

ISSN 1561-8331 (Print)
ISSN 2524-2342 (Online)
УДК 544.344.015.3
<https://doi.org/10.29235/1561-8331-2021-57-1-15-24>

Поступила в редакцию 24.11.2020
Received 24.11.2020

М. Д. Парфенова, В. П. Воробьева, В. И. Луцык

*Институт физического материаловедения Сибирского отделения
Российской академии наук, Улан-Удэ, Россия*

3D КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ T - x - y ДИАГРАММЫ Ag–Cu–Ni: ВЕРИФИКАЦИЯ РАЗРЕЗОВ В АТЛАСЕ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ ДЛЯ БЕССВИНЦОВЫХ ПРИПОЕВ

Аннотация. Представлена пространственная (трехмерная – 3D) компьютерная модель T - x - y диаграммы системы Ag–Cu–Ni, перспективной для разработки экологически безопасных припоев. Модель построена на основе опубликованных данных по формирующим эту тройную систему бинарным системам, концентрационной проекции поверхностей ликвидуса и четырем изотермическим разрезам. Показано, что фазовая диаграмма состоит из 14 поверхностей и 9 фазовых областей. Адекватность модели подтверждается сравнением изотермических разрезов и проекции ликвидуса.

Ключевые слова: фазовые диаграммы, компьютерное моделирование, бессвинцовые припой, серебро, медь, никель

Для цитирования. Парфенова, М. Д. 3D компьютерная модель T - x - y диаграммы Ag–Cu–Ni: верификация разрезов в атласе фазовых диаграмм для бессвинцовых припоев / М. Д. Парфенова, В. П. Воробьева, В. И. Луцык // Вест. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. хім. навук. – 2021. – Т. 57, № 1. – С. 15–24. <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2021-57-1-15-24>

M. D. Parfenova, V. P. Vorob'eva, V. I. Lutsyk

Institute of Physical Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Ulan-Ude, Russia

3D COMPUTER MODEL OF THE Ag–Cu–Ni T - x - y DIAGRAM: VERIFICATION OF SECTIONS IN THE ATLAS OF PHASE DIAGRAMS FOR LEAD-FREE SOLDERING

Abstract. Spatial (three-dimensional – 3D) computer model of the T - x - y diagram of the Ag – Cu – Ni system, which is promising for the development of environmentally friendly solders, is presented. The model is constructed on the basis of published data on the binary systems forming this ternary system, the concentration projection of the liquidus surfaces, and four isothermal sections. It is shown that the phase diagram (PD) consists of 14 surfaces and 9 phase regions. The adequacy of the model is confirmed by comparing the isothermal sections and the liquidus projection.

Keywords: phase diagrams, computer simulation, lead-free solders, silver, copper, nickel

For citation. Parfenova M. D., Vorob'eva V. P., Lutsyk V. I. 3D computer model of the Ag–Cu–Ni T - x - y diagram: verification of sections in the atlas of phase diagrams for lead-free soldering. *Vestsi Natsyyanal'nei akademii navuk Belarusi. Seryya khimichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Chemical Series*, 2021, vol. 57, no. 1, pp. 15–24 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2021-57-1-15-24>

Введение. Не теряет своей актуальности проблема подбора бессвинцовых сплавов, в которых добавки к олову других металлов (либо отказ и от олова) позволяли бы получать припой, по свойствам не уступающие сплаву свинца с оловом и в то же время удовлетворяющие требованиям экологической безопасности. В рамках Европейского научного фонда были выпущены Атласы – специальные справочники [1–3], в которых аккумулирована информация о фазовых диаграммах тройных систем, сплавы в которых могли бы заменить свинецсодержащий припой в различных приложениях. В этих Атласах информация по каждой фазовой диаграмме сведена к бинарным системам, изображению проекции ликвидуса, таблице невариантных фазовых реакций с участием жидкости и двум-трем изо- и политермическим разрезам.

Чтобы воспользоваться этими сведениями в полной мере, строятся пространственные трехмерные (3D) компьютерные модели T - x - y диаграмм [4–12]. Для расшифровки геометрического строения диаграммы используется схема моно- и невариантных состояний [13]. С помощью схемы формируются контуры всех линейчатых и нелинейчатых поверхностей, включая субсолидус.

Достоверность модели подтверждается отсутствием противоречий между модельными разрезами и литературными данными. Готовая 3D модель дает возможность строить любые другие разрезы, а также выполнять расчеты материальных балансов, прослеживая историю кристаллизации и изменения фазового и конгломератного состава сплава на диаграммах материального баланса [9]. Кроме того, 3D модели эффективно используются для верификации публикуемых фазовых диаграмм [4, 7, 10].

В качестве одного из примеров стоит обратить внимание на фольгу сплава Sn–14In–6,5Zn, рекомендованную для применения в качестве ультранизкотемпературного припоя в электронной промышленности [14]. Этот припой состоит из γ -фазы (Sn_4In) и дисперсных частиц цинка, распределенных однородно в γ -фазе. Компьютерная модель T - x - y диаграммы системы Sn–In–Zn

