Структура

На каждый из 1-4 слайд и текст

1. **Вступление**
2. **Описание методики**

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

1. **ДСК с подписями линий**
2. **Энергии Гиббса**
3. **Промежуточный**
4. **ДСК для плавления и ?паузы?**
5. **ДСК 2 пиков**
6. **ДСК расстеклования**
7. **30-10-60 ДСК**
8. **35-5-60 ДСК**
9. **Заключение**

Замечания:

Сверху текст слайда:

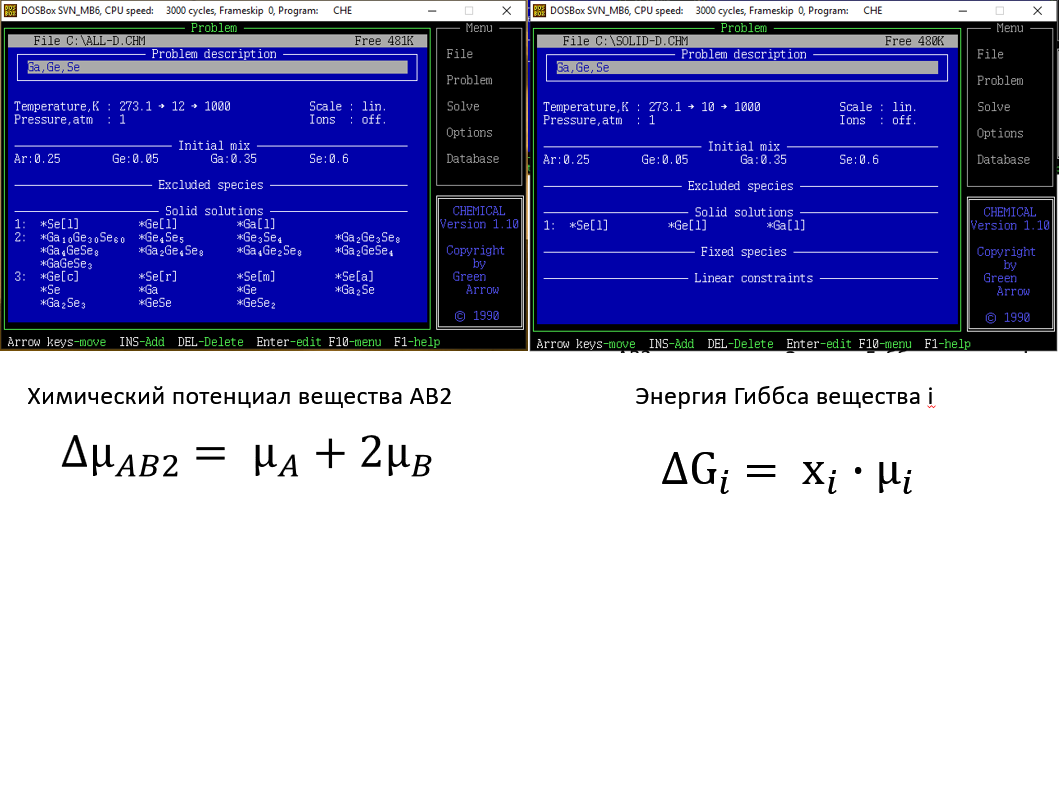
Обычный текст: то, что написано просто это все слова, которые я буду говорить,

**(в скобках указаны действия указать на что-то. Переключить слайд).**

**//Вопросы указаны синим цветом в слэшах//**

Красным цветом указаны фрагменты, которые я не знаю, как написать.

В рамке внизу представлен сам слайд (пока не была выбрана тема, только основные картинки)



Вступление

Здравствуйте, я Крайнов Илья, студент 2 курса, Химического факультета. Тема моего доклада- Термодинамическое моделирование химических и фазовых превращений в стеклообразующей системе Ge-Ga-Se.

