Структура

На каждый из 1-4 слайд и текст

1. Титульник
2. **Вступление**
3. **Теоретическая часть**

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

1. **Фазовые диаграммы систем Ge-Se, Ge-Ga, Ga-Se**
2. **РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА И ДСК СТЕКЛА ДЛЯ СИСТЕМЫ СОСТАВА: Ge20Ga20Se60**
3. **РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА ЭНЕРГИИ ГИББСА ХИМИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТОВ И ИХ СОЕДИНЕНИЙ**
4. **РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА, ЭНЕРГИИ ГИББСА И ДСК СТЕКЛА ДЛЯ СИСТЕМЫ СОСТАВА: GE20GA20SE60**
5. **РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА, ЭНЕРГИИ ГИББСА И ДСК СТЕКЛА ДЛЯ СИСТЕМЫ СОСТАВА: Ge30Ga10Se60**
6. **РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА, ЭНЕРГИИ ГИББСА И ДСК СТЕКЛА ДЛЯ СИСТЕМЫ СОСТАВА: Ge15Ga25Se60**
7. **Заключение**
8. **Прощание**

Замечания:

Сверху текст слайда:

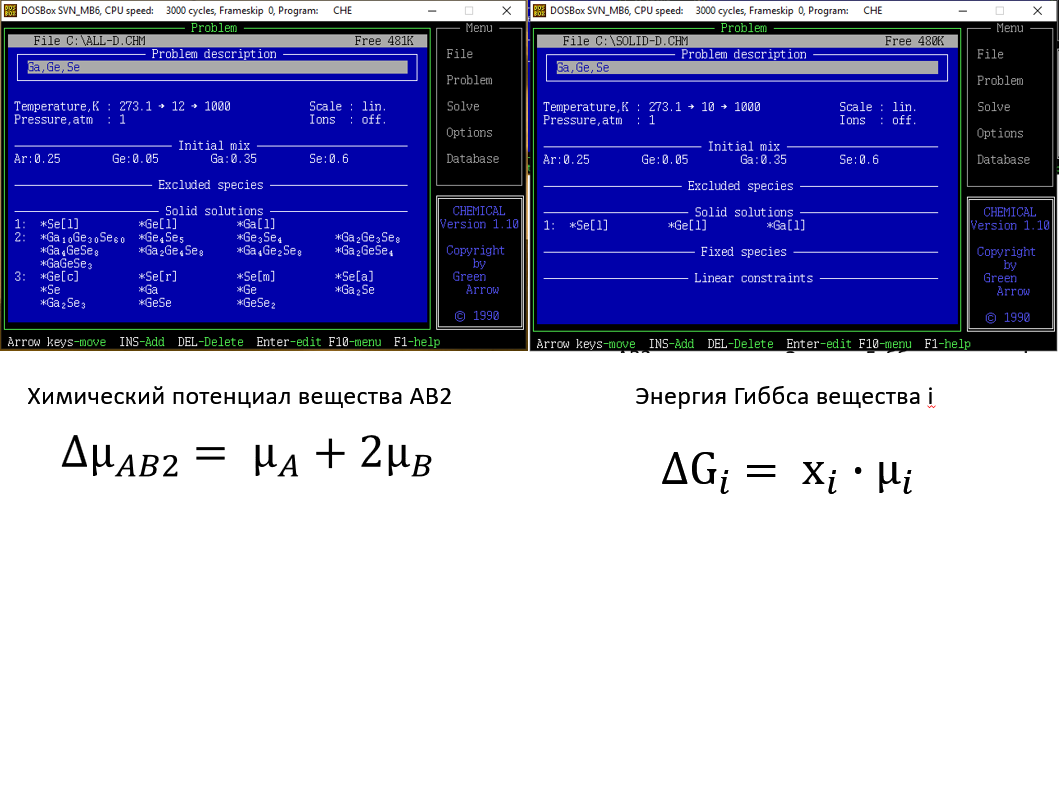
Обычный текст: то, что написано просто это все слова, которые я буду говорить,

**(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 (1.6 кварц 1.8-2.4 кварц теллуридные(оксид) халькогенидные), широким окном прозрачности (от 1 – 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.

на практике многокомпонентность 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 источников).

