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:

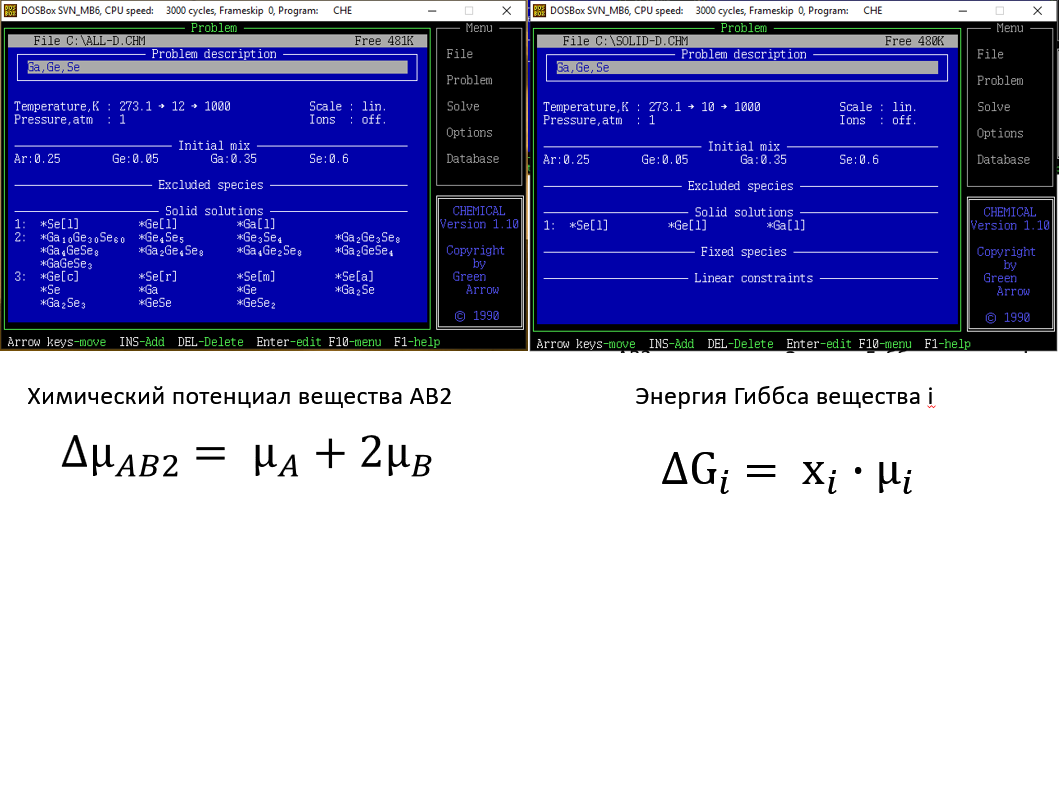
Обычный текст: то, что написано просто это все слова, которые я буду говорить,

**(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 задачи определения подходящего состава стекла с заданными функциональными свойствами. При этом эксперименты с высокочистыми стеклами трудо- и время емки. В связи с этим необходимость предсказывать ХиФ 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)**

Описание методики

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)**.

