786	0.143	-0.656	$0.1059Mn_2O_3 + 0.1412Mn_3O_4 + 0.03529MnO + 0.2471Ti_3O_5 + 0.09412TiO_2 + 0.1647TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3$
1534	787	0.091	-2.130	$0.05556Mn_2O_3 + 0.6111Mn_3O_4 + 0.05556Ti_2O_3 + 0.05556Ti_3O_5 + 0.6667TiO + 0.05556TiMnO_3 + 0.05556O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4$

```
Weight
                                                                                                                                         \Delta_r H
                                     Label
                                                                                                                                                                                        Reaction
                                                                                                                                  eV/atom
1535
                                              787
                                                                                      0.091
                                                                                                                                         -2.172
                                                                                                                                                                                       0.6316 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05263 \,\mathrm{MnO_2} + 0.05263 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.05263 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6842 \,\mathrm{TiO} + 0.05263 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.05263 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                              787
                                                                                                                                          -2.204
1536
                                                                                      0.091
                                                                                                                                                                                       0.05 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.6 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.05 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.05 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.7 \text{ Ti}_2\text{O} + 0.05 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2 + 0.05 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
                                                                                      0.091
                                                                                                                                         -2.226
1537
                                               787
                                                                                                                                                                                       0.04762 \text{ Mn}_2 \text{O}_3 + 0.619 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 0.04762 \text{ Mn}_2 + 0.04762 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.04762 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.7143 \text{ Ti}_2 + 0.04762 \text{ Ti}_2 + 0.04762 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
1538
                                              787
                                                                                      0.091
                                                                                                                                         -2.159
                                                                                                                                                                                       0.05263\,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6316\,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05263\,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.05263\,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.6842\,\mathrm{TiO} + 0.05263\,\mathrm{TiO_2} + 0.05263\,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                              787
                                                                                      0.091
                                                                                                                                          -2.314
1539
                                                                                                                                                                                       0.05556 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.6111 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05556 \,\mathrm{MnO_2} + 0.05556 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.05556 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.7222 \,\mathrm{TiO} + 0.05556 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1540
                                              787
                                                                                      0.091
                                                                                                                                         -2.068
                                                                                                                                                                                       0.04762 \text{ Mn}_2 \text{O}_3 + 0.619 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 0.04762 \text{ Ti}_2 \text{O}_3 + 0.04762 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.6667 \text{ Ti}_2 \text{O} + 0.04762 \text{ Ti}_2 \text{O}_2 + 0.04762 \text{ Ti}_3 \text{O}_3 + 0.04762 \text{ Ti}_3 \text{O}_4 + 0.04762 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.6667 \text{ Ti}_2 \text{O}_4 + 0.04762 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.04762 \text{ Ti}_3 \text{O}_
1541
                                               787
                                                                                      0.091
                                                                                                                                         -2.245
                                                                                                                                                                                       0.0625 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.625 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.0625 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.0625 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.6875 \text{ TiO} + 0.0625 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1542
                                              787
                                                                                      0.091
                                                                                                                                         -2.107
                                                                                                                                                                                       0.6364 \, Mn_3O_4 + 0.04545 \, MnO_2 + 0.04545 \, Ti_2O_3 + 0.04545 \, Ti_3O_5 + 0.6818 \, TiO + 0.04545 \, TiO_2 + 0.04545 \, TiMnO_3 + 0.04545 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.04545 \, TiMnO_3 + 0.04545 \, TiMnO_3 + 0.04545 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.04545 \, TiMnO_3 + 0.04545 \, O_3 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.0454
1543
                                              787
                                                                                      0.091
                                                                                                                                         -2.137
                                                                                                                                                                                       0.04348\,Mn_2O_3 + 0.6087\,Mn_3O_4 + 0.04348\,MnO_2 + 0.04348\,Ti_2O_3 + 0.04348\,Ti_3O_5 + 0.6957\,TiO + 0.04348\,TiO_2 + 0.04348\,TiMnO_3 + 0.04348\,O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.04348\,TiMnO_3 + 0.04348\,O_3 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.04348\,TiMnO_3 + 0.04348\,O_3 \longrightarrow TiMn_2O_4 + 0.