Актуальность изучения химических и фазовых превращений в многокомпонентной стеклообразующей системы Ge-Ga-Seопределяется многочисленными исследованиями, описанными как в отечественной, так и зарубежной литературе. Данные стекла характеризуются высоким показателем преломления (значение?), широким окном прозрачности (найти для себя диапазон от 1- до 20 мкм), что позволяет изготавливать на их основе фотонные интегральные схемы, сенсоры, системы для хранения и передачи информации, а также использовать их в медицинских целях.

Однако многокомпонентность на практике приводит к достаточно сложной задаче определения подходящего состава стекла с заданными функциональными свойствами. При этом эксперименты с высокочистыми стеклами трудоемки и занимают большое время. В связи с этим необходимость предсказывать химические и физические превращения, особенно в многокомпонентном стекле, используя аппарат химической термодинамики, при этом проводя интеллектуальный выбор состава и условий получения стекол, является актуальной задачей.

Цель данной работы: методом минимизации энергии Гиббса определить температурные режимы синтеза и состав возможных кристаллических фаз в стеклообразующей системе Ge-Ga-Se.

(СЛЕД. СЛАЙД)

Теоретическиая часть

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

В калькуляторе задаются соотношения элементов, входящих в состав стекла. Указывается температурный интервал, давление.(шапка программы)

Методика термодинамического моделирования химических и фазовых превращений состоит из 2 вариантов расчета для каждой исследуемой системы

1. стекло представлено в виде двух растворов, один из которых состоит из кристаллических компонентов, а второй – из жидких. (фото 1)
2. Второй **-** стекло представлено кристаллическими компонентами в виде отдельных конденсированных фаз, фактически несмешивающимися между собой, и жидким раствором(фото 2).

На основе данных расчётов были вычислены температурные зависимости химических потенциалов базовых компонентов стекла, разница между которыми определяет количественную характеристику пересыщения на кристаллизацию этих компонентов.

**(СЛЕД. СЛАЙД)**

Список источников

ДСК с подписями линий

На этом и последующих слайдах представлена методика термодинамического анализа системы состава Ge20Ga20Se60.

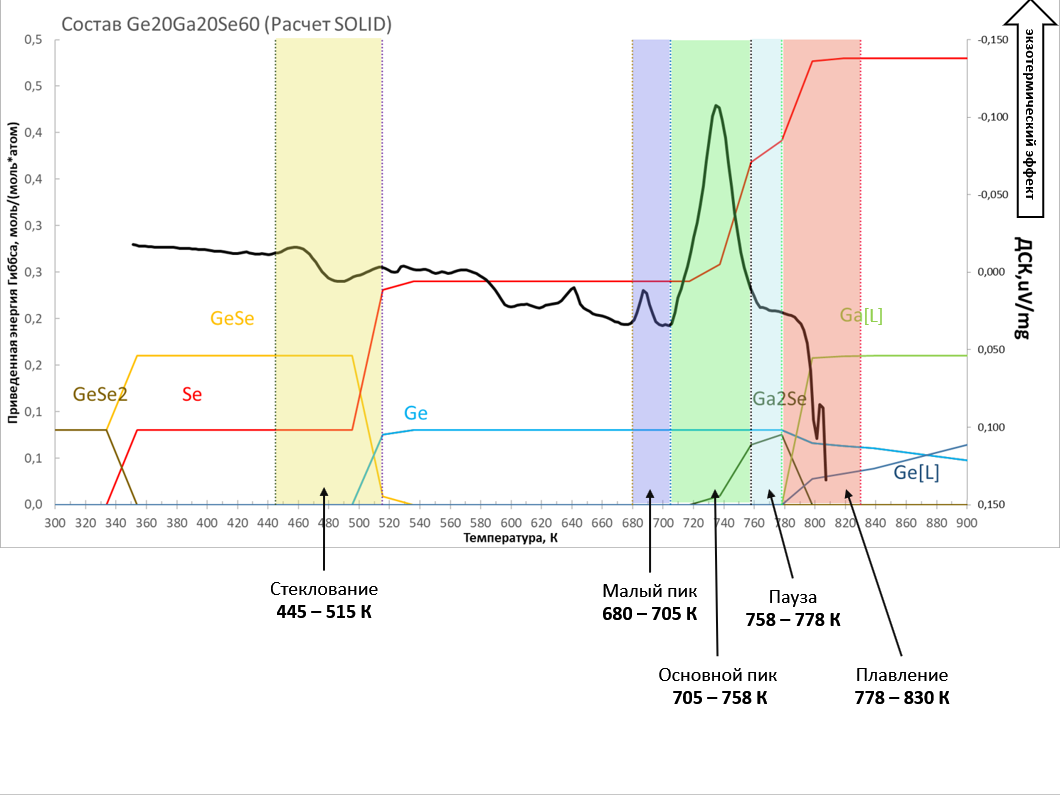
Здесь (Линия ДСК) изображена кривая сигнала ДСК. (Ось абсцисс) температура в кельвинах, микровольт/миллиграмм справа (Ось справа)