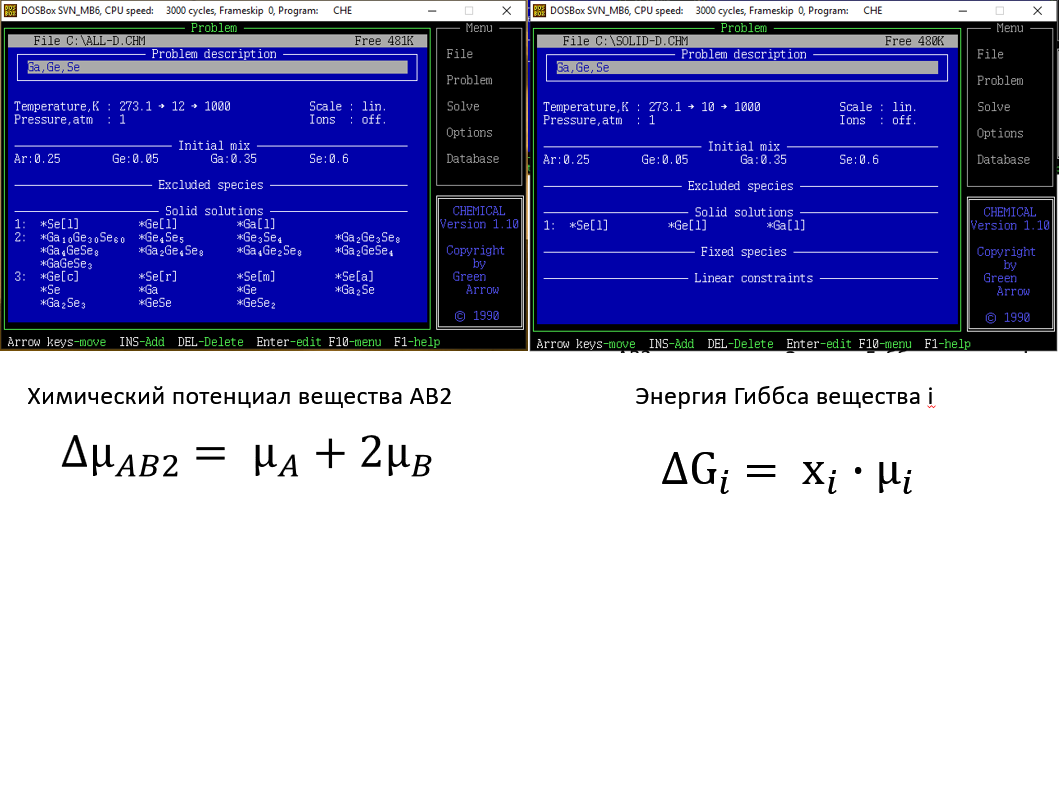
В калькуляторе задаются соотношения элементов, входящих в состав стекла. Указывается температурный интервал, давление. **(шапка программы)**

Методика Термодинамическое моделирование химических и фазовых превращений из 2 вариантов расчета. для каждой из исследованных системы

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

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)**



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, ось **//Что за единица?//.** Справа **(Ось справа)**

Образцы стекол исследовались на приборе STA 409 PC Luxx фирмы НЕТЧ в алюминиевых тиглях в потоке высокочистого и осушенного Ar (80 мл/мин) при скорости нагревания 10 К/мин.

Для инт фаз превращений введена цветовая схема соответствующих температурных интервалов

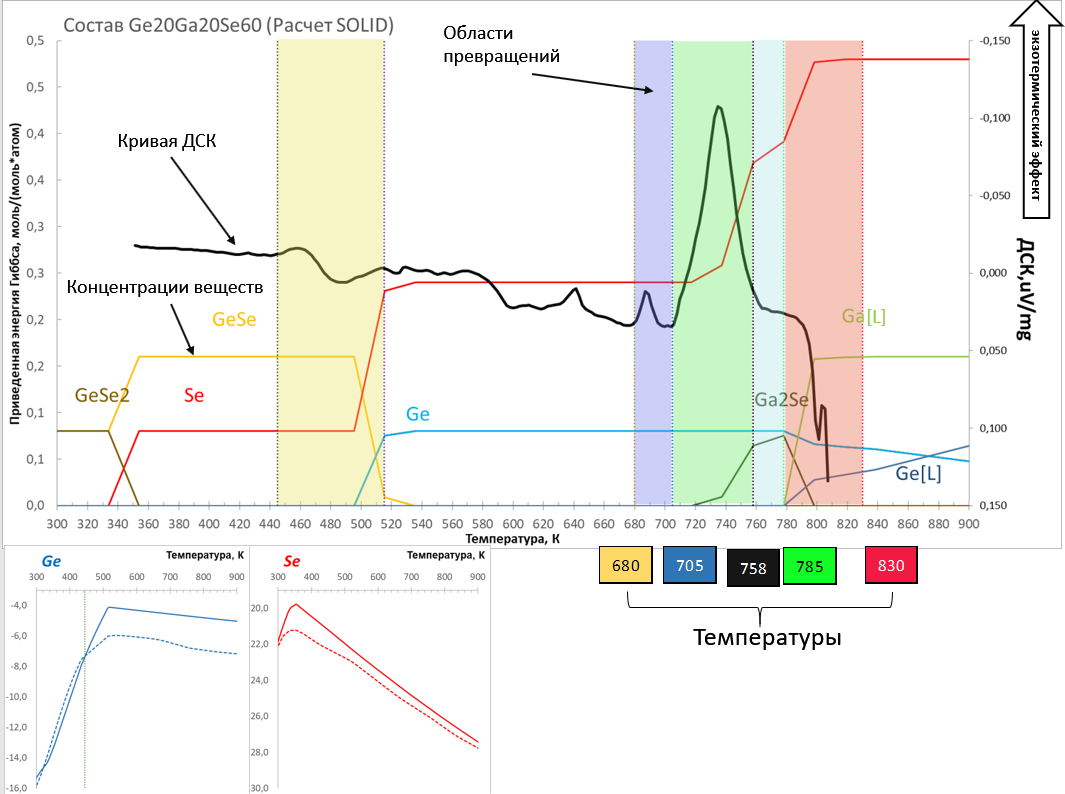
Например: Селен…..