                                                                                      0.091
                                                                                                                                          -2.285
1544
                                               787
                                                                                                                                                                                       0.6471 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.05882 \text{ MnO}_2 + 0.05882 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.05882 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.7059 \text{ TiO} + 0.05882 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                              788
                                                                                      1.000
1545
                                                                                                                                         -1.135
                                                                                                                                                                                       0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 1.333 \, \text{MnO} + 0.1667 \, \text{MnO}_2 + 0.1667 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1667 \, \text{TiO} + 0.1667 \, \text{TiO}_2 + 0.1667 \, \text{TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
                                                                                      1.000
                                                                                                                                         -1.027
1546
                                              789
                                                                                                                                                                                       0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 1.333 \, \text{MnO} + 0.1667 \, \text{MnO}_2 + 0.3333 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{TiO}_2 + 0.1667 \, \text{TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
1547
                                               790
                                                                                      0.125
                                                                                                                                         -0.172
                                                                                                                                                                                       0.04706 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.1706 \, \text{Li}_5 \, \text{Fe}_{04} + 0.1471 \, \text{Li}_{15} \, \text{Fe}_{5} \, \text{O}_{8} \longrightarrow \text{Li}_{15} \, \text{Fe}_{02}
1548
                                              790
                                                                                      0.125
                                                                                                                                         -0.170
                                                                                                                                                                                       0.04706 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1471 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.1706 \text{ Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_2
1549
                                             790
                                                                                      0.125
                                                                                                                                          -0.219
                                                                                                                                                                                       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} \, \text{Fe}_5 \, \text{O}_8 + 0.005682 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li} \, \text{FeO}_2 \, \text{Li}_5 \, \text{Col}_5 \, \text{Col}_5
1550
                                              790
                                                                                      0.125
                                                                                                                                         -0.212
                                                                                                                                                                                       0.02658 \text{ FeO} + 0.04784 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1478 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.1651 \text{ Li}_5\text{Fe}_0 + 0.006645 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_2
1551
                                              790
                                                                                      0.125
                                                                                                                                         -0.183
                                                                                                                                                                                       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}_5\text{O}_8 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}\text{O}_2
1552
                                              790
                                                                                      0.125
                                                                                                                                          -0.160
                                                                                                                                                                                       0.1667 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.1667 \text{ Li}_{65}\text{O}_8 \longrightarrow \text{Li}_{60}
1553
                                              790
                                                                                      0.125
                                                                                                                                         -0.200
                                                                                                                                                                                       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
1554
                                              790
                                                                                      0.125
                                                                                                                                         -0.206
                                                                                                                                                                                       0.04542 \, \text{Fe}_2 \, \text{O}_3 + 0.02138 \, \text{FeO} + 0.1713 \, \text{Li}_5 \, \text{FeO}_4 + 0.1433 \, \text{Li}_{6} \, \text{Fe}_{6} \, \text{Pe}_{7} + 0.005344 \, \text{O}_{7} \longrightarrow \text{Li}_{6} \, \text{FeO}_{7}
                                                                                      1.000
1555
                                             791
                                                                                                                                         -1.060
                                                                                                                                                                                       0.1667 \, Mn_3O_4 + 1.167 \, MnO + 0.1667 \, MnO_2 + 0.1667 \, Ti_3O_5 + 0.1667 \, TiO + 0.1667 \, TiO_2 + 0.1667 \, TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4
1556
                                              792
                                                                                      1.000
                                                                                                                                         -1.682
                                                                                                                                                                                       0.8 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_2 + 0.1 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{MnO}_3
1557
                                              793
                                                                                      0.167
                                                                                                                                         -0.988
                                                                                                                                                                                       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
                                              793
                                                                                      0.167
                                                                                                                                          -0.959
                                                                                                                                                                                       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 + 0.0327 \, \text{M}_{2} + 0.0327 \, \text{M}_{
1558
                                                                                                                                                                                       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}
1559
                                              793
                                                                                      0.167
                                                                                                                                         -0.866
1560
                                              793
                                                                                      0.167
                                                                                                                                         -1.001
                                                                                                                                                                                       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}
1561
                                              793
                                                                                      0.167
                                                                                                                                         -0.972
                                                                                                                                                                                       0.1039 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.147 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2509 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07168 \,\mathrm{TiO} + 0.1756 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.03584 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                              793
1562
                                                                                      0.167
                                                                                                                                         -0.867
                                                                                                                                                                                       0.1048 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1266 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.02183 \, \text{MnO} + 0.08297 \, \text{MnO}_2 + 0.2664 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.04803 \, \text{TiO} + 0.1528 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3 \, \text{TiMnO}_3 + 0.04803 \, \text{TiO}_4 + 0.02183 \, \text{MnO}_4 + 0.02183 \, \text{MnO}_4
                                              794
                                                                                      1.000
                                                                                                                                         -1.737
1563
                                                                                                                                                                                       0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.8 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.4 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                                                      1.000
