# Структура

На каждый из 1-4 слайд и текст

### Вступление

### Цели, задачи

### Актуальность

## Методика расчета и банк

### Описание программы

### Методика расчета

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

# 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 программы

Исследование кристаллизационной устойчивости высокочистых халькогенидных стекол Ge-Ga-Se было проведено с помощью программного комплекса Chemical Thermodynamics Calculator, реализующего метод минимизации энергии Гиббса. В расчетах использован банк данных (БД) ИВТАН ТЕРМО с его расширением на новые литературные экспериментальные данные. Для понимания расчетов обратимся к формуле (Показать на формулу энергии Гиббса). Программа выдает концентрации веществ и химические потенциалы элементов для каждой температуры. С их помощью можно найти химический потенциал и вклады в общую энергию Гиббса каждого вещества. (След. Слайд)

Описание методики

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

Определение температурного интервала плавления стеклообразующей системы было выполнено в результате термодинамического расчёта, в котором стекло было представлено в виде двух растворов, один из которых состоит из кристаллических компонентов, а второй – из жидких (Показать на график All). Из данного расчёта графически было установлено, что плавление начинается около условной температуры в 1000 К. Выше данной температуры находится однородный расплав, из которого в результате охлаждения формируется стекло.

Также был проведен расчёт, в котором стекло представлено кристаллическими компонентами в виде отдельных конденсированных фаз, фактически несмешивающимися, и жидким раствором (Показать на график 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

Здесь (Линия ДСК) изображена кривая сигнала ДСК //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. Данные зависимости получены из расчета SOLID //или не нужно загружать слушателя внутренними названиями, которые ничего не значат особо?//, где исключены твердые растворы. 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?//. (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?//.

Сплошной линией показаны показаны энергии Гиббса из расчета SOLID, где компоненты представлены в виде отдельных несмешивающихся фаз, твердый раствор исключен. Пунктирной – энергии из расчета ALL, где твердые компоненты представлены в виде твердого раствора. По изломам и пересечениям этих кривых, а так же по графикам на предыдущем слайде можно проанализировать сигнал ДСК. Вернемся на предыдущий слайд (След. Слайд)

# Непосредственно расчет

График промежуточный

Мы знаем, что ДСК стекла измеряется от высоких температур. (Показать на область высоких температур). 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?//

Кривые энергий гиббса не ярко объясняют ДСК сигнал, лучше использовать график концентраций, а по изломам энергий гиббса более точно определить границы областей и объяснить явления, происходящие в стекле.

График ДСК плавление - пауза

Первая область это – Плавление (Показать на область плавления)

Температурный интервал: 830-790 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)  
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 760-700 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 протяженность пика  
  
На промежутке 700-680К: - 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 500-445 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.

# Остальные расчеты

//Насколько кратко мне говорить?//

Система

# 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;

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.