Разным цветом **(ГРАФИКИ концентраций**) обозначены графики концентраций, каждая подпись и линия 1 вещества закрашены 1 цветом во всех системах и графиках для удобного сравнения. **(Энергии гиббса).**

Разными цветами обозначены области изменений в стекле **//Или как назвать скачки на ДСК графике?//,** соответствующие пикам и падениям сигнала ДСК. **(области)**

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

**(СЛЕД. СЛАЙД)**



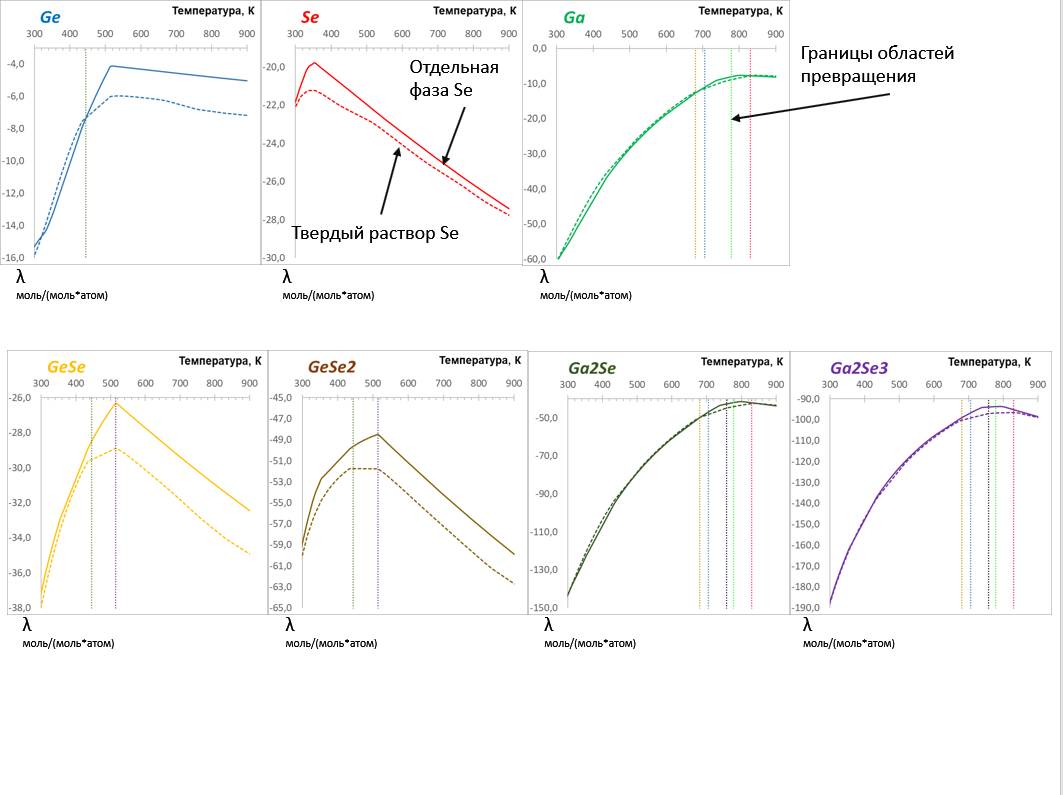
Энергии Гиббса

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

**(Ось абсцисс)** температура в кельвинах, **(ось ординат)** энергия Гиббса в **//В чем?//.** 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)**



Промежуточный

Здесь представлены все области, качественно проанализированные мной. **(область подписей)**