1564
                                              795
                                                                                                                                         -1.433
                                                                                                                                                                                       0.25 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.25 \,\mathrm{MnO} + 0.25 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                             796
                                                                                      1.000
                                                                                                                                         -2.164
1565
                                                                                                                                                                                       0.6 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.8 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1566
                                              797
                                                                                      0.167
                                                                                                                                         -1.204
                                                                                                                                                                                       0.05 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.3 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.05 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05 \,\mathrm{TiO_2} + 0.05 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1567
                                               797
                                                                                      0.167
                                                                                                                                         -1.214
                                                                                                                                                                                       0.04167\,Mn_2O_3 + 0.2917\,Mn_3O_4 + 0.04167\,MnO_2 + 0.4167\,Ti_2O_3 + 0.04167\,Ti_3O_5 + 0.04167\,TiO_2 + 0.04167\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1568
                                             797
                                                                                      0.167
                                                                                                                                         -1.280
                                                                                                                                                                                       0.05882 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2941 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.4118 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.05882 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05882 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1569
                                              797
                                                                                      0.167
                                                                                                                                         -1.276
                                                                                                                                                                                       0.04762 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2857 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.04762 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4286 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.04762 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.04762 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1570
                                              797
                                                                                      0.167
                                                                                                                                         -1.281
                                                                                                                                                                                       0.3158 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.05263 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4211 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.05263 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.05263 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                              797
                                                                                      0.167
                                                                                                                                         -1.212
                                                                                                                                                                                       0.3182 \text{ Mn}_3 \text{O}_4 + 0.04545 \text{ Mn}_{2} + 0.4091 \text{ Ti}_{2} \text{O}_3 + 0.04545 \text{ Ti}_{3} \text{O}_5 + 0.04545 \text{ Ti}_{2} + 0.04545 \text{ O}_{2} \longrightarrow \text{TiMn}_{2} \text{O}_{3}
1571
                                                                                     0.250
1572
                                              798
                                                                                                                                         -1.228
                                                                                                                                                                                       0.08333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08333 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.5833 \,\mathrm{MnO} + 0.08333 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.08333 \,\mathrm{TiO_2} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1573
                                              798
                                                                                      0.250
                                                                                                                                         -1.273
                                                                                                                                                                                       0.07143 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.07143 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.5714 \text{ MnO} + 0.07143 \text{ MnO}_2 + 0.07143 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2857 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                             798
                                                                                      0.250
1574
                                                                                                                                         -1.209
                                                                                                                                                                                       0.06667 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.06667 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.6 \text{ Mn}\text{O} + 0.06667 \text{ Mn}\text{O}_2 + 0.06667 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.2667 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.06667 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.06667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}\text{O}_3
1575
                                              798
                                                                                      0.250
                                                                                                                                         -1.275
                                                                                                                                                                                       0.08333\,Mn_3O_4 + 0.6667\,MnO + 0.08333\,MnO_2 + 0.08333\,Ti_2O_3 + 0.25\,Ti_3O_5 + 0.08333\,TiO_2 + 0.08333\,O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1576
                                               799
                                                                                      1.000
                                                                                                                                          -0.870
                                                                                                                                                                                       0.2857 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1429 \, \text{MnO} + 0.1429 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1429 \, \text{TiO} + 0.4286 \, \text{TiO}_2 + 0.1429 \, \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                               800
1577
                                                                                      0.500
                                                                                                                                         -2.182
                                                                                                                                                                                       0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.286 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.4286 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}
```

```
Weight
                                                                \Delta_r H
                 Label
                                                                                      Reaction
                                                             eV/atom
1578
                      800
                                        0.500
                                                                -1.917
                                                                                     0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.25 \text{ Mn}\text{O} + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.375 \text{ Ti}\text{O} + 0.125 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.125 \text{ Ti}\text{Mn}\text{O}_3 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}\text{Mn}_2\text{O}_4
1579
                      801
                                        0.250
                                                                -1.265
                                                                                     0.07692 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.692 \text{ MnO} + 0.07692 \text{ MnO}_2 + 0.3077 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.07692 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.07692 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                                                -1.175
                                                                                     0.09091 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.636 \text{ MnO} + 0.2727 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.09091 \text{ TiO}_2 + 0.09091 \text{ TiMnO}_3 + 0.09091 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1580
                      801
                                        0.250
1581
                      801
                                        0.250
                                                                -1.287
                                                                                     0.1 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.7 \,\mathrm{MnO} + 0.3 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                      801
                                        0.250
                                                                -1.389
1582
                                                                                     0.1111 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.667 \text{ MnO} + 0.3333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1111 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1583
                      802
                                        1.000
                                                                -0.479
                                                                                     0.125 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Fe}_0 + 0.4375 \text{ Li}_2\text{O} + 0.125 \text{ Li}_2\text{Fe}_5\text{O}_8 + 0.03125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}_0