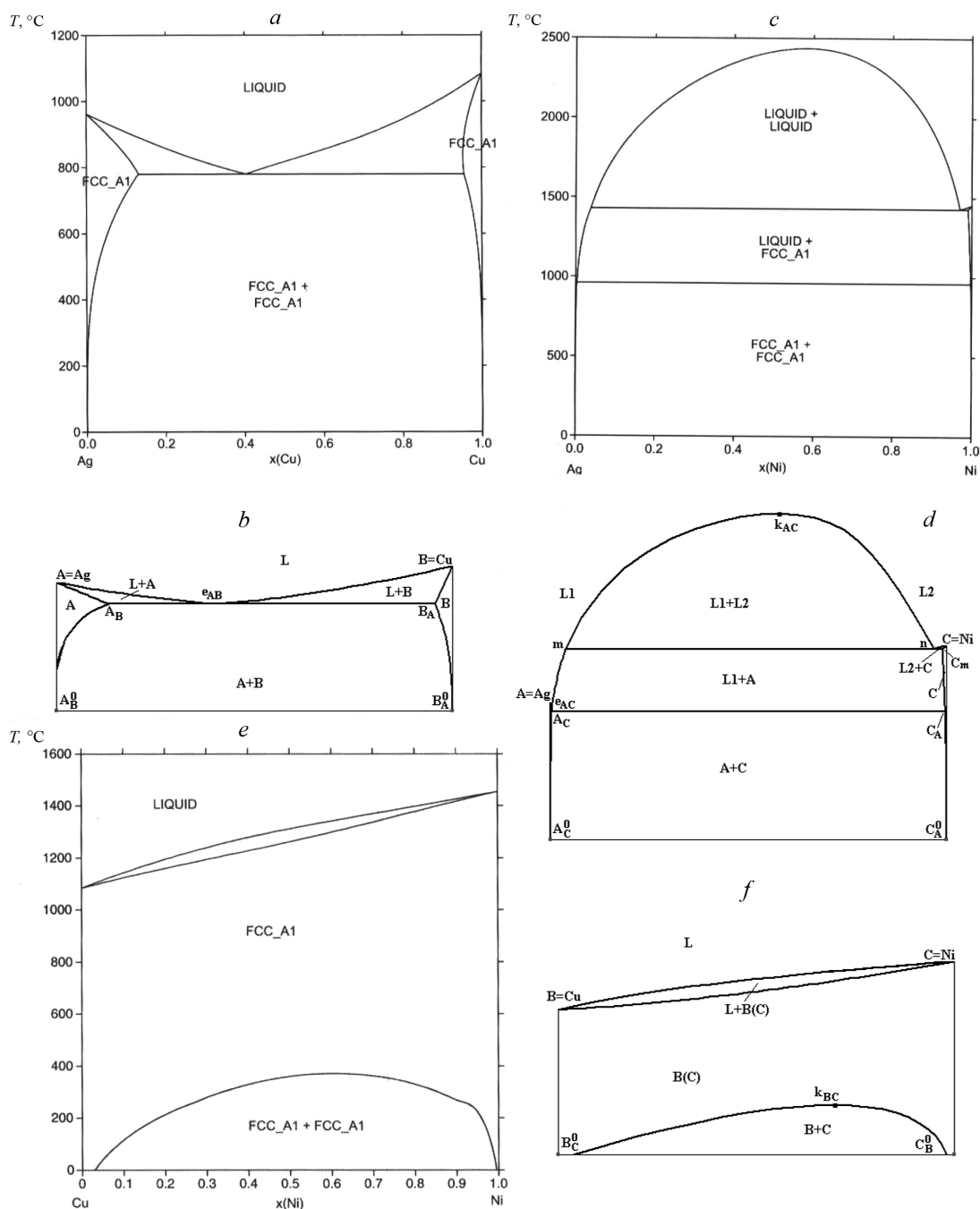


Рис. 1. Бинарные системы Атласа [1] (a, c, e) и 3D модели (b, d, f) T - x - y диаграммы Ag–Cu–Ni (A–B–C)
 Fig. 1. Binary systems of Atlas [1] (a, c, e) and the Ag–Cu–Ni (A–B–C) T - x - y diagram 3D model (b, d, f)

с двумя инконгруэнтно плавящимися соединениями в бинарной системе In–Sn состоит из 85 поверхностей и 37 фазовых областей [15].

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы после анализа исходной информации в виде описания бинарных систем (рис. 1, *a, c, e*), x - y проекции ликвидуса (рис. 2, *a*) и нескольких точек солидуса [16] с учетом представленных в [1] изотермических разрезов при 700 °C (рис. 4, *a*), 795 (рис. 5, *a*), 860 (рис. 6, *a*) и 900 °C (рис. 7, *a*) [17–19] получить графическое (и математическое) описание системы в виде 3D компьютерной модели T - x - y диаграммы Ag–Cu–Ni (рис. 3).

Обычно для построения 3D модели нужно пройти три этапа построения: 1) схема моно- и неинвариантных состояний в табличном и графическом видах [6]; 2) прототип фазовой диа-

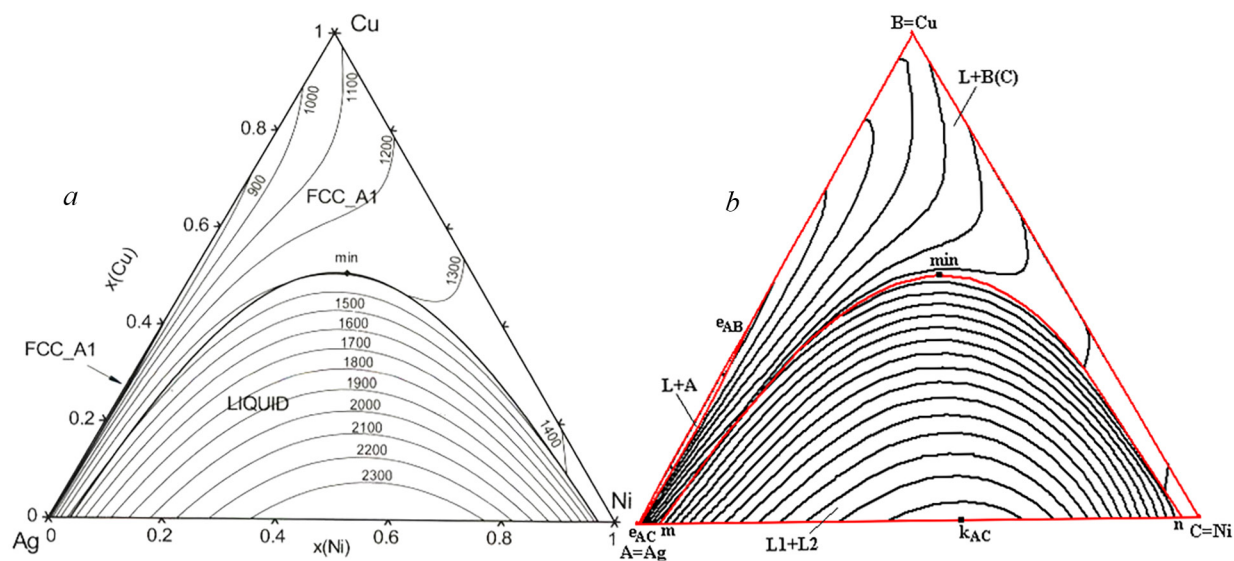


Рис. 2. Проекция ликвидуса Атласа [1] (*a*) и 3D модели (*b*) (на рисунке Атласа фазовую область первичной кристаллизации серебра следовало бы подписать как LIQUID + FCC_A1, а не FCC_A1, а область расслаивания, как LIQUID1 + LIQUID2, а не LIQUID)

Fig. 2. Projections of the Atlas liquidus [1] (*a*) and 3D model (*b*) (in the Atlas figure the phase region of the primary crystallization of silver should be named as LIQUID + FCC_A1, not as FCC_A1, and the immiscibility area as LIQUID1 + LIQUID2, not as LIQUID)