Образцы стекол исследовались на приборе STA 409 PC Luxx фирмы НЕТЧ в алюминиевых тиглях в потоке высокочистого и осушенного Ar при скорости нагревания 10 К/мин.

Для интересующих фаз и превращений введена цветовая схема соответствующих температурных интервалов. Например: концентрации селена (ГРАФИКИ концентраций) и энергии гиббса вещества обозначена красным на всех графиках (Энергии гиббса).

Вертикальные пунктирные линии – температурные границы областей. (Пунктирные линии)

**(СЛЕД. СЛАЙД)**



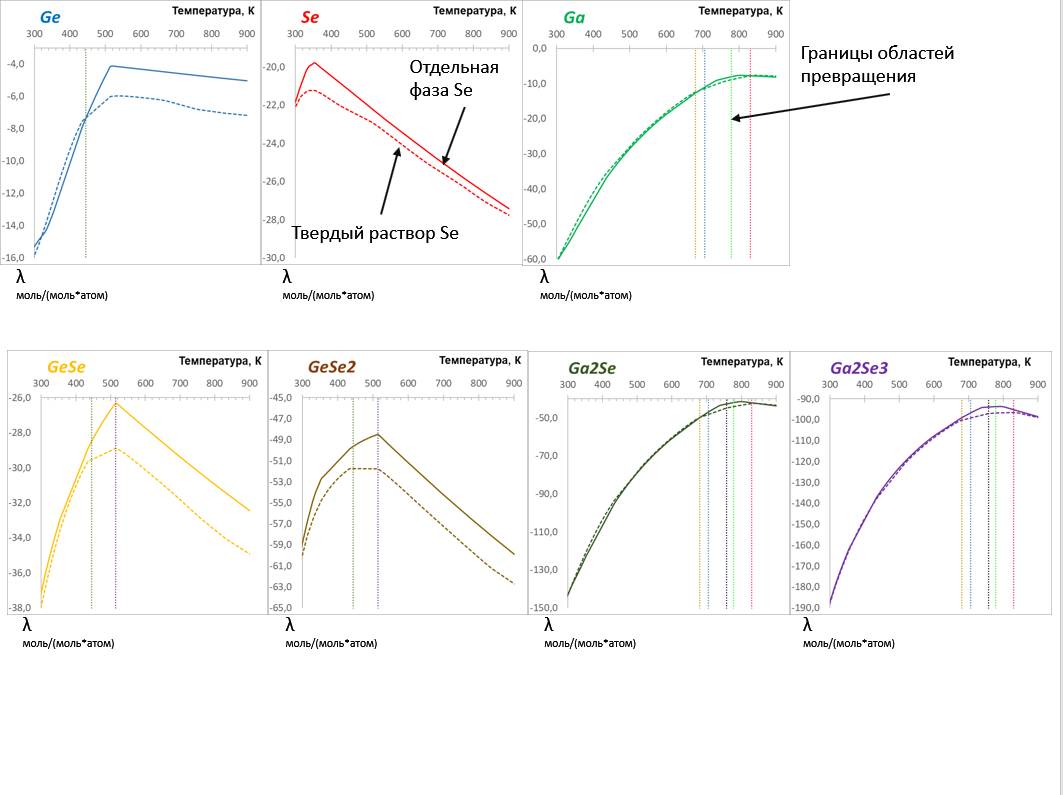
Энергии Гиббса

Здесь изображены графики энергий Гиббса веществ: Ge, Ga, Se и их основных соединений (заголовки графиков энергий гиббса)