1584
                      803
                                        0.500
                                                                -0.976
                                                                                     0.1111\,Mn_2O_3 + 0.1111\,Mn_3O_4 + 1.222\,MnO + 0.1111\,MnO_2 + 0.1111\,Ti_2O_3 + 0.2222\,Ti_3O_5 + 0.1111\,TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4
1585
                      803
                                        0.500
                                                                -1.090
                                                                                     0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.25 \text{ Mn}_2\text{O} + 0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_2 + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ Ti}_3\text{O}_5 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
1586
                      804
                                        1.000
                                                                -1.097
                                                                                     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}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_3
                                        0.500
1587
                      805
                                                                -1.471
                                                                                     0.125 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.125 \,\mathrm{MnO} + 0.375 \,\mathrm{MnO_2} + 0.375 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.125 \,\mathrm{TiO} + 0.125 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                      805
                                        0.500
                                                                                     0.1429 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + 0.2857 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4286 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1588
                                                                -1.209
                                        0.250
1589
                      806
                                                                -1.215
                                                                                     0.1262 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.02769 \,\mathrm{MnO} + 0.07077 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3692 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2615 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.08615 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1590
                      806
                                        0.250
                                                                -1.227
                                                                                     0.151 \text{ Mn}_3\text{O4} + 0.3633 \text{ Ti}_2\text{O3} + 0.2735 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O4} + 0.1061 \text{ O2} \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O3}
1591
                      806
                                        0.250
                                                                -1.253
                                                                                     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}
1592
                      806
                                        0.250
                                                                -1.190
                                                                                     0.1327 \, Mn_3O_4 + 0.07143 \, MnO_2 + 0.3673 \, Ti_2O_3 + 0.2653 \, TiMn_2O_4 + 0.08163 \, O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1593
                      807
                                        1.000
                                                                -1.141
                                                                                     0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.2 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1594
                      808
                                        1.000
                                                                -1.022
                                                                                     0.1667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.333 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1595
                      809
                                        1.000
                                                                -2.211
                                                                                     MnO + 0.5 Ti_2O_3 + 0.25 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1596
                      810
                                        0.500
                                                                -2.257
                                                                                     0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.25 \text{ MnO} + 0.125 \text{ MnO}_2 + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.375 \text{ TiO} + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1597
                      810
                                        0.500
                                                                -2.012
                                                                                     0.1111 \, Mn_2O_3 + 0.1111 \, Mn_3O_4 + 1.222 \, MnO + 0.1111 \, MnO_2 + 0.1111 \, Ti_2O_3 + 0.1111 \, Ti_3O_5 + 0.3333 \, TiO + 0.1111 \, TiMnO_3 + 0.1111 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
1598
                     811
                                        1.000
                                                                -1.400
                                                                                     1.4 \text{ MnO} + 0.4 \text{ MnO}_2 + 0.2 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.2 \text{ TiO} + 0.2 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \text{O}_4
1599
                      812
                                        0.500
                                                                -1.738
                                                                                     MnO + 0.3182 Ti_3O_5 + 0.04545 TiO + 0.1818 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
                      812
                                        0.500
                                                                -1.596
                                                                                     MnO + 0.3333 Ti_3O_5 + 0.1667 O_2 \longrightarrow TiMnO_3
1600
                      813
                                        1.000
                                                                 -0.945
                                                                                     0.3333 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.3333 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1601
1602
                      814
                                        1.000
                                                                -0.226
                                                                                     1.25 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.25 \text{ V}_2\text{O}_5 \longrightarrow \text{V}_3\text{O}_5
1603
                      815
                                        0.500
                                                                -1.813
                                                                                     0.1429 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.714 \,\mathrm{MnO} + 0.1429 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1429 \,\mathrm{TiO} + 0.1429 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1429 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1604
                      815
                                        0.500
                                                                -2.054
                                                                                     0.1667 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.667 \text{ Mn}\text{O} + 0.1667 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1667 \text{ Ti}\text{O} + 0.1667 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1605
                      816
                                        1.000
                                                                -2.455
                                                                                     0.2857 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.2857 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.2857 \, \text{Mn} \, \text{O} + 0.2857 \, \text{Mn} \, \text{O}_2 + 0.07143 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.7857 \, \text{Ti} \, \text{O} \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4
                      817
                                        1.000
                                                                -1.194
1606
                                                                                     0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 1.333 \, \text{MnO} + 0.1667 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.1667 \, \text{Ti} \, \text{MnO}_3 + 0.08333 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Ti} \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_4
                                        1.000
1607
                      818
                                                                -1.680
                                                                                     1.6 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiMnO}_3 + 0.1 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2 \,\mathrm{O}_4
                      819
                                        1.000
                                                                -2.643
                                                                                     0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + \text{Mn}_3\text{O}_4 + \text{Mn}_3\text{O}_
1608
                      820
                                        1.000
                                                                -1.979
                                                                                     0.8333 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.5 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1667 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
1609
1610
                      821
                                        1.000
                                                                -1.269
                                                                                     0.1667 \, Mn_2O_3 + 1.5 \, MnO + 0.1667 \, Ti_2O_3 + 0.1667 \, Ti_3O_5 + 0.1667 \, TiMnO_3 + 0.08333 \, O_2 \longrightarrow TiMn_2O_4
1611
                      822
                                        1.000
                                                                -1.328
                                                                                     0.2 \,\mathrm{MnO} + 0.4 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiMn}_2 \,\mathrm{O}_4 \longrightarrow \mathrm{TiMnO}_3
1612
                      823
                                        1.000
                                                                -1.973
                                                                                     0.3 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1 \,\mathrm{MnO_2} + 0.1 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.4 \,\mathrm{TiO} + 0.1 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1613
                      824
                                        1.000
                                                                -0.407
                                                                                     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
                      825
                                        0.500
                                                                -0.776
1614
                                                                                     0.1667 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 2.417 \text{Li}_2\text{O} + 0.1667 \text{Li}_7\text{Fe}\text{O}_2 + 0.04167 \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_7\text{Fe}\text{O}_4
1615
                      825
                                        0.500
                                                                -0.964
                                                                                     0.1429 \text{ Fe}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1429 \text{ Fe}\text{O} + 2.429 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1429 \text{ Li}_2\text{Fe}\text{O}_2 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_2\text{Fe}\text{O}_4
1616
                      826