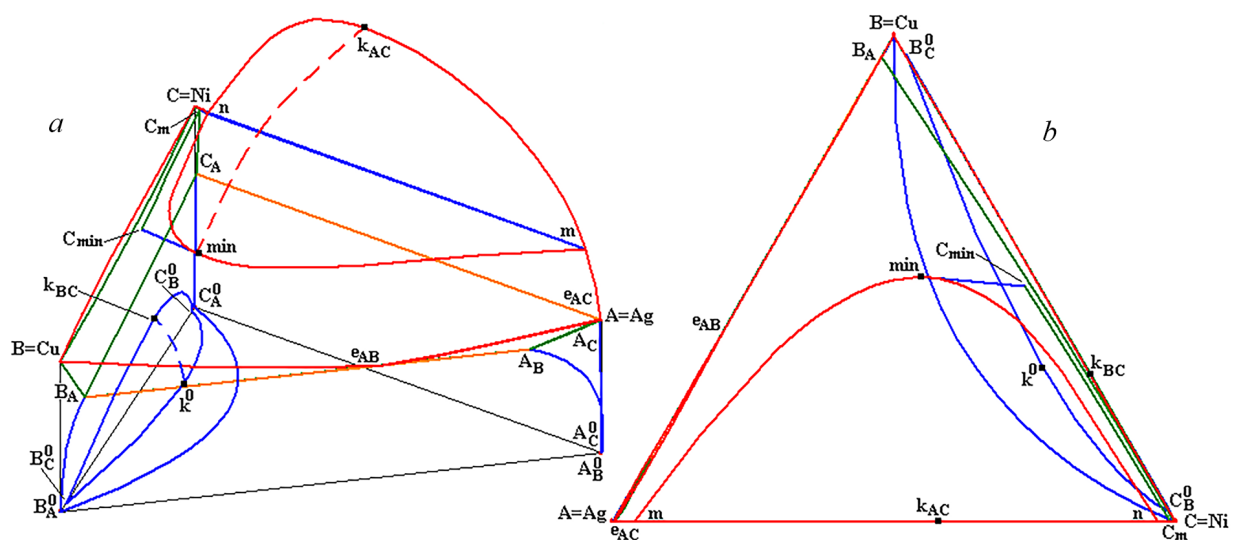


Рис. 3. 3D модель T - x - y диаграммы Ag–Cu–Ni (*a*) и x - y проекция (*b*)

Fig. 3. 3D model of the Ag–Cu–Ni T - x - y diagram (*a*) and its x - y projection (*b*)

граммы; 3) T - x - y диаграмма реальной системы. Однако для системы Ag–Cu–Ni (A–B–C)¹ первые два этапа можно пропустить, так как неинвариантных реакций в тройной системе не зафиксировано [1].

Бинарные системы Ag–Cu (A–B) (рис. 1, *a*) и Ag–Ni (A–C) (рис. 1, *c*) имеют диаграммы плавкости эвтектического типа (рис. 1, *a*), в которых эвтектические реакции $L \rightarrow Ag+Cu$ или $L \rightarrow A+B$ и $L \rightarrow Ag+Ni$ или $L \rightarrow A+C$ приводят к моновариантному выделению по эвтектической схеме серебра (A) и твердого раствора Cu(Ni) или B(C): $L \rightarrow Ag+Cu(Ni)$ или $L \rightarrow A+B(C)$ (рис. 2). Моновариантному превращению соответствует на ликвидусе линия, связывающая бинарные эвтектики e_{AB} и e_{AC} (рис. 2).

Кроме эвтектики, в бинарной системе Ag–Ni (A–C) имеет место расслаивание жидкости L1+L2 (рис. 1, *c*). В тройной системе расслаивание жидкости происходит под куполом, формируемым бинарной кривой с максимумом k_{AC} и минимальной тройной точкой min (рис. 2, *b*), по монотектической реакции $L1 \rightarrow L2+Cu(Ni)$ или $L1 \rightarrow L2+B(C)$.

Бинарная система Cu–Ni (B–C) представляет собой непрерывные ряды твердых растворов Cu(Ni) или B(C) и их распад в твердом состоянии (рис. 1, *e*). Еще один купол в тройной системе соответствует распаду твердого раствора Cu(Ni) или B(C) на Cu (B) и Ni (C) (рис. 3, *a*). Его задает кривая распада $B^0_C k_{BC} C^0_B$ в бинарной системе Cu–Ni (B–C).

Методы. После анализа исходных данных, основанных на информации из Атласа [1], координаты базовых точек сводятся в табл. 1 и можно переходить к построению собственно 3D компьютерной модели фазовой диаграммы. Очевидно, что T - x - y диаграмма Ag–Cu–Ni (A–B–C) состоит из двух поверхностей ликвидуса (q – liquidus), соответствующих началу первичной кристаллизации Ag (A) и твердого раствора Cu(Ni) или B(C), а также купола расслаивания (i – immiscibility) жидкости (табл. 2) Каждой поверхности ликвидуса соответствует сопряженная ей поверхность солидуса (s – solidus). Здесь стоит отметить, что «дуге» n-min-m на пересечении купола расслаивания с поверхностью ликвидуса твердого раствора на сопряженной поверхности солидуса соответствует складка $C_m C_{min}$ (данная проблема подробно обсуждается в [12]). Кроме двух поверхностей сольвуса (v – solvus), одна из которых вырождена в ребро Ni (C), на T - x - y диаграмме в субсолидусе находится купол распада твердого раствора меди и никеля $i_{B(C)}$.

Таблица 1. Координаты (составы z_1, z_2, z_3 в мольных долях и температура в °C) базовых точек (рис. 3) в соответствии с температурным рядом $k_{AC} > C > m(n) > min > B > A > e_{AC} > e_{AB} > k_{BC}$

Table 1. Coordinates (concentrations z_1, z_2, z_3 in mole fractions and temperature T in °C) of base points (Fig. 3) in accordance with the temperature row $k_{AC} > C > m(n) > min > B > A > e_{AC} > e_{AB} > k_{BC}$

№	Точка	z_1	z_2	z_3	T	№	Точка	z_1	z_2	z_3	T
1	A	1	0	0	961,8	13	e_{AB}	0,597	0,433	0	779,9
2	B	0	1	0	1084,6	14	A_B	0,869	0,131	0	779,9
3	C	0	0	0	1455,1	15	B_A	0,045	0,955	0	779,9
4	e_{AC}	0,997	0	0,003	961,1	16	m	0,962	0	0,038	1430,3
5	A_C	0,997	0	0,003	961,1	17	n	0,03	0	0,97	1430,3
6	C_A	0,003	0	0,997	961,1	18	C_m	0,01	0	0,99	1430,3
7	k_{AC}	0,42	0	0,58	2447,2	19	k_{BC}	0	0,305	0,695	371
8	min	0,184	0,480	0,336	1300	20	k^0	0,077	0,318	0,605	0
9	C_{min}	0,027	0,484	0,489	1300	21	B^0_A	0	1	0	0
10	A^0_B	1	0	0	0	22	C^0_A	0	0	1	0
11	A^0_C	1	0	0	0	23	C^0_B	0	0,02	0,98	0
12	B^0_C	0	0,96	0,04	0						

¹ При построении 3D модели производится переобозначение исходных компонентов: Ag обозначается буквой A, Cu – B, Ni – C, что ведет к обозначению соответствующих элементов диаграммы, например, эвтектика в системе A–B получает обозначение e_{AB} .

