

Dr inż. Alexandra Dobosz

Promotor: dr hab. inż. Tomasz Gancarz, prof. PAN (IMIM PAN)

Tytuł rozprawy: Właściwości termofizyczne stopów z układu Ga-Sn-Zn

Tytuł rozprawy w języku angielskim: Thermophysical Properties of Ga-Sn-Zn Alloys

Słowa kluczowe: Gal; Model Butlera; Ciekłe Metale; Metalurgia; Model Lasu Losowego

Keywords: Gallium; Butler model; Liquid Metals; Metallurgy; Random Forest Model

Charakterystyka pracy w języku polskim

Ciekłe stopy metali zyskują coraz większe znaczenie zarówno w nauce, jak i technologii. W związku z potrzebą znalezienia stopów o niskich temperaturach topnienia, które byłyby nietoksyczne, niereaktywne i możliwie przyjazne dla środowiska, zaproponowano stopy na bazie galu. Doktorat koncentruje się na nowych stopach z trójskładnikowego układu Ga-Sn-Zn. W pracy określono właściwości termofizyczne, takie jak gęstość, lepkość i napięcie powierzchniowe, stosując metodę tygła wyladowczego. Pomiary zostały wykonane w zakresie temperatur 323-873 K (50-600°C). W celu scharakteryzowania całego układu wybrano następujące składy: stopy o stałym stosunku Sn:Zn, 3:1, 1:1 i 3:1 z 0, 25, 50, 75, 85 i 90 at. % dodatkiem galu oraz stopy dwuskładnikowe GaSneut z dodatkami 5.6, 15.0, 34.7, 61.4, 82.7, 93.5 at. % Zn i GaZneut z dodatkami 3.0, 6.1, 16.3, 36.9, 63.7 and 84.1 at.% Sn. Ponadto właściwości termofizyczne zostały zamodelowane przy użyciu różnych modeli opartych na właściwościach termodynamicznych. Skład powierzchni i właściwości strukturalne zostały obliczone przy użyciu modelu przybliżenia quasi-chemicznego. Uzyskano dobrą zgodność między wynikami eksperymentalnymi, a obliczeniami. Zastosowano metodę uczenia maszynowego, w której dane eksperymentalne wykorzystano do trenowania algorytmu lasu losowego w celu przewidywania gęstości, lepkości i napięcia powierzchniowego stopów Ga-Sn-Zn o składach nie badanych w ramach tej pracy. Uzyskane dane, wraz z wynikami otrzymanymi z uczenia maszynowego mogą być wykorzystane w przyszłości do dokładnego dostosowania właściwości ciekłych stopów metali z układu Ga-Sn-Zn do wybranych zastosowań.

The abstract of the thesis (in English)

Liquid metal alloys are gaining more and more importance in science and technology. Following the need to find alloys with low melting points, that would be non-toxic, non-reactive and possibly environmentally friendly, alloys based on gallium have been proposed. This work focuses on new alloys from the ternary Ga-Sn-Zn system. As part of the thesis, the thermophysical properties such as density, viscosity and surface tension have been determined using the discharge crucible method. The measurements have been performed in the temperature range of 323-873 K (50-600°C). In order to characterise the whole system the following compositions have been chosen: alloys with a constant ratio of Sn:Zn, set to be 3:1,

1:1 and 3:1 with 0, 25, 50, 75, 85 and 90 at. % additions of gallium, and binary alloys GaSn_{eut} with 5.6, 15.0, 34.7, 61.4, 82.7, 93.5 at. % of Zn and GaZn_{eut} with 3.0, 6.1, 16.3, 36.9, 63.7 and 84.1 at. % of Sn were measured. Moreover, the thermophysical properties of ternary and binary alloys have been modelled using various models based on thermodynamics. For Ga-Sn, Ga-Zn and Sn-Zn binary subsystems, the structural information were deduced in terms of the microscopic functions. A good agreement between the experimental results and the calculated values was found. A machine learning approach was employed, where the experimental data has been used to train a random forest algorithm in order to predict the density, viscosity and surface tension of Ga-Sn-Zn alloys with compositions not studied as a part of this work. In the future, the obtained data and the machine learning tool can be used in order to fine-tune the properties of liquid Ga-Sn-Zn alloys for particular applications.

Publikacje z zakresu pracy:

1. Dobosz, Alexandra, and Tomasz Gancarz. "Reference data for the density, viscosity, and surface tension of liquid Al–Zn, Ag–Sn, Bi–Sn, Cu–Sn, and Sn–Zn eutectic alloys." *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 47.1 (2018): 013102.
2. Dobosz, Alexandra, and Tomasz Gancarz. "Density, surface tension and viscosity of Ga-Sn eutectic based alloys with Zn additions." *Journal of Molecular Liquids* 264 (2018): 600-606.
3. Dobosz, Alexandra, and Tomasz Gancarz. "Thermophysical properties of Ga-Zn eutectic alloys with Sn additions." *Fluid Phase Equilibria* 474 (2018): 6-13.
4. Dobosz, Alexandra, et al. "Investigation of the surface of Ga–Sn–Zn eutectic alloy by the characterisation of oxide nanofilms obtained by the touch-printing method." *Nanomaterials* 9.2 (2019): 235.
5. Dobosz, Alexandra, Rada Novaković and Tomasz Gancarz. „Liquid metals: thermophysical properties of alloys from the Ga-Sn-Zn system”. *Journal of Molecular Liquids* (2021) – under review