                                        1.000
                                                                -7.515
                                                                                     4.75 \text{ FeO} + 0.125 \text{ Li}_2\text{O} + 0.125 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 0.125 \text{ Li}_5\text{FeO}_2 + 1.188 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{Fe}_5\text{O}_8
                      827
                                        0.500
                                                                -1.281
                                                                                     0.1765 \,\mathrm{MnO_2} + 0.2437 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1008 \,\mathrm{TiO} + 0.4118 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.08403 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1617
                      827
                                        0.500
                                                                -1.417
                                                                                     0.1053 \text{ MnO} + 0.1579 \text{ MnO}_2 + 0.2632 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1053 \text{ TiO} + 0.3684 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.1053 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1618
1619
                      828
                                        0.500
                                                                -1.845
                                                                                     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}
                      828
1620
                                        0.500
                                                                -1.902
                                                                                     0.307 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.07907 \,\mathrm{MnO} + 0.414 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1721 \,\mathrm{TiO} + 0.1395 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
```

```
Weight
                                                           \Delta_r H
                Label
                                                                               Reaction
                                                        eV/atom
1621
                    829
                                     1.000
                                                           -3.015
                                                                              0.2 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{MnO} + 0.8 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} + 0.2 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                   830
1622
                                     1.000
                                                           -0.400
                                                                              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
                                     1.000
                                                           -2.210
                                                                              0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.286 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.4286 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiO}_2 + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1623
                   831
1624
                    832
                                     1.000
                                                           -1.098
                                                                              0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                   833
                                     1.000
1625
                                                           -1.129
                                                                              1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.3333 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_2\mathrm{O}_3 + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{O}_5 + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_3\mathrm{MnO}_3 \longrightarrow \mathrm{Ti}_3\mathrm{Mn}_2\mathrm{O}_4
1626
                   834
                                     1.000
                                                           -2.475
                                                                              0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 1.167 \, \text{MnO} + 0.1667 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.5 \, \text{TiO} + 0.1667 \, \text{Ti}_{O_2} + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
1627
                    835
                                     0.500
                                                           -1.102
                                                                              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
1628
                    835
                                     0.500
                                                           -1.195
                                                                              0.08 \text{ MnO} + 0.24 \text{ TiO} + 0.3 \text{ TiO}_2 + 0.46 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.12 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1629
                   836
                                     1.000
                                                           -1.770
                                                                              0.2 \text{ V}_3 \text{ O}_5 + 1.2 \text{ VO} + 0.2 \text{ VO}_2 + 0.2 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{V}_2 \text{O}_3
                   837
                                     1.000
1630
                                                           -1.441
                                                                              0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.3333 \,\mathrm{TiO} + 0.1667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                    838
                                     0.500
1631
                                                           -1.620
                                                                              NiO + 0.3182 Ti_3O_5 + 0.04545 TiO + 0.1818 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
                   838
                                     0.500
1632
                                                           -1.479
                                                                              NiO + 0.3333 Ti_3O_5 + 0.1667 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
                    839
                                     1.000
                                                           -1.038
1633
                                                                              0.1667 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3333 \,\mathrm{Ti_3O_5} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1634
                   840
                                     1.000
                                                           -0.487
                                                                              0.6098 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1707 \,\mathrm{MnO} + 0.1951 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_2O_3}
1635
                   841
                                     1.000
                                                                              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}
                                                           -1.762
1636
                   842
                                     0.250
                                                           -0.771
                                                                              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}
1637
                    842
                                     0.250
                                                           -0.694
                                                                              0.25 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.25 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.25 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                   842
                                     0.250
1638
                                                           -0.722
                                                                              0.2593 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.03704 \text{ MnO} + 0.2593 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2222 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1639
                    842
                                     0.250
                                                           -0.782
                                                                              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}
1640
                   843
                                     1.000
                                                           -2.975
                                                                              0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + \text{MnO} + 0.1667 \, \text{MnO}_2 + 0.1667 \, \text{Ti}_2 \, \text{O}_3 + 0.6667 \, \text{TiO} + 0.1667 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2 \, \text{O}_4
                    844
1641
                                     1.000
                                                           -0.215
                                                                              0.5909 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2273 \,\mathrm{MnO_2} + 0.09091 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{Mn_2O_3}
1642
                   845
                                     1.000
                                                           -2.282
                                                                              0.1429 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 1.429 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.4286 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{MnO}_3 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4
                    846
                                     1.000
                                                           -0.490
                                                                              0.1667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.3333 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1667 \,\mathrm{TiMn_2O_4} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1643
1644
                    847
                                     0.333
                                                           -3.537
                                                                              0.1111 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1111 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.8889 \text{ TiO} + 0.1111 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.2778 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
                                                                              0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ MnO} + 0.875 \text{ TiO} + 0.125 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.3125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1645
                    847
                                     0.333
                                                           -3.566
                   847
                                     0.333
                                                           -3.482
                                                                              0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.1429 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.8571 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.2857 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1646
1647
                    848
                                     1.000
                                                           -1.704
                                                                              0.1429 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 1.429 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ TiO} + 0.1429 \text{ TiMnO}_3 + 0.1429 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
                                     1.000
1648
                   849
                                                           -2.038
                                                                              1.833 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{MnO_2} + 0.5 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                                                                              0.1667 \, Mn_2O_3 + 0.6667 \, MnO + 0.1667 \, Ti_2O_3 + 0.1667 \, Ti_3O_5 + 0.1667 \, TiO_2 + 0.08333 \, O_2 \longrightarrow TiMnO_3 \, O_3 + 0.1667 \, TiO_3 + 0.