Т а б л и ц а 2. **Поверхности**
T a b l e 2. **Surfaces**

№	Обозначение поверхности	Контур поверхности	№	Обозначение поверхности	Контур поверхности
<i>Ликвидус и солидус</i>					
1	q_A	$A e_{AB} e_{AC}$	3	s_A	$A A_B A_C$
2	$q_{B(C)}$	$B e_{AB} e_{AC} C n \min m$	4	$s_{B(C)}$	$B B_A C_A C C_m C_{\min}$
<i>Сольвус</i>					
5	$v_{A B(C)}$	$A_B A_C A^0 C A^0_B$	6	$v_{B(C) A}$	$B_A C_A C^0_A B^0_A$
<i>Купол расщепления жидкости (i) и купол распада твердого раствора B(C)</i>					
7	i	$k_{AC} m \min n$	8	$i_{B(C)}$	$k_{BC} B^0_C k_{BC} C^0_B$
<i>Линейчатые поверхности</i>					
9	$q^r_{A B(C)}$	$e_{AB} e_{AC} A_C A_B$	12	$q^r_{L1 B(C)}$	$m \min C_{\min} C_m$
10	$q^r_{B(C) A}$	$e_{AB} e_{AC} C_A B_A$	13	$q^r_{L2 B(C)}$	$n \min C_{\min} C_m$
11	$s^r_{A B(C)}$	$A_B A_C C_A B_A$	14	s^r_{L1L2}	$m \min n$

Из двух триад линейчатых (*r* – ruled surfaces) поверхностей, ограничивающих две трехфазные области (табл. 3), одну задает моновариантная линия $e_{AB}e_{AC}$ на ликвидусе и сопряженные с ней две линии на солидусе, которые соответствуют эвтектической реакции $L \rightarrow Ag+Cu(Ni)$ или $L \rightarrow A+B(C)$. Вторая моновариантная реакция – расщепление жидкости в присутствии твердого раствора: $L1 \rightarrow L2+Cu(Ni)$ или $L1 \rightarrow L2+B(C)$. Ограничивают эту трехфазную область три линейчатые поверхности с направляющими $m\text{-min}$, $n\text{-min}$, $C_m C_{\min}$.

Т а б л и ц а 3. **Фазовые области***
T a b l e 3. **Phase regions**

№	Фазовая область	Ограничивающие поверхности	№	Фазовая область	Ограничивающие поверхности
1	L+A	$q_A, s_A, q^r_{A B(C)}$	5	A	$s_A, v_{A B(C)}$
2	L+B(C)	$q_{B(C)}, s_{B(C)}, s^r_{L1L2}, q^r_{B(C) A}$	6	B(C)	$s_{B(C)}, v_{B(C) A}, i_{B(C)}$
3	L+A+B(C)	$q^r_{A B(C)}, q^r_{B(C) A}, s^r_{A B(C)}$	7	A+B(C)	$v_{A B(C)}, v_{B(C) A}, s^r_{A B(C)}$
4	L1+L2+B(C)	$q^r_{L1 B(C)}, q^r_{L2 B(C)}, s^r_{L1L2}$	8	L1+L2	i, s^r_{L1L2}

*Девятая область B+C находится под куполом распада твердого раствора $i_{B(C)}$ (поверхность номер 8 в табл. 2).

Результаты и их обсуждение. Таким образом, *T*–*x*–*y* диаграмма Ag–Cu–Ni (A–B–C) состоит из девяти фазовых областей (табл. 3), границами которых служат 14 поверхностей: по две поверхности ликвидуса, солидуса и сольвуса, два купола распада (жидкого и твердого растворов) и две триады линейчатых поверхностей (табл. 2). Строится 3D модель по 23 базовым точкам (табл. 1) с уточнением кривизны линий и поверхностей (рис. 3). Достоверность модели подтверждается сравнением ее проекций (рис. 2) и разрезов (рис. 4–7) с аналогичными рисунками из Атласа [1].

В дальнейшем достоверность полученной 3D модели можно оценить другими разрезами, например, показанными в [20]: изотермическими 800 и 900 °C (совпадающим с показанными на рис. 7), а также 1250, 1300 и 1400 °C и политермическими, построенными при постоянном содержании 0,1, 0,2 и 0,5 мас.% меди и никеля.

Нановарианты *T*–*x* диаграмм двойных систем. В литературе обсуждаются различные варианты фазовых диаграмм бинарных систем с наночастицами [21]. В частности, предсказано термодинамическими расчетами и моделированием из первых принципов, а затем подтверждено экспериментом, подавление образования Sb_2Sn_3 для наночастиц с размером диаметра меньше 80 нм [22]. Гораздо чаще, если не повсеместно, отмечается значительное понижение температур плавления компонентов и эвтектик и рост растворимости в гомогенных фазах.

Для *T*–*x* диаграммы Ag–Cu [23–25] выявлено также влияние размеров и формы наночастиц на смещение эвтектического состава в направлении обогащения его серебром. В системе Cu–Ni

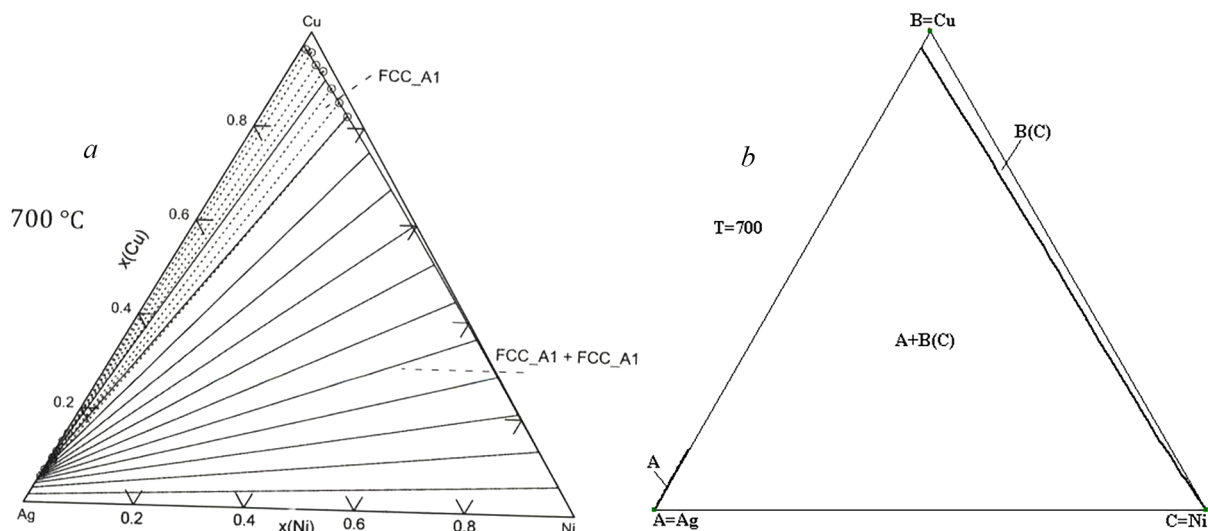


Рис. 4. Изотермический разрез 700 °C: из Атласа [1] (a), 3D модели (b)