Мы знаем, что ДСК стекла измеряется от высоких температур. **(ОБЛАСТЬ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР)**. Поэтому будем рассматривать области именно с плавления стекла. Изменения в системе не могут произойти, если они не разрешены термодинамически. Так же они могут не происходить по кинетическим причинам.

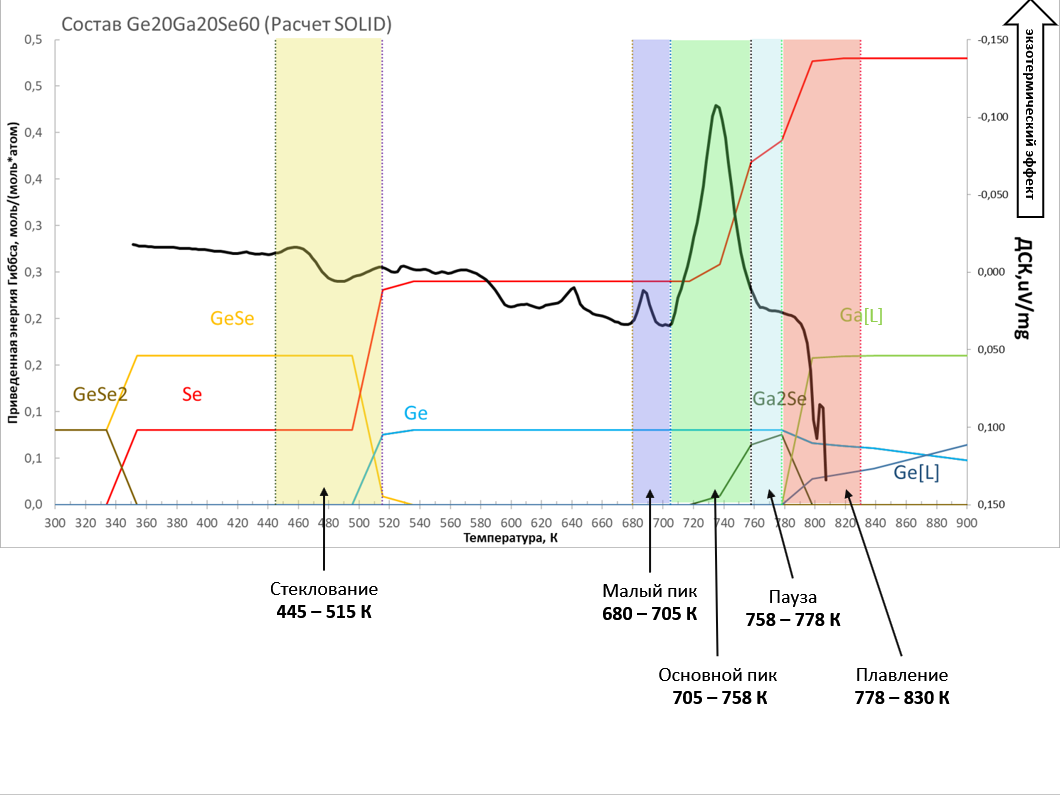
**//Нужно ли указать что это отдельная тема и этот вопрос я не рассматривал? Или лучше сказать об этом в другом месте. Например в конце как возможный путь работы или в начале при описании методики?//**

Значит пики сигнала ДСК будут располагаться ровно под соответствующими областями изменения рассчитанных кривых или левее. (**ПОКАЗАТЬ НА ГРАФИКЕ ПИК И ОБЛАСТЬ ПОД НИМ**). Как бы опаздывая от рассчитанных

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

Принимая в все это рассмотрим каждую из областей конкретно

**(СЛЕД. СЛАЙД)**



ДСК плавление – ?пауза?