                   850
                                     1.000
                                                           -1.261
1649
                                     0.500
1650
                   851
                                                           -1.598
                                                                              0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.1667 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                    851
                                     0.500
                                                           -1.501
                                                                              0.625 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.125 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.125 \,\mathrm{TiO_2} + 0.125 \,\mathrm{TiMnO_3} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1651
                    852
                                     0.333
                                                           -1.227
1652
                                                                              0.1 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.7 \text{ MnO} + 0.3 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1 \text{ Ti}_2 + 0.1 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1653
                    852
                                     0.333
                                                           -1.279
                                                                              0.08333 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.6667 \text{ MnO} + 0.08333 \text{ MnO}_2 + 0.3333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1654
                   852
                                     0.333
                                                           -1.205
                                                                              0.07692 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.6923 \,\mathrm{MnO} + 0.07692 \,\mathrm{MnO_2} + 0.3077 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.07692 \,\mathrm{TiO_2} + 0.07692 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1655
                   853
                                     0.250
                                                           -0.897
                                                                              0.2188 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.2188 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.0625 \,\mathrm{TiO} + 0.2812 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.03125 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                     0.250
1656
                    853
                                                           -0.971
                                                                              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
                   853
                                     0.250
                                                           -0.785
                                                                              0.1914 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.08895 \,\mathrm{MnO} + 0.2453 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.2642 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.02695 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1657
                                     0.250
                                                                              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}
1658
                   853
                                                           -0.869
1659
                    854
                                     1.000
                                                           -3.162
                                                                              0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + \mathrm{TiO} + 0.1667 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                   855
                                     1.000
                                                           -2.094
                                                                              NiO + 0.5 Ti_2O_3 + 0.25 O_2 \longrightarrow TiNiO_3
1660
                    856
                                     0.500
                                                           -1.637
                                                                              0.1111 \text{ Mn}_3\text{O4} + 1.556 \text{ MnO} + 0.1111 \text{ MnO}_2 + 0.4444 \text{ Ti}_2\text{O3} + 0.1111 \text{ TiO}_2 + 0.1111 \text{ O2} \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O4}
1661
1662
                    856
                                     0.500
                                                           -1.656
                                                                              0.1429 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.571 \,\mathrm{MnO} + 0.4286 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1429 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1663
                    857
                                     1.000
                                                           -2.628
                                                                              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
```

```
Weight
                                                                                              \Delta_r H
                                                                                                                              Reaction
                         Label
                                                                                         eV/atom
1664
                                858
                                                           1.000
                                                                                              -0.567
                                                                                                                             CoO + Cr_2O_3 \longrightarrow Cr_2CoO_4
                                859
                                                           1.000
                                                                                                                             4.857 \text{ FeO} + 0.1429 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1429 \text{ Li}_5\text{FeO}_4 + 1.214 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{LiFe}_5\text{O}_8
1665
                                                                                              -7.708
                                                           1.000
                                                                                              -2.192
                                                                                                                             0.1667 \, \text{Mn}_2 \, \text{O}_3 + 0.1667 \, \text{Mn}_3 \, \text{O}_4 + 0.1667 \, \text{Mn}_{02} + 0.1667 \, \text{Ti}_3 \, \text{O}_5 + 0.5 \, \text{TiO} + 0.08333 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1666
                               860
                                861
                                                           0.333
                                                                                              -0.742
                                                                                                                             0.5 \operatorname{Cr}_3 \operatorname{O}_4 + 0.5 \operatorname{Cr} \operatorname{O}_2 + \operatorname{NiO} \longrightarrow \operatorname{Cr}_2 \operatorname{NiO}_4
1667
                                                           0.333
                                                                                               -0.482
                                                                                                                             0.3333 \text{ Cr}_2\text{O}_3 + 0.3333 \text{ Cr}_3\text{O}_4 + 0.3333 \text{ Cr}_{02} + \text{NiO} \longrightarrow \text{Cr}_2\text{NiO}_4
1668
                                861
1669
                               861
                                                           0.333
                                                                                              -0.691
                                                                                                                             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
1670
                                862
                                                           1.000
                                                                                              -1.607
                                                                                                                             0.6667 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5 \,\mathrm{TiO} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1671
                                863
                                                           0.500
                                                                                              -0.912