Сплошной линией (СПЛОШНАЯ ПРЯМАЯ Se) показаны энергии Гиббса из расчета, где компоненты представлены в виде отдельных несмешивающихся фаз. Пунктирной **(пунктирная прямая Se)** – энергии из расчета ALL, где компоненты представлены в виде твердого раствора.

По изломам и пересечениям этих кривых (изломы на графике GeSe), а также по разнице между ними (Разница линий в Ga2Se3) можно сделать вывод о степени перекристаллизации компонента (Разница линий в Ga2Se3) и проанализировать сигнал ДСК. Вернемся на предыдущий слайд

**(СЛЕД. СЛАЙД)**



ИНТЕРВАЛ ТЕМПЕРАТУРЫ 700-900 К

Из данного графика было установлено, что плавление начинается с температуры **800 К**. Выше данной температуры находится однородный расплав, из которого в результате охлаждения формируется стекло. (**дск плавления).** Температурный интервал: **778-830 К** (область плавления). Как мы видим на графике: резкое падение концентраций фазы Ga и Se, а так же образование Ga2Se (1) (КРИВЫЕ концентраций). В это температурной области наблюдается резкое увеличение термодинамической выгодности твердого раствора Ga, Ga2Se, Ga2Se3 по сравнению с отдельными фазами этих веществ.

Далее рассмотрим пики на кривой ДСК

(СЛЕД. СЛАЙД)

ДСК 2 пиков

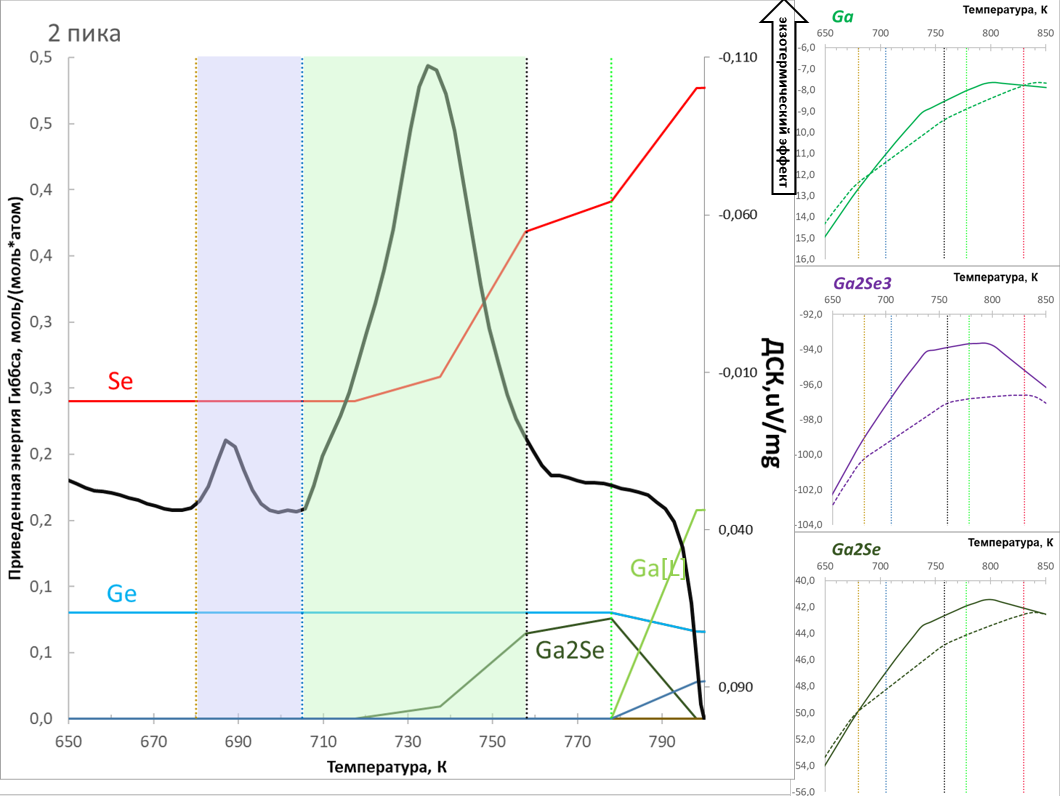
Основной пик (ОСНОВНОЙ ПИК дск).Температурный интервал **705-758 К.** (область пика)наблюдается уменьшение концентраций фаз Se, Ga2Se. **(КРИВЫЕ концентраций)** К тому же на данном интервале температур мы видим уменьшение выгодности твердого раствора Ga2Se (1), Ga2Se3 (3), Ga (**ГРаФИК ЭНЕРГИЙ ГИББСА)** в сравнении с кристаллизацией отдельных компонентов.