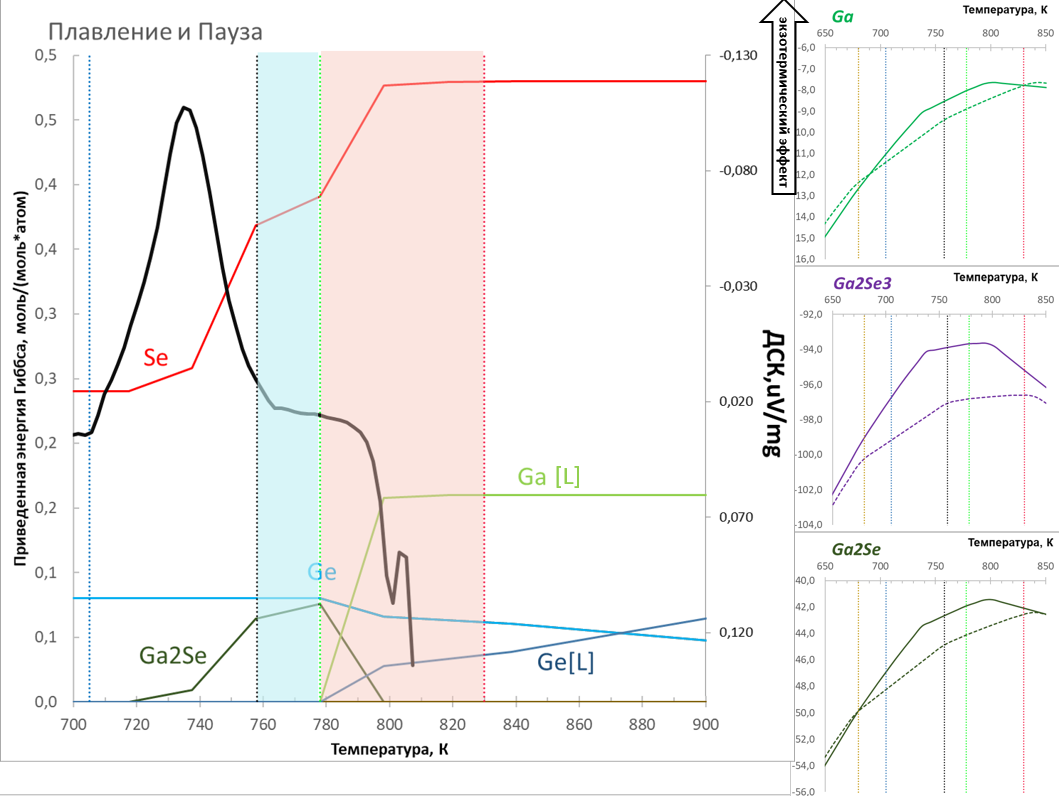
Из данного графика было установлено, что плавление начинается с температуры **800 К**. Выше данной температуры находится однородный расплав, из которого в результате охлаждения формируется стекло. (**дск плавления).** Температурный интервал: **778-830 К** **(область плавления).** Как мы видим на графике: 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.

Следующая область, где не происходит никаких изменений. Названа для удобства ?паузой? **(ОБЛАСТЬ ПАУЗЫ = Зачем так называть?).**

Температура **758-778 К**. Резких изменений в концентрациях Ga, Ga2Se (1) не наблюдается, концентрация Se изменяется незначительно. **(КРИВЫЕ концентраций).** Изменений в выгодности твердого раствора не наблюдается. Следовательно в данной области не должно быть пиков и провалов сигнала ДСК **(кривая дСк паузы),** что согласуется с экспериментом.

