Структура

На каждый из 1-4 слайд и текст

Вступление

Цели, задачи

Актуальность

Методика расчета и банк

Описание методики

Кратко. Без детального расписывания, по формуле просто показать, что нашел, и как

Графики

График ДСК с подписями линий

Энергии Гиббса

Непосредственно расчет

График промежуточный

График ДСК для плавления и паузы

График ДСК 2 пиков

График ДСК расстеклования

Остальные расчеты

График 30-10-60 ДСК

График 35-5-60 ДСК

Заключение

Заключение

Замечания:

* Текст: то, что написано просто это все слова, которые я буду говорить, в скобках указаны действия указать на что-то. Переключить слайд. Вопросы указаны?? Красным цветом указаны фрагменты, которые я не знаю, как написать.
* Исправить температуры в каждой области
* Может меньше сделать слайдов, но так будет слишком громоздко
* Нужны ли газовые фазы или о них сказать, но не указывать

Вступление

Актуальность

Актуальность изучения стеклообразующей системы Ge-Ga-Se определяется рядом физических свойств, а именно высоким показателем преломления, широким окном прозрачности, низкой энергией фононов, что позволяет изготавливать на их основе фотонные интегральные схемы, сенсоры, приборы, ночного, видения, системы для хранения и передачи информации и многие другие активные оптические устройства. В медицинских целях халькогенидные стекла применяются для создания зондов и другого диагностического оборудования. //Дополнить из публикаций?//

Отдельной задачей является определение подходящего состава стекла для конкретных задач, а эксперименты с высокочистыми стеклами достаточно дороги и трудоемки.

(СЛЕД. СЛАЙД)

Цели и задачи

В связи с этим //Хз чем?// цель данной работы: методом минимизации энергии Гиббса определить температурные режимы синтеза и состав возможных кристаллических фаз в стеклообразующей системе Ge-Ga-Se, предсказать ее химические и физические свойства при термической обработке. Задачи:

(СЛЕД. СЛАЙД)

Методика расчета и банк

Описание методики

Исследование кристаллизационной устойчивости высокочистых халькогенидных стекол Ge-Ga-Se было проведено с помощью программного комплекса Chemical Thermodynamics Calculator (Указать на фото проги), реализующего метод минимизации энергии Гиббса. В расчетах использован банк данных (БД) ИВТАН ТЕРМО с его расширением на новые литературные экспериментальные данные. Например:

* рп

А также были рассмотрены диаграммы двухкомпонентных систем попарно Ge, Ga, Se для уточнения набора соединений //Как лучше сказать?// соединений

Для понимания методики качественного анализа стекла кратко рассмотрим алгоритм расчета.

В калькуляторе задаются соотношения элементов, входящих в состав стекла, в нашем примере Ge, Ga, Se. Ar нужен для обеспечения сходимости при расчете концентраций в газовой фазе. Указывается температурный интервал, и первоначальное количество точек для расчета на этом интервале. (Указать на шапку программы)

Далее указываются растворы, твердые и жидкие, если они их существование должно быть учтено при расчете концентраций и химических потенциалов веществ. (Левый рисунок ALL). Либо наоборот - не должны учитываться (Правый рисунок). Калькулятор минимизирует общую //Или нет?// энергию Гиббса системы, исходя из этого рассчитывает концентрации веществ и химические потенциалы элементов. Таким образом в каждой температуре можно посчитать химический потенциал вещества по формуле. (Указать Химический потенциал вещества) Например соединение AB2 и его химпотенциал равен сумме химпотенциалов элемента А и 2 химпотенциалов B. По формуле энергии Гиббса (Указать Энергия гиббса) можно найти энергию Гиббса вещества, так как его концентрация и химпотенциал известны.

В ходе работы было произведено 2 основных расчета для каждого стекла:

1. стекло представлено в виде двух растворов, один из которых состоит из кристаллических компонентов, а второй – из жидких. В Были также добавлены ассоциаты, которые не сыграли никакой роли //Объяснять почему?// (ПОКАЗАТЬ НА фото слева ALL)
2. стекло представлено кристаллическими компонентами в виде отдельных конденсированных фаз, фактически несмешивающимися, и жидким раствором (ПОКАЗАТЬ на фото справа SOLID).

В результате двух последних проведённых расчётов были найдены химические потенциалы компонентов стекла, разница между которыми определяет количественную характеристику пересыщения на кристаллизацию сравниваемых компонентов.

(СЛЕД. СЛАЙД)

Графики

График ДСК с подписями линий

На этом и следующих слайдах представлена методика качественного термодинамического анализа стеклообразующей систем составов GexGaySez. На примере системы состава Ge20Ga20Se60

Здесь (Линия ДСК) изображена кривая сигнала ДСК. Ось абсцисс – температура в кельвинах, ординат справа //Что за единица?//.