Fig. 4. Isothermal section at 700 °C: Atlas [1] (a), 3D model (b)

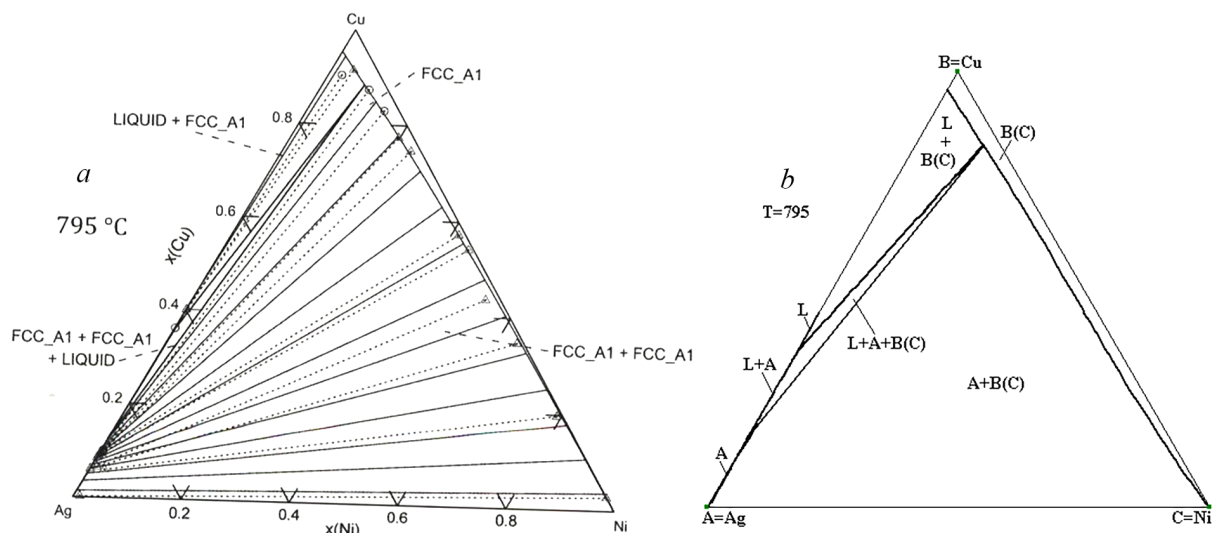


Рис. 5. Изотермический разрез 795 °C: из Атласа [1] (a), 3D модели (b)

Fig. 5. Isothermal section at 795 °C: Atlas [1] (a), 3D model (b)

границы двухфазной области $L+Cu(Ni)$ понижаются на 30° и на 60° при радиусах наночастиц 10 и 5 нм [26]. В системе $Ag-Ni$ еще в 2007 г. [27] были зафиксированы кластеры со структурой «ядро–оболочка» (ядро и оболочка обогащены соответственно атомами никеля и серебра), а в 2012 г. [28–29] наличие структур «ядро–оболочка» ставится под сомнение, но во всем концентрационном интервале зафиксированы непрерывные ряды твердых растворов (в отличие от двухфазной области в традиционной диаграмме (см. рис. 1, *c* и *d* данной статьи)).

В связи с этим разработка компьютерных моделей фазовых диаграмм для различных вариантов метастабильности в тройных и более сложных системах становится все более актуальной задачей.

Заключение. По опубликованным экспериментальным и расчетным данным (бинарные системы, x - y проекция ликвидуса, таблица невариантных реакций с участием жидкой фазы, четыре изотермических разреза) построена пространственная компьютерная модель T - x - y диаграммы $Ag-Cu-Ni$. Установлено, что она состоит из 14 поверхностей и 9 фазовых областей и может использоваться как источник информации о взаимодействии рассмотренных металлов в различных приложениях.

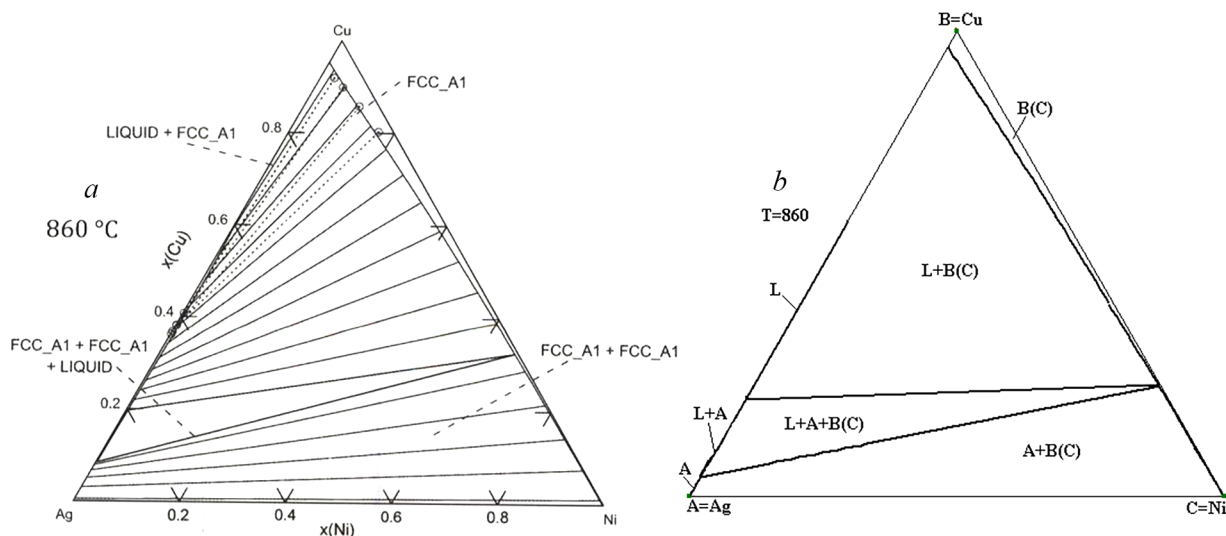


Рис. 6. Изотермический разрез 860 °C: из Атласа [1] (a), 3D модели (b)