Далее рассмотрим пики на кривой ДСК

(**СЛЕД. СЛАЙД)**



ДСК 2 пиков

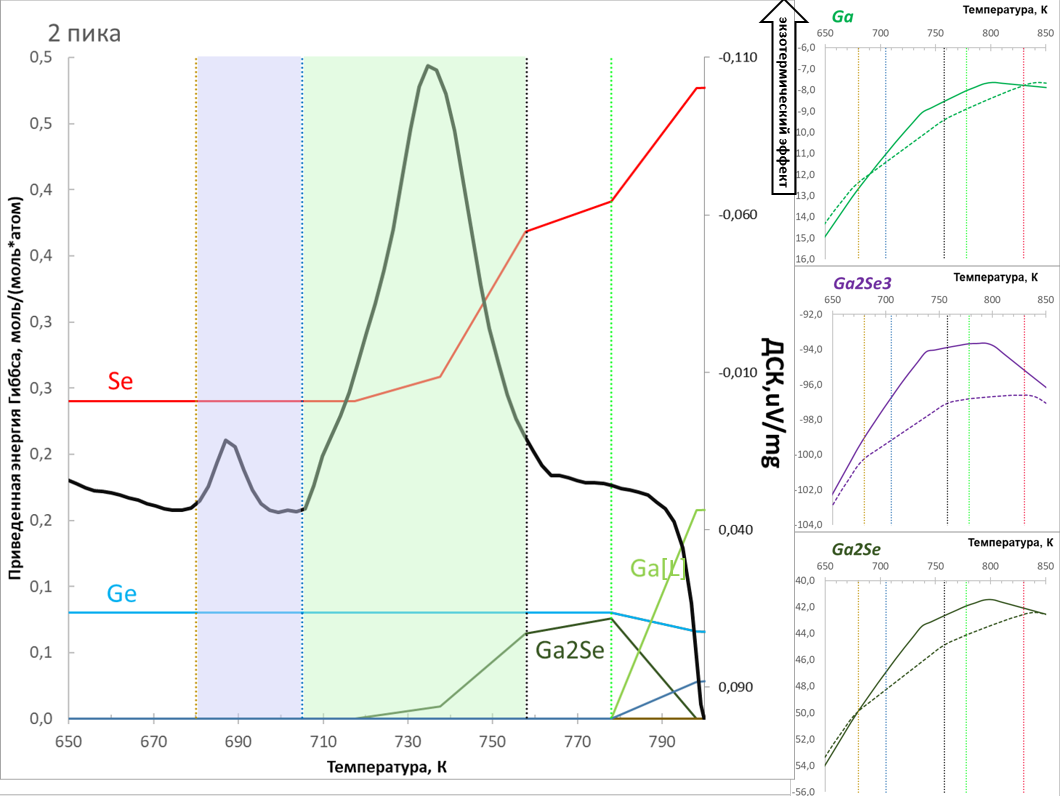
Основной пик **(ОСНОВНОЙ ПИК дск).** Температурный интервал **705-758 К. (область пика)**наблюдается уменьшение концентраций фаз Se, Ga2Se. **(КРИВЫЕ концентраций)** К тому же на данном интервале температур мы видим уменьшение выгодности твердого раствора Ga2Se (1), Ga2Se3 (3), Ga (**ГРаФИК ЭНЕРГИЙ ГИББСА)**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