                                                                                                                             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}_3 + 0.1364 \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}_3 + 0.1364 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1364 \text{ Ti}_2\text
1672
                               863
                                                           0.500
                                                                                              -1.154
                                                                                                                             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
                                                           0.200
1673
                                864
                                                                                              -0.827
                                                                                                                             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}
                                                           0.200
1674
                                864
                                                                                              -0.735
                                                                                                                             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}_3 \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3 \text{Mn}_3 \text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3 \text{O}_5 + 0.09615 \text{ Ti}_2 \text{O}_5 + 0.09615 \text{ Ti}_3 \text{O}_5 + 0.09
                                                           0.200
1675
                               864
                                                                                              -0.812
                                                                                                                             0.1065 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1552 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.1173 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1805 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06318 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1606 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.01805 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                           0.200
                                                                                               -0.847
                                                                                                                             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
1676
                                864
                                864
                                                           0.200
                                                                                              -0.737
                                                                                                                             0.1367 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.1511 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.01439 \text{ MnO} + 0.09353 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1942 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1007 \text{ Ti}_2\text{O}_2 + 0.1295 \text{ Ti}_3\text{Mn}_2\text{O}_4 \longrightarrow \text{Ti}_3\text{Mn}_3\text{O}_4 + 0.01439 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0
1677
                                865
                                                           1.000
                                                                                              -1.462
                                                                                                                             1.6 \,\mathrm{MnO} + 0.4 \,\mathrm{MnO}_2 + 0.2 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.2 \,\mathrm{TiO} + 0.2 \,\mathrm{TiO}_2 \longrightarrow \mathrm{TiMn}_2 \,\mathrm{O}_4
1678
1679
                                866
                                                           1.000
                                                                                              -3.869
                                                                                                                             0.4286 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO} + \mathrm{TiO} + 0.2857 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1680
                               867
                                                           0.500
                                                                                              -1.482
                                                                                                                             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
1681
                                867
                                                           0.500
                                                                                              -1.427
                                                                                                                             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
1682
                                868
                                                           0.333
                                                                                              -2.297
                                                                                                                             0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.1 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
1683
                                868
                                                           0.333
                                                                                              -2.174
                                                                                                                             0.5 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1667 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.5 \,\mathrm{TiO} + 0.08333 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                                           0.333
1684
                               868
                                                                                              -2.170
                                                                                                                             0.5 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.08333 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.08333 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.5 \text{ TiO} + 0.08333 \text{ Ti}_2 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1685
                               869
                                                           1.000
                                                                                              -2.259
                                                                                                                             0.4286 \, \text{Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \, \text{TiO} + 0.2857 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{TiO}_2
                               870
                                                           1.000
                                                                                              -0.679
                                                                                                                             0.375 \text{ V}_2\text{O}_3 + 0.125 \text{ V}_2\text{O}_5 + 0.125 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{VO}_2
1686
                               871
                                                           1.000
                                                                                              -1.130
                                                                                                                             0.2 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 1.2 \,\mathrm{MnO} + 0.2 \,\mathrm{MnO_2} + 0.4 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.2 \,\mathrm{TiO_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1687
1688
                               872
                                                           1.000
                                                                                              -3.041
                                                                                                                             0.4286 \,\mathrm{Mn_2O_3} + 0.1429 \,\mathrm{MnO_2} + 0.8571 \,\mathrm{TiO} + 0.1429 \,\mathrm{TiO_2} + 0.1429 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                               873
                                                           1.000
                                                                                              -1.414