Fig. 6. Isothermal section at 860 °C: Atlas [1] (a), 3D model (b)

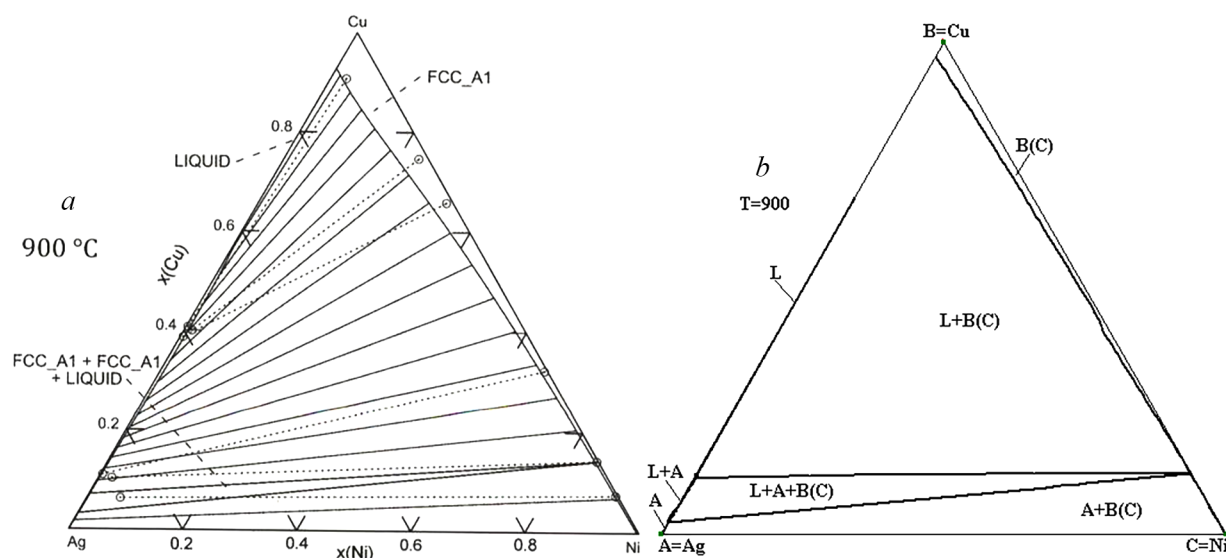


Рис. 7. Изотермический разрез 900 °C: из Атласа [1] (a), 3D модели (b)

Fig. 7. Isothermal section at 900 °C: Atlas [1] (a), 3D model (b)

Благодарности. Исследование выполнено в соответствии с госзадаaniem Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук на 2017–2020 гг. (проект № 0336-2019-0008).

Acknowledgements. This work was been performed under the program of Institute of Physical Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (project 0336-2019-0008).

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Atlas of Phase Diagrams for Lead-Free Soldering compiled by: COST 531 /A. Dinsdale [et al.], European Science Foundation. – Brno, Czech Republic: Vydavatelstvi Knihar, 2008. – Vol. 1. – 289 p.
2. Handbook of High-Temperature Lead-Free Solders: Atlas of Phase Diagrams compiled by: COST MP0602/A. Dinsdale [et al.]. – 2012. – Vol. 1. – 218 p.
3. Handbook of High-Temperature Lead-Free Solders: Materials Properties: COST Action MP0602 / ed. by A. Watson. – 2012. – Vol. 2. – 145 p.