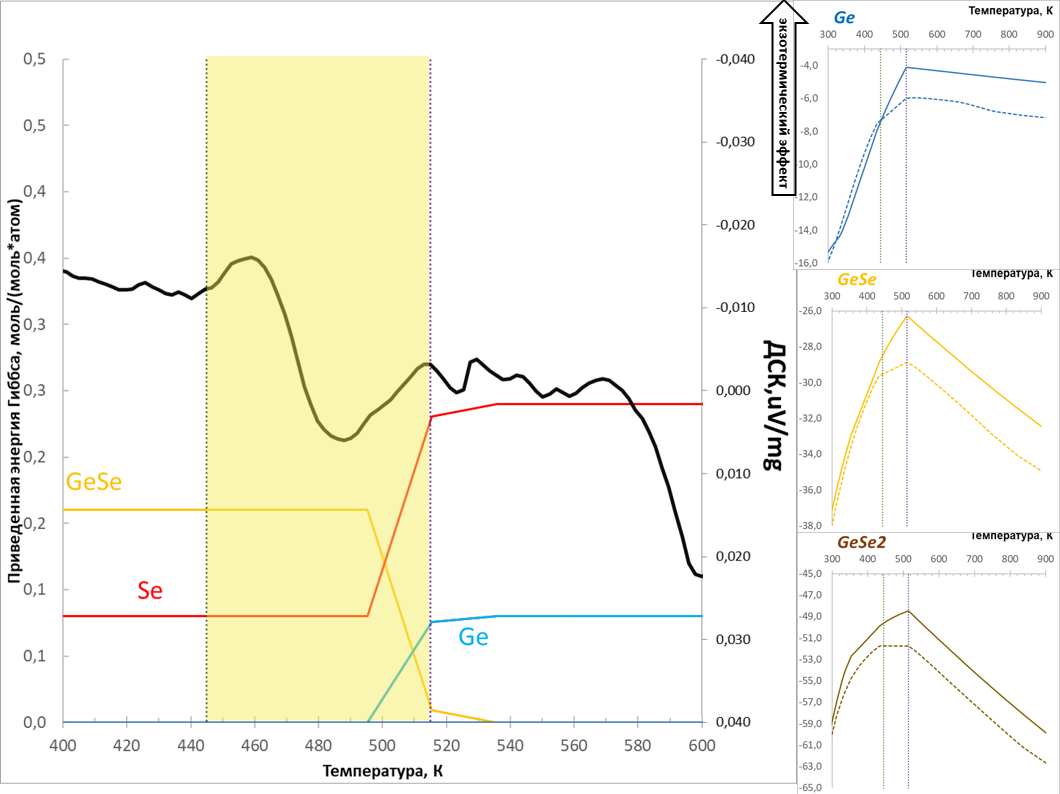
!!!!!!!!!Стеклование происходит в интервале 445-515 К **//Или нет?//** **(область стеклования) 600 К**