//надо ли указывать что от температуры?, это же логично вроде//. Получена на аппарате …, в институте высокочистых веществ РАН им ?? Девятых (не знаю как лучше написать). Экзотермический эффект указан наверх.

Эта кривая наложена на график концентраций отдельных веществ от температуры. Вертикальная ось - ось концентраций веществ в моль/(моль\*атом). Эта единица для обезразмеривет расчеты //Что сказать?//. Ось ординат – температура в кельвинах. Данные зависимости получены из расчета SOLID //или не нужно загружать слушателя внутренними названиями, которые ничего не значат особо?//, где исключены твердые растворы и каждое вещество представлено в виде отдельной фазы. Разным цветом (УКАЗАТЬ НА ГРАФИКИ ЗАВИСИМОСТЕЙ) обозначены графики концентраций, каждая подпись и линия 1 вещества закрашены 1 цветом во всех системах и графиках и концентраций, и энергий гиббса для удобного сравнения. (УКАЗАТЬ НА ОБЛАСТИ). Разными цветами обозначены области изменений в стекле //Или как назвать скачки на ДСК графике?//, соответствующие пикам и падениям сигнала ДСК.

Вертикальные пунктирные линии – температурные границы областей //Не знаю будут ли они видны?//. (Указать на графике меж областей)

(СЛЕД. СЛАЙД)

Энергии Гиббса

Здесь изображены графики энергий Гиббса веществ: Ge, Ga, Se и их основных соединений //Нужно ли говорить так или лучше – просто перечислить все контрольные соединения?//.

Ось абсцисс – температура в кельвинах, ординат – энергия Гиббса в //В чем?//. Сплошной линией показаны энергии Гиббса из расчета SOLID, где компоненты представлены в виде отдельных несмешивающихся фаз, твердый раствор исключен. (УКАЗАТЬ сплошную прямую Se). Пунктирной – энергии из расчета ALL, где твердые компоненты представлены в виде твердого раствора. (УКАЗАТЬ пунктирную прямую Se). По изломам и пересечениям этих кривых, а так же по графикам на предыдущем слайде можно проанализировать сигнал ДСК. Кривые энергий Гиббса не очень ярко объясняют ДСК сигнал в отдельности, поэтому лучше использовать их в совокупности с графиком концентраций, а по изломам энергий Гиббса (Указать на изгибы GeSe), а так же пересечениям линий отдельных фаз и твердого раствора (Указать на изгибы Ge) более точно определить границы областей и объяснить явления, происходящие в стекле. Вернемся на предыдущий слайд

(СЛЕД. СЛАЙД)

Непосредственно расчет

График промежуточный

Мы знаем, что ДСК стекла измеряется от высоких температур. (ПОКАЗАТЬ НА ОБЛАСТЬ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР). Поэтому будем рассматривать области именно с плавления стекла. Изменения в системе не могут произойти, если они не разрешены термодинамически. Так же могут не происходить по кинетическим причинам //Нужно ли указать что это отдельная тема и этот вопрос я не рассматривал? Или лучше сказать об этом в другом месте. Например в конце как возможный путь работы или в начале при описании методики?// Значит пики сигнала ДСК будут располагаться ровно под соответствующими областями изменения рассчитанных кривых или левее. (ПОКАЗАТЬ НА ГРАФИКЕ ПИК И ОБЛАСТЬ ПОД НИМ) //может быть сюда вставить промежуточный слайд поясняющий это все?//

//Нужно ли говорить о проблемах: помехи на кривых, разные кривые из-за скорости остывания и тд? Или там же где про кинетику?//

Прямимая в все это рассмотрим каждую из областей конкретно

(СЛЕД. СЛАЙД)

График ДСК плавление – пауза

Из данного расчёта графически было установлено, что плавление начинается около условной температуры в **804 К**. Выше данной температуры находится однородный расплав, из которого в результате охлаждения формируется стекло.