На промежутке **680-705 К** располагается малый пик **(область малого пика)**. Он обусловлен пресыщением на кристаллизацию /**/Можно ли это писать?//** фазы Ga, а также сближением энергий Гиббса твердого раствора и отдельных кристаллических фаз Ga2Se (1), Ga2Se3 (3). Как видно: пик не описывается изменением концентраций компонентов в системе, а только изменениями энергий Гиббса. (**ГРаФИК ЭНЕРГИЙ ГИББСА)**

Такая ситуация повторится и при описании пиков других составов. Рассмотрим следующую область

**(СЛЕД. СЛАЙД)**

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



ДСК расстеклования

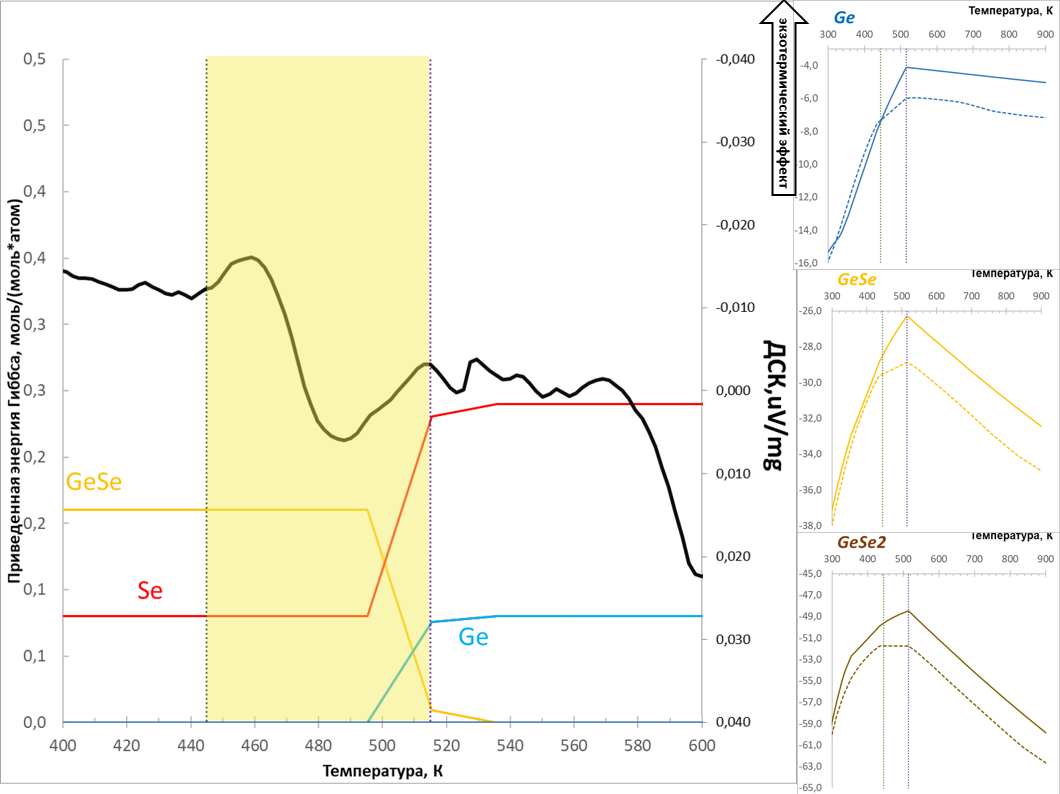
!!!!!!!!!Стеклование происходит в интервале 445-515 К **//Или нет?//** **(область стеклования) 600 К**