В калькуляторе указывается температурный интервал и давление. Задаются соотношения элементов, входящих в состав стекла, реализована возможность исключения фаз и организация идеальных растворов. (шапка программы)

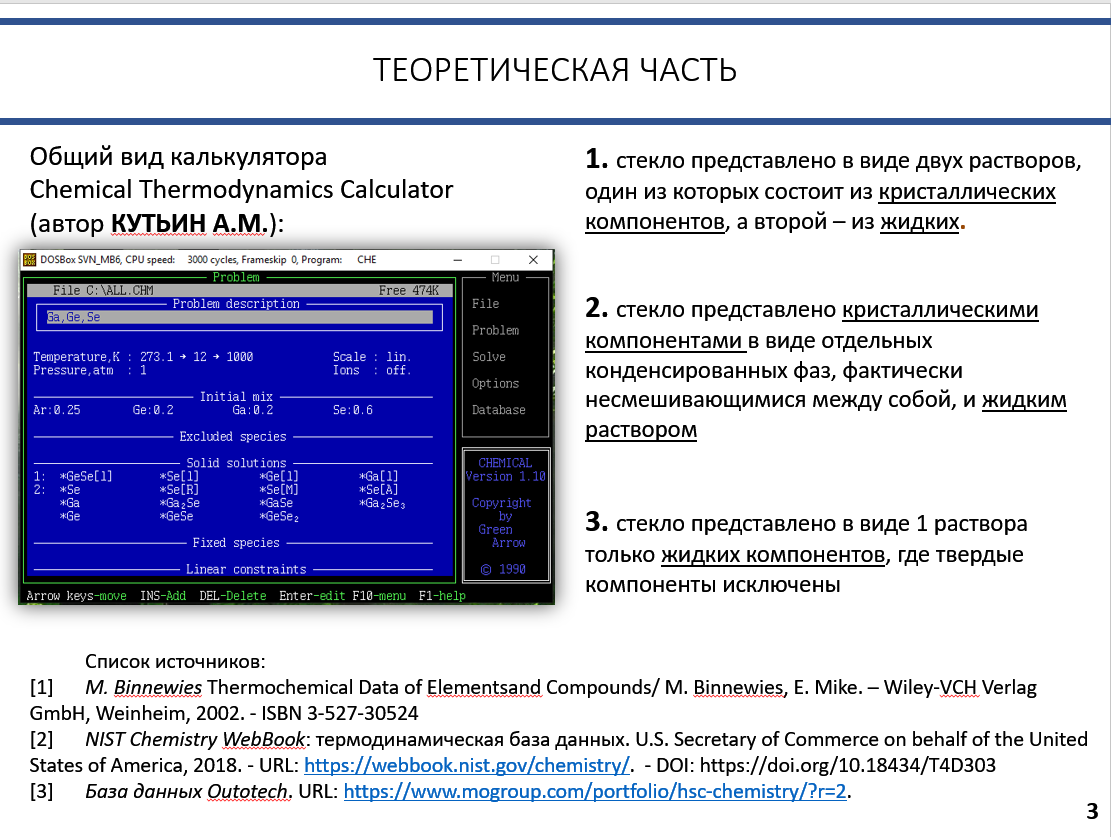
Методика термодинамического моделирования химических и фазовых превращений состоит из 3 вариантов расчета для каждой исследуемой стеклообразующей системы

1. Система представлена в виде двух растворов, один из которых состоит из кристаллических компонентов, а второй – из жидких. (Список)
2. Второй **-** система представлена в виде отдельных фаз кристаллических компонентов, которые фактически не смешиваются между собой, и жидким раствором
3. Третий - система представлена в виде 1 раствора только жидких компонентов, где твердые компоненты исключены

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

(СЛЕД. СЛАЙД)

1. *M.* *Binnewies* Thermochemical Data of Elementsand Compounds/ M. Binnewies, E. Mike. - Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 2002. - ISBN 3-527-30524
2. *NIST Chemistry WebBook*: термодинамическая база данных. U.S. Secretary of Commerce on behalf of the United States of America, 2018. - URL: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>. - DOI: <https://doi.org/10.18434/T4D303>
3. *База данных Outotech.* URL: <https://www.mogroup.com/portfolio/hsc-chemistry/?r=2>.