Первая область это – Плавление (ПОКАЗАТЬ НА ОБЛАСТЬ ПЛАВЛЕНИЯ)

Температурный интервал: **778-830 К** (ПОКАЗАТЬ НА ТЕМПЕРАТУРУ). Поведение ДСК обусловлено (ДСК СИГНАЛ), как мы видим на графике: резким падением концентраций фазы Ga и Se, а так же образованием Ga2Se (ПОКАЗАТЬ НА КРИВЫЕ). Напомню, что вещества в данном расчете представлены в виде отдельных фаз. //опережение ДСК расчета может быть обусловлено кинетическими эффектами. Надо ли говорить?//

В это температурной области наблюдается резкое увеличение термодинамической выгодности твердого раствора Ga, Ga2Se, Ga2Se3 по сравнению с отдельными фазами этих веществ.   
Следующая область – это //Не знаю как назвать, Затишье перед бурей??// (УКАЗАТЬ НА ОБЛАСТЬ ПАУЗЫ). Температура **758-778 К**  
Изменений в концентрациях Ga, Ga2Se не наблюдается, концентрация Se изменяется не значительно. (ПОКАЗАТЬ НА ГРАФИКЕ ОБЛАСТЬ ЭТИХ КОНЦЕНТРАЦИЙ)

Изменений в энергиях Гиббса различных фаз и изменений в выгодности твердого раствора не наблюдается  
Далее рассмотрим пики на кривой ДСК (СЛЕД. СЛАЙД)

График ДСК 2 пиков

Основной пик (УКАЗАТЬ НА ОСНОВНОЙ ПИК). Температурный интервал **705-758 К.**наблюдается уменьшение концентраций фаз Se, Ga2Se. К то муже на данном интервале температур мы видим уменьшение выгодности твердого раствора Ga2Se, Ga2Se3, Ga (ПОКАЗАТЬ НА ГРИФИК ЭНЕГРИЙ ГИББСА ЭТИХ ФАЗ) перед кристаллизацией отдельных компонентов. Плавное снижение концентраций и расхождения энергий Гиббса обуславливают некоторую протяженность пика.  
На промежутке **680-705 К** - Малый пик  
Он обусловлен пресыщением на кристаллизацию //Можно ли это писать?// фазы Ga, а также сближением энергий гиббса твердого раствора Ga2Se, Ga2Se3 и отдельных кристаллических фаз. Как видно: пик не описывается изменением концентраций компонентов в системе.

Такая ситуация повторится и в других составах. Рассмотрим следующую область

(СЛЕД. СЛАЙД)

//стоит ли написать про малый пик или просто его скромно обойти?//

График ДСК расстеклования

Растекловывание происходит в интервале **445-515 К**

(УКАЗАТЬ НА ОБЛАСТЬ)

//Нужно ли говорить об области после пиков или бессмысленно?//

Образование GeSe и резкое падение концентраций Se, Ge. Виден излом на графиках энергий гиббса для Ge, GeSe,GeSe2. Расстеклование заканчивается при температур. Где фаза кристаллического Ge становится выгоднее Ge в твердом растворе. (ПОКАЗАТЬ НА ГРАФИК GE)

Далее рассмотрим расчеты стеклообразующих систем составов Ge30Ga10Se60 и Ge35Ga5Se60, но уже более кратко.

(СЛЕД. СЛАЙД)

Остальные расчеты

График 30-10-60 ДСК

//Насколько кратко мне говорить?//

Здесь мы видим аналогичные области Стеклования 450 – 540 К, малого пика 682 – 715 К, Основной пик 715 – 760 К, Пауза 760 – 780 К, Плавление 780 – 840 К. (УКАЗАТЬ НА ОБЛАСТИ)

1. //Нужно ли говорить?//Мы видим некоторое отклонение кривой ДСК от расчетов (УКАЗАТЬ НА ПУНКТИРНУЮ ЛИНИЮ). Область паузы продолжается дольше чем расчитано, что возможно объясняется кинетическими эффектами.

(СЛЕД. СЛАЙД)

График 35-5-60 ДСК

На этом графике мы видим те же самые области (Перечислить температуры). //Это плохая термограмма. Где хорошая, ведь на термограммах в пдф у меня есть нормальная?//

Заключение

В ходе термодинамического исследования кристаллизационной устойчивости халькогенидных стёкол GexGaySez методом минимизации энергии Гиббса:

1. с позиции ассоциированных растворов проведено моделирование расплава и раствора твёрдых компонентов, что позволило найти температурный интервал плавления стеклообразующей системы Ge-Ga-Se;
2. путём сопоставления химических потенциалов кристаллических компонентов и экстраполированных в область переохлаждённого расплава предсказана кристаллизация в зависимости от состава стёкол;
3. путем сопоставления химических потенциалов кристаллических компонентов и экстраполированных в область переохлаждённого расплава предсказано поведение кривой ДСК на некоторых участках

Развитие данной методологии в применении к другим стеклообразующим системам позволит прогнозировать возможные продукты кристаллизации и определять температурный интервал их образования, а в ряде случаев выявлять различные изменения на кривой ДСК.

Выполненное исследование термодинамических и кинетических характеристик стеклообразующих систем на основе GexGaySez призвано ускорить разработку перспективных стекол оптического качества.