4. Lutsyk, V. I. Three-Dimensional Model of Phase Diagram of Au-Bi-Sb System for Clarification of Thermodynamic Calculations / V. I. Lutsyk, V. P. Vorob'eva // *Russian Journal of Physical Chemistry*. – 2015. – Vol. 89, N 10. – P. 1715–1722. <https://doi.org/10.1134/S0036024415100192>
5. Lutsyk, V. I. Determining the Conditions for Changes of the Three-Phase Reaction Type in a V-Zr-Cr System / V. I. Lutsyk, V. P. Vorob'eva, S. Ya. Shodorova // *Russian Journal of Physical Chemistry*. – 2015. – Vol. 89, N 13. – P. 2331–2338. <https://doi.org/10.1134/S0036024415130245>
6. Lutsyk, V. I. 3D Model of the T-x-y Diagram of the Bi-In-Sn System for Designing Microstructure of Alloys / V. I. Lutsyk, V. P. Vorob'eva // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. – 2016. – Vol. 61, N 2. – P. 188–207. <https://doi.org/10.1134/S0036023616020121>
7. Lutsyk, V. I. 3D Verification of the T-x-y Diagram of the Ag-Au-Bi System Using a 3D Computer Model / V. I. Lutsyk, V. P. Vorob'eva // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. – 2016. – Vol. 61, N 7. – P. 858–866. <https://doi.org/10.1134/S0036023616070123>
8. Lutsyk, V. I. 3D Computer Models of the T-x-y Diagrams, Forming the Fe-Ni-Co-FeS-NiS-CoS Subsystem / V. I. Lutsyk, V. P. Vorob'eva // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. – 2017. – Vol. 91, N 13. – P. 2593–2599. <https://doi.org/10.1134/S0036024417130131>
9. Lutsyk, V. Concentration Fields of the Ternary Systems and Trajectory of Phases in T-x-y Diagrams / V. Lutsyk, A. Zelenaya // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2017. – Vol. 790, Is. 1. – P. 012020. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/790/1/012020>
10. Lutsyk, V. I. Verification of Phase Diagrams by Three-Dimension Computer Models / V. I. Lutsyk, V. P. Vorob'eva // *Modern Chemistry & Applications*. – 2017. – Vol. 5, N 2. – P. 5–215. <https://doi.org/10.4172/23296798.1000215>
11. Lutsyk, V. I. 3D Computer Models of the Ag-Sb-Sn and MgO-Al₂O₃-SiO₂ T-x-y Diagrams / V. I. Lutsyk, V. P. Vorob'eva, A. Zelenaya // *Acta Physica Polonica A*. – 2018. – Vol. 133, N 4. – P. 763–766. <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.133.763>
12. Lutsyk, V. I. 3D Computer Model of the Ni-Cu-NiS-Cu₂S Subsystem T-x-y Diagram above 575 °C / V. I. Lutsyk, V. P. Vorob'eva, A. Zelenaya // *Russian Journal of Physical Chemistry*. – 2019. – Vol. 93, N 13. – P. 2593–2599. <https://doi.org/10.1134/S0036024419130156>
13. Lutsyk, V. I. Computer Models of Eutectic Type T-x-y Diagrams with Allotropy. Two Inner Liquidus Fields of Two Low-Temperature Modifications of the Same Component / V. I. Lutsyk, V. P. Vorob'eva // *Journal of Thermal Analysis & Calorimetry*. – 2010. – Vol. 101, N 1. – P. 25–31. <https://doi.org/10.1007/s10973-010-0855-0>
14. Структура и свойства быстрозатвердевающей фольги сплава Sn – 14 ат.% In – 6,5 ат.% Zn / В. Г. Шепелевич [и др.] // *Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук*. – 2020. – Т. 65, № 3. – С. 292–298. <https://doi.org/10.29235/1561-8358-2020-65-3-292-298>
15. 3D модель T-x-y диаграммы In-Sn-Zn для конструирования микроструктуры сплавов / В. П. Воробьева [и др.] // *Вестник НовГУ*. – 2015. – № 6(89). – С. 67–74.
16. de Cesaris, P. Sui sali di Roussin / P. de Cesaris // *Gazzetta chimica Italiana*. – 1908. – Vol. 38. – P. 285–299 (quoted [1]).
17. Guertler W., Bergmann A. Z. *Metallkde*. – 1933. – Vol. 25. – P. 53–57 (quoted [1]).
18. Siewert, T. A. Recent Look at Ag-Cu-Ni System / T. A. Siewert, R. W. Heinen // *Metallurgical Transactions A*. – 1977. – Vol. 8A, N 3. – P. 515–518. <https://doi.org/10.1007/bf02661766>
19. Luo, H.-T. Phase equilibria of the ternary Ag-Cu-Ni system and the interfacial reactions in the Ag-Cu/Ni couples / H.-T. Luo, S.-W. Chen // *J. Mater. Sci.* – 1996. – Vol. 31. – P. 5059–5067. <https://doi.org/10.1007/bf00355906>
20. Thermodynamic Assessment of the Ag-Ni Binary and Ag-Cu-Ni Ternary Systems / X. J. Liu [et al.] // *Journal of Electronic Materials*. – 2008. – Vol. 37, N 2. – P. 210–217. <https://doi.org/10.1007/s11664-007-0315-1>
21. Raghavan, V. On Nanomaterials and Phase Diagrams / V. Raghavan // *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. – 2015. – Vol. 36. – P. 89–91. <https://doi.org/10.1007/s11669-015-0361-y>
22. The Theoretical and Experimental Study of the Sb-Sn Nano-Alloys / A. Kroupa [et al.] // *Calphad*. – 2019. – Vol. 64. – P. 90–96. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2018.11.004>
23. Hajra, J. P. Thermodynamics and Phase Equilibria Involving Nano Phases in the Cu-Ag System / J. P. Hajra, S. Acharya // *J. Nanosci Nanotechnol*. – 2004. – N 4(7). – P. 899–906. <https://doi.org/10.1166/jnn.2004.088>
24. Garzel, G. Reassessment of the Ag-Cu Phase Diagram for Nanosystems Including Particle Size and Shape Effect / G. Garzel, J. Janczak-Rusch, L. Zabdyr // *Calphad*. – 2012. – Vol. 36. – P. 52–56. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2011.11.005>
25. Jabbareh, M. A. Thermodynamic Modeling of Ag-Cu Nanoalloy Phase Diagram / M. A. Jabbareh, F. Monji // *Calphad*. – 2018. – Vol. 60. – P. 208–213. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2018.01.004>
26. Cu-Ni Nanoalloy Phase Diagram – Prediction and Experiment / J. Sopousek [et al.] // *Calphad*. – 2014. – Vol. 45. – P. 33–39. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2013.11.004>
27. Size and Composition Dependence in the Optical Properties of Mixed (Transition Metal/Noble Metal) Embedded Clusters / M. Gaudry [et al.] // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 67, Iss. 15. – P. 155409. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.155409>
28. Mundotiya, B. M. Ag-Ni Nanoparticles: Synthesis and Phase Stability / B. M. Mundotiya, C. Srivastava // *Electrochemical and Solid-State Letters*. – 2012. – N 15(5). – P. K41–K44. <https://doi.org/10.1149/2.esl120008>
29. Srivastava, C. Size and Solid Solubility in Electrodeposited Ag-Ni Nanoparticles / C. Srivastava, B. M. Mundotiya // *Materials Science Forum*. – 2012. – Vol. 736. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.736.21>

