##### Термодинамическое моделирование химических и фазовых превращений в стеклообразующей системе Ge-Ga-Se

Крайнов И.О.*1*, Балуева К.В.*2*, Плехович А.Д.*2*, Кутьин А.М.*2*

*1Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

*2Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятых РАН, Нижний Новгород, Россия*

*E-mail:* [*kraynoff.i@yandex.ru*](mailto:kraynoff.i@yandex.ru)

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.

Управление процессом кристаллизации при высокотемпературной переработке шихты в стекло или стеклокерамический материал с заданными функциональными свойствами, характеризуется величиной термодинамического фактора, определяемого разностью химических потенциалов компонентов в кристалле и переохлажденном расплаве, и формирует очередность образования кристаллических фаз в зависимости от текущего состава системы.

В связи с этим цель 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.

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, а так же расчетные и уточненные с помощью CALPHAD.

Такой подход к разработке новых функциональных материалов, включающий накопление термодинамических свойств, как базовой информации для термодинамического прогноза при синтезе высокочистых многокомпонентных стекол с заданными характеристиками, позволит сократить сроки выполнения НИОКР и получения новых оптических материалов.

Кроме того данная работа позволит в будущем спрогнозировать свойства достаточно актуальных сейчас халькогенидных тонких пленок (Thin Films), а также расширить накопленные сведения о трехкомпонентных стеклообразующих системах.