

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДООКСИДНЫХ ФАЗ
НА ОСНОВЕ МОЛИБДАТА СТРОНЦИЯ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ***Гробовой И.С.⁽¹⁾, Политов Б.В.⁽¹⁾, Сунцов А.Ю.⁽¹⁾, Подкорытов А.Л.⁽²⁾*⁽¹⁾ Институт химии твердого тела УрО РАН
620990, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91⁽²⁾ Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Сложные оксиды со структурой двойного перовскита вызывают интерес исследователей благодаря комплексу функциональных свойств, которые могут быть использованы при разработке различных высокотемпературных устройств. Многообещающей областью применения данного класса материалов является создание электродов для твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ). В качестве одного из перспективных направлений в этой области на текущий момент рассматривают синтез и разработку новых перовскитоподобных молибдатов. Данные соединения уже зарекомендовали себя в качестве анодов ТОТЭ, однако сведения об их термодинамических свойствах все еще остаются фрагментарными. Поэтому, в качестве основного объекта в настоящей работе были выбраны твердые растворы состава $\text{Sr}_2\text{Mg}_{1-x}\text{Ni}_x\text{MoO}_6$. Методом теории функционала электронной плотности рассчитывали статическую энергию как функция от объема элементарной ячейки твердых фаз $\text{Sr}_2\text{MgMoO}_6$, $\text{Sr}_2\text{NiMoO}_6$ и $\text{Sr}_2\text{Mg}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{MoO}_6$. Полученные данные были аппроксимированы уравнениями состояния твердого тела и полиномиальными функциями.

На основании результатов расчетов были вычислены характеристическая температура Дебая и различные термодинамические функции вещества. Теоретический расчет был реализован в рамках квазигармонического приближения. Особенностью такого подхода является определение температуры Дебая, после чего все термодинамические свойства системы могут быть непосредственно вычислены с помощью известных соотношений. С этой целью численно решалось уравнение Дебая, строились кривые зависимости объема элементарной ячейки от температуры. По полученным кривым $V = f(T)$ были построены зависимости термодинамических функций от температуры – энергии Гиббса G , энтальпии H , энтропии S , теплоемкости при постоянном давлении C_p .

Полученные результаты были проанализированы и сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными. Установлено, что вычисленные значения теплоемкости и сжимаемости находятся в разумном согласии с экспериментом. Было показано, что замещение катионов в В-подрешетке изменяет механические свойства молибдатов $\text{Sr}_2\text{Mg}_{1-x}\text{Ni}_x\text{MoO}_6$, однако не оказывает существенного влияния на их термодинамические характеристики.