Фазовые диаграммы бинарных систем Ge-Se Ga-Se

Согласно бинарным фазовым диаграммам возможно образование: Ga, GaSe, Ga2Se3,Se, Ge,GeSe,GeSe2

(Мы работаем с низкими Т поэтому не учитываем эвтектики)

РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА И ДСК СТЕКЛА ДЛЯ СИСТЕМЫ СОСТАВА: Ge20Ga20Se60

На этом и последующих слайдах представлены результаты термодинамического анализа системы состава Ge20Ga20Se60.

Черной жирной линией (Линия ДСК) представлена кривая сигнала ДСК, экзотермический эффект вверх (Стрелочка). 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.

В интервале температур 570-610 К наблюдается расстекловывание, при температуре от 610 – 800 ряд экзотермических эффектов, свыше 800 - плавление

График концентраций (ГРАФИКИ концентраций) представлен из расчета, где стеклообразующая система представлена в виде твердого и жидкого раствора

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).

(СЛЕД. СЛАЙД)

РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА ЭНЕРГИИ ГИББСА ХИМИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТОВ И ИХ СОЕДИНЕНИЙ

По результатам расчета 2, где система представлена жидким раствором и отдельными конденсированными фазами и расчета 3, где исключены твердые компоненты и система представлена жидким раствором, определяются энергии Гиббса компонентов (График 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 2, где система представлена жидким раствором и отдельными конденсированными фазами.

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

(СЛЕД. СЛАЙД)

РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА, ЭНЕРГИИ ГИББСА И ДСК СТЕКЛА ДЛЯ СИСТЕМЫ СОСТАВА: Ge**20**Ga**20**Se**60**

Из данного графика было установлено, что плавление начинается с температуры **780 - 820 К** (область плавления). Разложение GeSe2, образование фазы GaSe и увеличение концентрации Se (КРИВЫЕ концентраций). сигнализирует об этом. Выше данной температуры находится однородный расплав, из которого в результате охлаждения формируется стекло. (дск плавления).

В температурном диапазоне **610-780 К** потенциально образуются согласно графикам энергии Гиббса (График энергии Гиббса) кристаллическая фаза Se. (График энергий Гиббса)

(Привлечение дополнительных иссследований поможет детализировать расчет)

(СЛЕД. СЛАЙД)

РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА И ДСК СТЕКЛА ДЛЯ СИСТЕМЫ СОСТАВА: Ge**30**Ga**10**Se**60**

Для системы состава Ge**30**Ga**10**Se**60**

В интервале температур **570-610 К** наблюдается расстекловывание (График ДСК), при температуре от **610 – 800 К** два экзотермических эффекта, которые обусловлены той же кристаллической фазой, но при иных температурах начала кристаллизации.

А свыше **790К** так же наблюдается плавление

(ОБЛАСТИ температур внизу)

(СЛЕД. СЛАЙД)

РЕЗУЛЬТАТ РАСЧЕТА И ДСК СТЕКЛА ДЛЯ СИСТЕМЫ СОСТАВА: Ge**15**Ga**25**Se**60**

В интервале температур **560-610 К** наблюдается расстекловывание (График ДСК), при температуре от **610 – 770 К** два экзотермических эффекта, которые обусловлены той же кристаллической фазой, но при иных температурах начала кристаллизации.

А свыше **770 К** так же наблюдается плавление

(ОБЛАСТИ температур внизу).

(СЛЕД. СЛАЙД)

Выводы

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

* с позиции ассоциированных растворов проведено моделирование расплава и раствора твёрдых компонентов, определен температурный интервал плавления и стеклования
* путём сопоставления химических потенциалов кристаллических компонентов и экстраполированных в область переохлаждённого расплава предсказана кристаллизация в зависимости от состава стёкол.
* Проведена интерпретация кривых ДСК изученных составов стекол

Таким образом развитием данной работы являетс во превых расширение банка данными о свойствах жидких компонентов: GeSe…

И рассчитанное пересыщение на кристаллизацию каждого из возможных компонентов по разности его химпотенциала в кристаллическом состоянии и в фазе переохлажденного расплава, даст возможность по известным соотношениям определить как скорость зародышеобразования (теория Беккера-Дёринга- Френкеля-Зельдовича)

Во вторых, в экспериментальной части кристаллизация стекол при различных температурных режимах и анализ образующихся фаз, методом РФА