                                                                                                                             1.833 \text{ MnO} + 0.1667 \text{ MnO}_2 + 0.1667 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1667 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1667 \text{ Ti}_0\text{O}_2 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1689
1690
                               874
                                                           0.250
                                                                                              -0.980
                                                                                                                             0.1974 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2443 \,\mathrm{Ti_3O_5} + 0.06311 \,\mathrm{TiO} + 0.2039 \,\mathrm{TiMn_2O_4} + 0.05502 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}
                                874
                                                           0.250
1691
                                                                                              -0.783
                                                                                                                             0.193 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.2632 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.2105 \text{ TiMn}_2\text{O}_4 + 0.03509 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMnO}_3
1692
                               874
                                                           0.250
                                                                                              -0.826
                                                                                                                             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}
                                874
                                                           0.250
1693
                                                                                              -1.018
                                                                                                                             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}
1694
                               875
                                                           1.000
                                                                                              -1.649
                                                                                                                             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}
1695
                               876
                                                           1.000
                                                                                              -1.327
                                                                                                                             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}
1696
                               877
                                                           1.000
                                                                                              -1.220
                                                                                                                             1.714 \text{ MnO} + 0.1429 \text{ MnO}_2 + 0.1429 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.1429 \text{ Ti}_3\text{O}_5 + 0.1429 \text{ Ti}\text{O}_2 + 0.1429 \text{ Ti}\text{MnO}_3 + 0.07143 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1697
                               878
                                                           0.500
                                                                                              -1.301
                                                                                                                             0.375 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.375 \text{ MnO} + 0.125 \text{ MnO}_2 + 0.125 \text{ Ti}_2\text{O}_3 + 0.375 \text{ TiO} + 0.375 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1698
                               878
                                                           0.500
                                                                                              -1.422
                                                                                                                             0.4 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.4 \,\mathrm{MnO} + 0.1 \,\mathrm{Ti_2O_3} + 0.4 \,\mathrm{TiO} + 0.4 \,\mathrm{TiMnO_3} + 0.05 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
1699
                               879
                                                           1.000
                                                                                              -3.027
                                                                                                                             0.5909 \,\mathrm{Mn_3O_4} + 0.2273 \,\mathrm{MnO_2} + \mathrm{TiO} + 0.09091 \,\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMn_2O_4}
                               880
                                                           1.000
                                                                                              -1.246
                                                                                                                             0.1667 \,\mathrm{Mn}_3 \,\mathrm{O}_4 + 1.5 \,\mathrm{MnO} + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_2 \,\mathrm{O}_3 + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{O}_5 + 0.1667 \,\mathrm{Ti}_2 \,\mathrm{O}_2 + 0.08333 \,\mathrm{O}_2 \longrightarrow \mathrm{Ti}_3 \,\mathrm{Mn}_2 \,\mathrm{O}_4
1700
1701
                                881
                                                           1.000
                                                                                              -0.755
                                                                                                                             0.1667 \, \text{FeO} + 2.417 \, \text{Li}_2\text{O} + 0.1667 \, \text{LiFe}_5\text{O}_8 + 0.04167 \, \text{O}_2 \longrightarrow \text{Li}_5\text{FeO}_4
1702
                                882
                                                           0.333
                                                                                              -0.518
                                                                                                                             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
                                882
                                                           0.333
1703
                                                                                               -0.669
                                                                                                                             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
1704
                                882
                                                           0.333
                                                                                              -0.580
                                                                                                                             0.5 \text{ Cu}_2\text{O} + 0.3333 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.08333 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{FeCuO}_2
1705
                                883
                                                           1.000
                                                                                               -2.006
                                                                                                                             0.125 \text{ Mn}_2\text{O}_3 + 0.5 \text{ Mn}_3\text{O}_4 + 0.125 \text{ MnO}_2 + 0.75 \text{ TiO} + 0.125 \text{ TiO}_2 + 0.125 \text{ TiMnO}_3 \longrightarrow \text{TiMn}_2\text{O}_4
1706
                                884
                                                           1.000
                                                                                               -0.605
                                                                                                                             0.11111 \text{ Fe}_3\text{O}_4 + 0.1111 \text{ Fe}\text{O} + 0.4444 \text{ Li}_2\text{O} + 0.1111 \text{ Li}_{\text{Fe}_5}\text{O}_8 + 0.05556 \text{ O}_2 \longrightarrow \text{Li}_{\text{Fe}}\text{O}_2
```

	Label	Weight	$\Delta_r H$	Reaction
			eV/atom	
1707	885	1.000	-1.305	$0.125Mn_2O_3 + 0.375Mn_3O_4 + 0.25MnO + 0.5TiO + 0.125TiO_2 + 0.375TiMnO_3 \longrightarrow TiMn_2O_4$
1708	886	0.500	-1.401	$0.08333Mn_2O_3 + 0.08333Mn_3O_4 + 0.08333MnO + 0.3333MnO_2 + 0.4167Ti_2O_3 + 0.08333TiO + 0.08333TiMn_2O_4 \longrightarrow TiMnO_3$
1709	886	0.500	-1.538	$0.1111Mn_2O_3 + 0.1111Mn_3O_4 + 0.1111MnO + 0.3333MnO_2 + 0.4444Ti_2O_3 + 0.1111TiO \longrightarrow TiMnO_3$
1710	887	1.000	-1.354	$0.8333\mathrm{MnO} + 0.1667\mathrm{MnO_2} + 0.1667\mathrm{Ti_2O_3} + 0.1667\mathrm{Ti_3O_5} + 0.1667\mathrm{TiO_2} + 0.08333\mathrm{O_2} \longrightarrow \mathrm{TiMnO_3}$