**//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)**

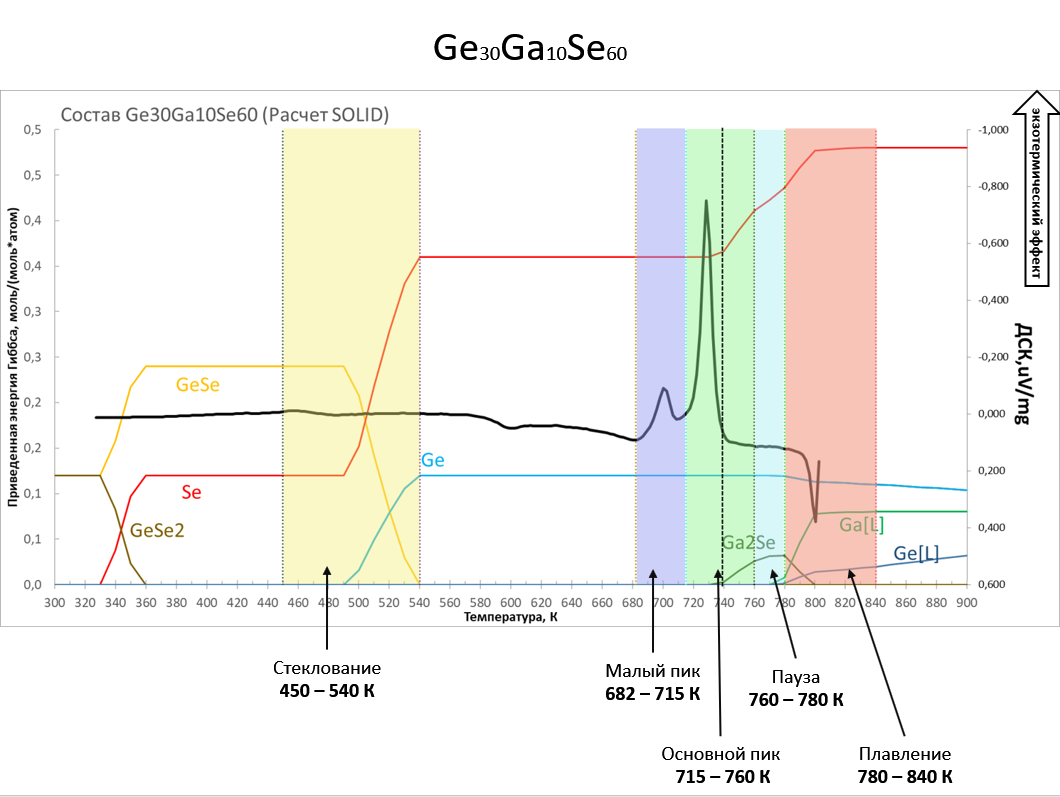
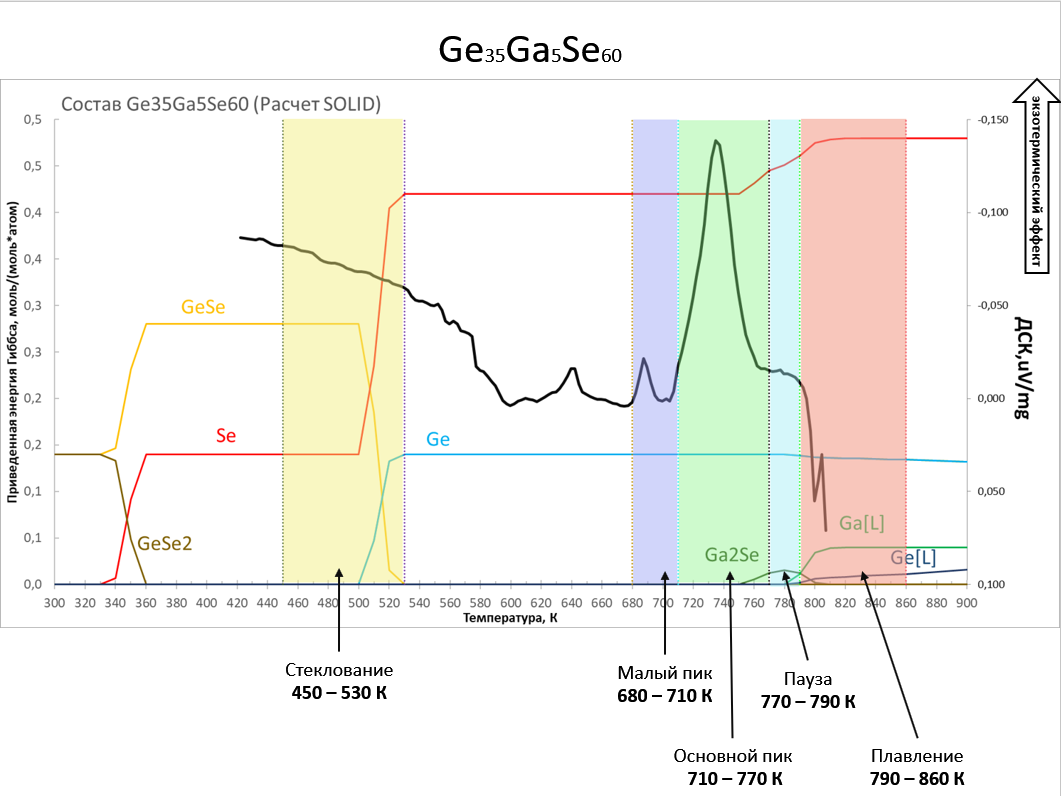


График 35-5-60 ДСК

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