References

- Dinsdale A., Watson A., Kroupa A., Vřešťál J., Zemanová A., Vizdal J. *Atlas of Phase Diagrams for Lead-Free Soldering. COST 531. Vol. 1*. Brno, Czech Republic: Vydavatelství KNIHAR, 2008. 289 p.
- Dinsdale A., Kroupa A., Watson A., Vřešťál J., Zemanová A., Brož P. *Handbook of High-Temperature Lead-Free Solders: Atlas of Phase Diagrams. COST MP0602. Vol. 1*. Brno, Česká republika: COST office, Brussels, Belgium, 2012. 218 pp.
- Watson A. (ed.) *Handbook of High-Temperature Lead-Free Solders: Materials Properties. COST Action MP0602. Vol. 2*. Brno, Česká republika: COST office, Brussels, Belgium, 2012. 145 pp.
- Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P. Three-Dimensional Model of Phase Diagram of Au–Bi–Sb System for Clarification of Thermodynamic Calculations. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 2015, vol. 89, no. 10, pp. 1715–1722. <https://doi.org/10.1134/S0036024415100192>
- Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P., Shodorova S. Ya. Determining the Conditions for Changes of the Three-Phase Reaction Type in a V–Zr–Cr System. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 2015, vol. 89, no. 13, pp. 2331–2338. <https://doi.org/10.1134/S0036024415130245>
- Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P. 3D Model of the T–x–y Diagram of the Bi–In–Sn System for Designing Microstructure of Alloys. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2016, vol. 61, no. 2, pp. 188–207. <https://doi.org/10.1134/S0036023616020121>
- Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P. 3D Verification of the T–x–y Diagram of the Ag–Au–Bi System Using a 3D Computer Model. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 2016, vol. 61, no. 7, pp. 858–866. <https://doi.org/10.1134/S0036023616070123>
- Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P. 3D Computer Models of the T–x–y Diagrams, Forming the Fe–Ni–Co–FeS–NiS–CoS Subsystem. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2017, vol. 91, no. 13, pp. 2593–2599. <https://doi.org/10.1134/S0036024417130131>
- Lutsyk V., Zelenaya A. Concentration Fields of the Ternary Systems and Trajectory of Phases in T–x–y Diagrams. *Journal of Physics: Conference Series*, 2017, vol. 790, is. 1, pp. 012020. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/790/1/012020>
- Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P. Verification of Phase Diagrams by Three-Dimension Computer Models. *Modern Chemistry & Applications*, 2017, vol. 5, no. 2, pp. 215. <https://doi.org/10.4172/2329-6798.1000215>
- Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P., Zelenaya A. E. 3D Computer Models of the Ag–Sb–Sn and MgO–Al₂O₃–SiO₂ T–x–y Diagrams. *Acta Physica Polonica A*, 2018, vol. 133, no. 4, pp. 763–766. <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.133.763>
- Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P., Zelenaya A. E. 3D Computer Model of the Ni–Cu–NiS–Cu₂S Subsystem T–x–y Diagram above 575 °C. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 2019, vol. 93, no. 13, pp. 2593–2599. <https://doi.org/10.1134/S0036024419130156>
- Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P. Computer Models of Eutectic Type T–x–y Diagrams with Allotropy. Two Inner Liquidus Fields of Two Low-Temperature Modifications of the Same Component. *Journal of Thermal Analysis & Calorimetry*, 2010, vol. 101, no. 1, pp. 25–31. <https://doi.org/10.1007/s10973-010-0855-0>
- Shepelevich V. G., Guskova O. V., Guskova S. V., Metto E. S. Structure and Properties of Rapidly Solidifying Foils Sn – 14 at.% In – 6.5 at.% Zn. *Vestsi Natsyyanal'nai akademii navuk Belarusi. Seryya fizika-technichnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physical-technical series*, 2020, vol. 65, no. 3, pp. 292–298 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8358-2020-65-3-292-298>
- Vorob'eva V. P., Lutsyk V. I., Shodorova S. Ya., Nasrudin E. R. 3D Model of the In–Sn–Zn T–x–y Diagram for Alloys Microstructure Design. *Vestnik NovGU* [Bulletin of Novgorod State University], 2015, no. 6(89), pp. 67–74 (in Russian).
- de Cesaris P. Sui sali di Roussin. *Gazzetta chimica Italiana*, 1908, vol. 38, pp. 285–299 (quoted [1]).
- Guertler W., Bergmann A. Z. *Metallkunde*, 1933, vol. 25, pp. 53–57 (quoted [1]).
- Siewert T. A., Heinen R. W. Recent Look at Ag–Cu–Ni System. *Metallurgical Transactions A*, 1977, vol. 8A, no. 3, pp. 515–518. <https://doi.org/10.1007/bf02661766>
- Luo H.-T., Chen S.-W. Phase equilibria of the ternary Ag–Cu–Ni system and the interfacial reactions in the Ag–Cu/Ni couples. *Journal of Materials Science*, 1996, vol. 31, p. 5059–5067. <https://doi.org/10.1007/bf00355906>
- Liu X.J., Gao F., Wang C.P., Ishida K. Thermodynamic Assessment of the Ag–Ni Binary and Ag–Cu–Ni Ternary Systems. *Journal of Electronic Materials*, 2008, vol. 37, no. 2, pp. 210–217. <https://doi.org/10.1007/s11664-007-0315-1>
- Raghavan V. On Nanomaterials and Phase Diagrams. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 2015, vol. 36, pp. 89–91. <https://doi.org/10.1007/s11669-015-0361-y>
- Kroupa A., Vykoukal V., Káňaa T., Zemanová A., Pinkas J., Šob M. The Theoretical and Experimental Study of the Sb–Sn Nano-Alloys. *Calphad*, 2019, vol. 64, pp. 90–96. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2018.11.004>
- Hajra J. P., Acharya S. Thermodynamics and Phase Equilibria Involving Nano Phases in the Cu–Ag System. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 2004, vol. 4, no. 7, pp. 899–906. <https://doi.org/10.1166/jnn.2004.088>
- Garzel G., Janczak-Rusch J., Zabdyr L. Reassessment of the Ag–Cu Phase Diagram for Nanosystems Including Particle Size and Shape Effect. *Calphad*, 2012, vol. 36, pp. 52–56. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2011.11.005>
- Jabbareh M. A., Monji F. Thermodynamic Modeling of Ag–Cu Nanoalloy Phase Diagram. *Calphad*, 2018, vol. 60, pp. 208–213. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2018.01.004>
- Sopousek J., Vrestal J., Pinkas J., Broz P., Bursik J., Styskalik A., Skoda D., Zobac O., Lee J. Cu–Ni Nanoalloy Phase Diagram – Prediction and Experiment. *Calphad*, 2014, vol. 45, pp. 33–39. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2013.11.004>
- Gaudry M., Cottancin E., Pellarin M., Lerme J., Arnaud L., Huntzinger J. R., Vialle J. L., Broyer M., Rousset J. L., Treilleux M., Melinon P. Size and Composition Dependence in the Optical Properties of Mixed (Transition Metal/Noble Metal) Embedded Clusters. *Physical Review B*, 2003, vol. 67, iss. 15, 155409. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.155409>
- Mundotiya B. M., Srivastava C. Ag–Ni Nanoparticles: Synthesis and Phase Stability. *Electrochemical and Solid-State Letters*, 2012, vol. 15, no. 5, pp. K41–K44. <https://doi.org/10.1149/2.esl120008>
- Srivastava C., Mundotiya B. M. Size and Solid Solubility in Electrodeposited Ag–Ni Nanoparticles. *Materials Science Forum*, 2012, vol. 736. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.736.21>

Информация об авторах

Парфенова Мария Дмитриевна – аспирант. Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ул. Сахьяновой 6, Улан-Удэ, Республика Бурятия, Россия). E-mail: krygentul@gmail.com

Воробьева Вера Павловна – д-р физ.-мат. наук, доцент, вед. науч. сотрудник. Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ул. Сахьяновой 6, Улан-Удэ, Республика Бурятия, Россия). E-mail: vvorobjeva@mail.ru

Луцук Василий Иванович – д-р хим. наук, профессор, зав. сектором. Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ул. Сахьяновой 6, Улан-Удэ, Республика Бурятия, Россия). E-mail: vluts@ipms.bsnet.ru

Information about the authors

Maria D. Parfenova – Ph. D. student. Institute of Physical Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (6, Sakhyanova Str., Ulan-Ude, Republic of Buryatia, Russia). E-mail: krygentul@gmail.com

Vera P. Vorob'eva – D. Sc. (Physics-Mathematics), Associate Professor, Leading Researcher. Institute of Physical Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (6, Sakhyanova Str., Ulan-Ude, Republic of Buryatia, Russia). E-mail: vvorobjeva@mail.ru

Vasily I. Lutsyk – D. Sc. (Chemistry), Professor, Head of the Computer-aided Materials Design Sector. Institute of Physical Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (6, Sakhyanova Str., Ulan-Ude, Republic of Buryatia, Russia). E-mail: vluts@ipms.bsnet.ru