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

Образование GeSe и резкое падение концентраций Se, Ge. **(КРИВЫЕ концентраций)** Виден излом на графиках энергий Гиббса для Ge, GeSe (2), GeSe2 (4). (**ГРаФИК ЭНЕРГИЙ ГИББСА)** Стеклование заканчивается при температуре, где фаза кристаллического Ge становится выгоднее Ge в твердом растворе. **(ГРАФИК GE)**

Далее рассмотрим расчеты стеклообразующих систем составовGe30Ga10Se60 и Ge35Ga5Se60, но уже более кратко.

**(СЛЕД. СЛАЙД)**



30-10-60 ДСК

**//Насколько кратко мне говорить?//**

Здесь мы видим аналогичные области стеклования, малого пика, основного пика, паузы, плавления**. (ОБЛАСТИ температур внизу)**

**//Нужно ли говорить и расскрывать?//** Здесь **(пунктирная прямая температуры)** мы видим некоторое отклонение кривой ДСК от расчетов. Область паузы продолжается дольше чем расчитано, что возможно объясняется кинетическими эффектами. Фазы как бы опаздывают. **//Нужно ли говорить о заторможенности фаз)//**

**(СЛЕД. СЛАЙД)**

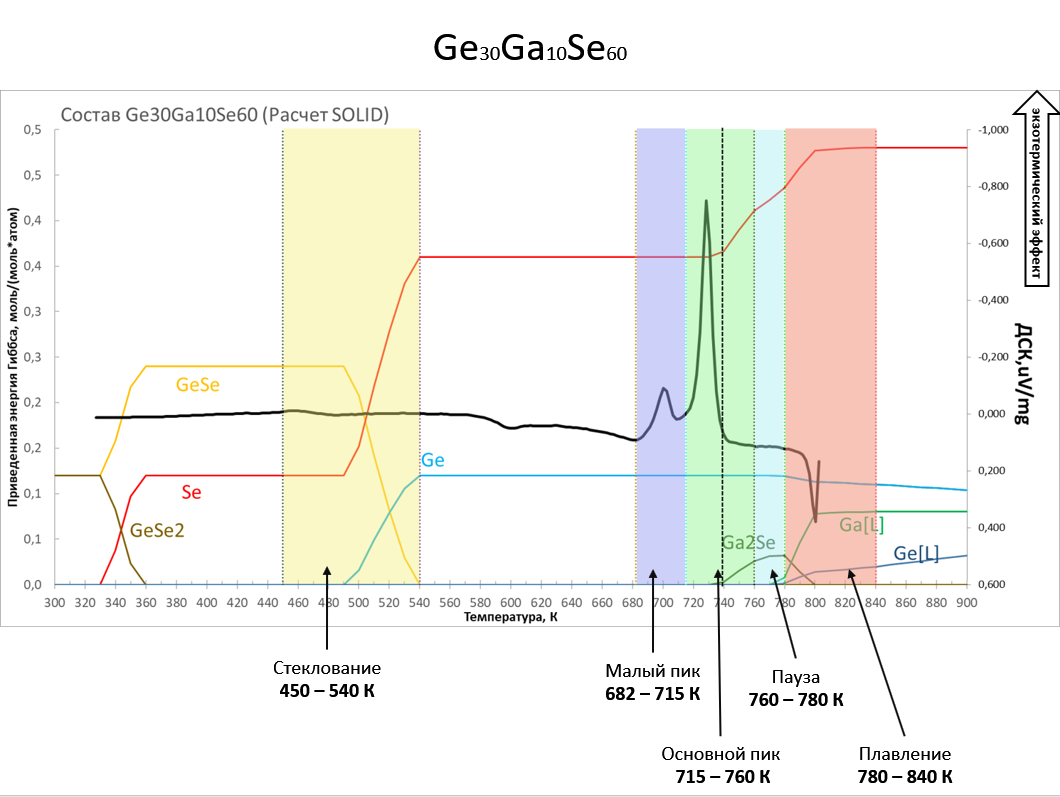
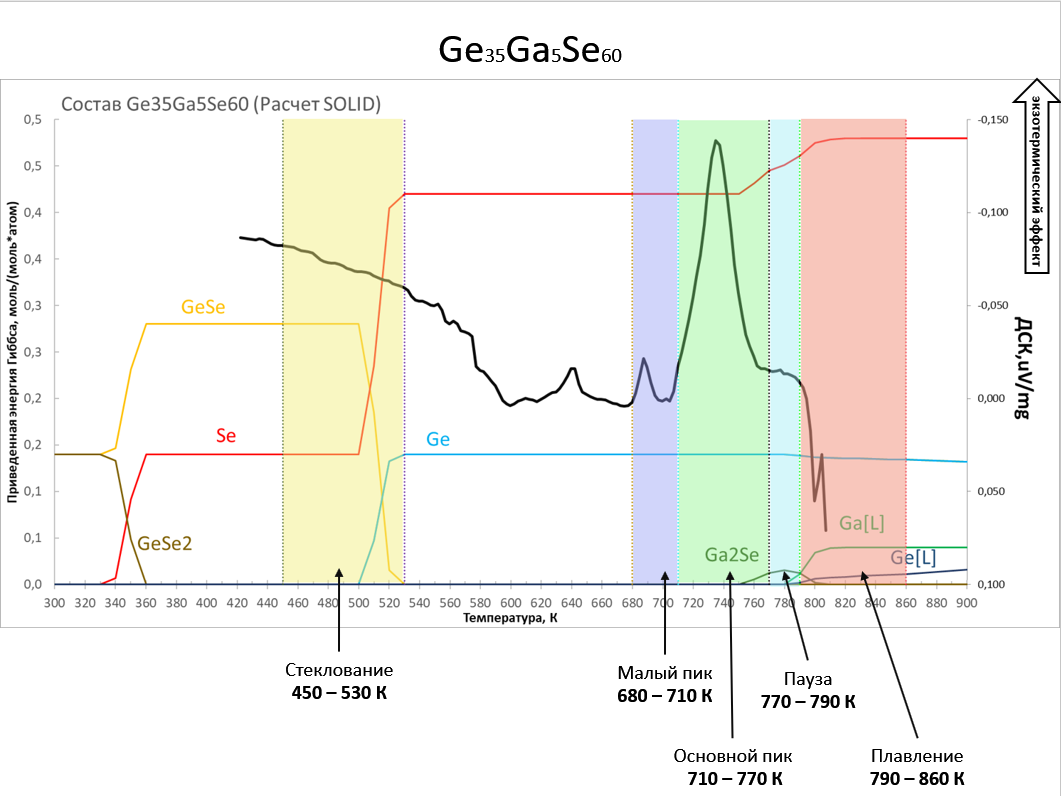


График 35-5-60 ДСК

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

**(СЛЕД. СЛАЙД)**



Выводы

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, определен температурный интервал плавления.
2. путём сопоставления химических потенциалов кристаллических компонентов и экстраполированных в область переохлаждённого расплава предсказана кристаллизация в зависимости от состава стёкол.
3. Проведена интерпретация кривых ДСК изученных составов стекол