

**Важнейшие научные результаты:**

1. Отработан алгоритм сборки пространственной модели ФД: пространственная схема моно- и нонвариантных реакций, расширяющая возможности традиционной таблицы Шейла; согласование экспериментальных данных и термодинамических расчетов для замыкания контуров нелинейчатых поверхностей; содержательное обозначение всех геометрических элементов.

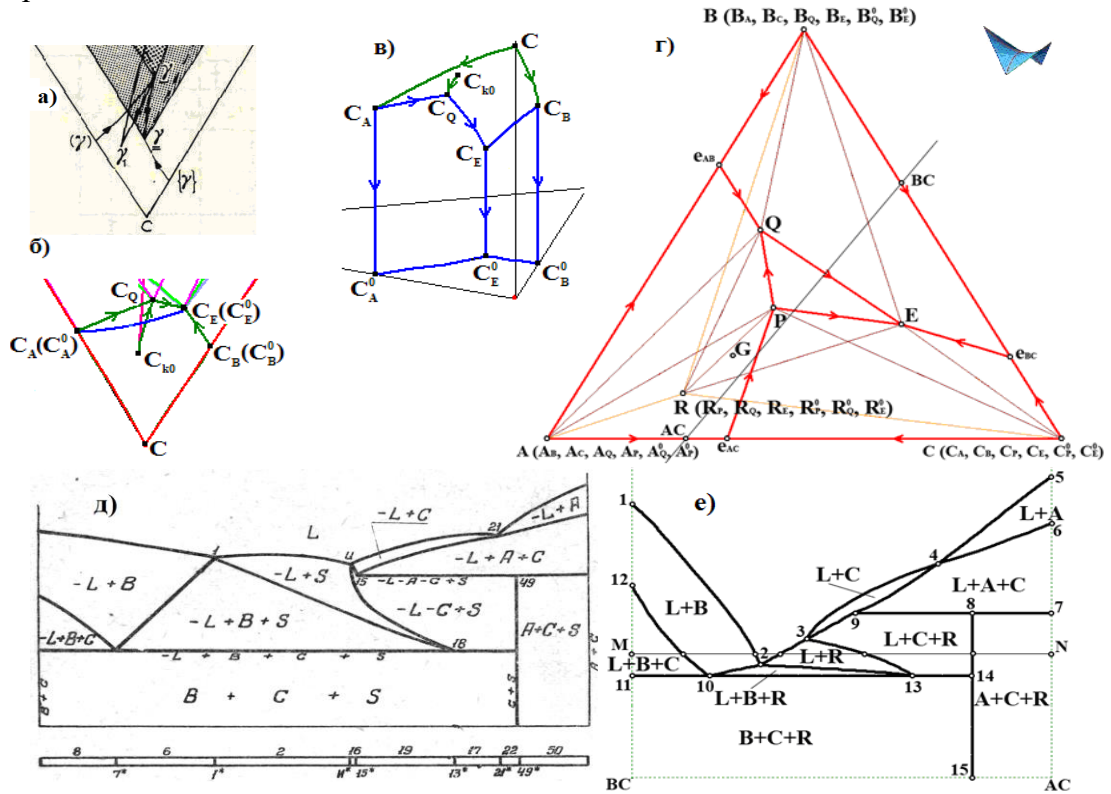


Рис. 1. В [A.Prince. Alloy Phase Equilibria. 1966] сольвус  $C_A C_Q C_E C^0 E C^0_A$  с ортогональными  $C_A C^0_A$ ,  $C_E C^0_E$  (а-в) должен замыкаться ( $C_{k0} C_Q$  – квазискладка солидуса).

В [Л.С.Палатник, А.И.Ландау. Фазовые равновесия в многокомпонентных системах. 1961] граница областей  $L+C$  и  $L+C+S(R)$  должна опускаться (г-е) от плоскости реакции  $L+A+C \rightarrow S(R)$

2. При поиске эффективных технологий сборки ФД апробированы: 1) методы аппроксимации (гипер)поверхностей Т-х-у и Т-х-у-*z* диаграмм - а) по заданному аддитивному контуру, б) перемещением образующих элементов (кинематический метод), в) минимизацией площади при произвольном контуре; 2) идеологии создания программных продуктов – а) уникальная модель ФД, б) редуцируемая модель ФД, в) редакторы и конструкторы ФД; 3) принципы сборки ФД – а) из (гипер)поверхностей, б) из фазовых областей.

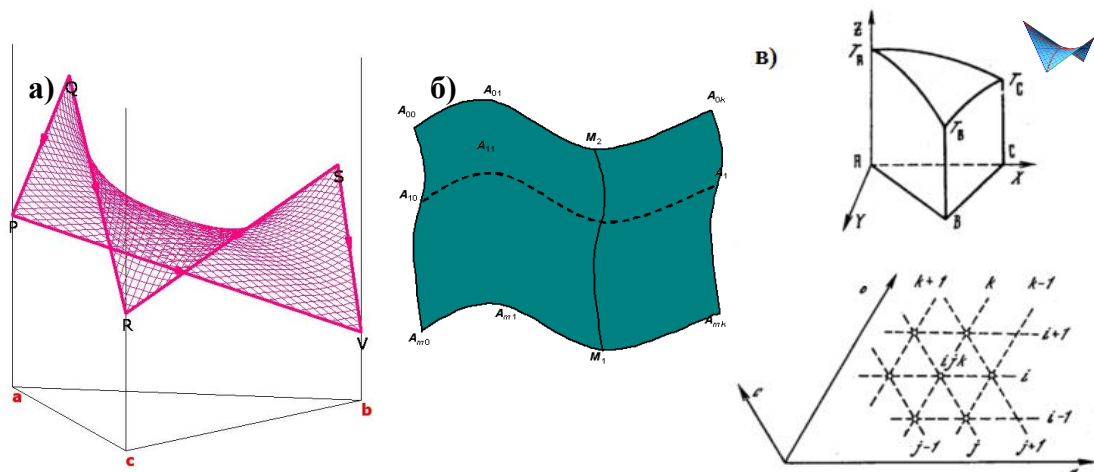


Рис. 2. Аппроксимация поверхностей: аддитивный контур (а), перемещение образующей  $M_1 M_2$  по направляющим  $A_{00} A_{01} \dots A_{0k}$ ,  $A_{10} A_{11} \dots A_{1k}$ , ...,  $A_{m0} A_{m1} \dots A_{mk}$  (б), минимальная площадь при произвольном контуре (в)

3. Разработана технология визуализации вертикальных (для заданного состава) и горизонтальных (изотерма изоплеты) материальных балансов, позволившая, в частности, учесть конкуренцию разнодисперсных кристаллов (рис. 3) и выявить новые характеристики трехфазной области со сменой типа реакции (рис. 4).

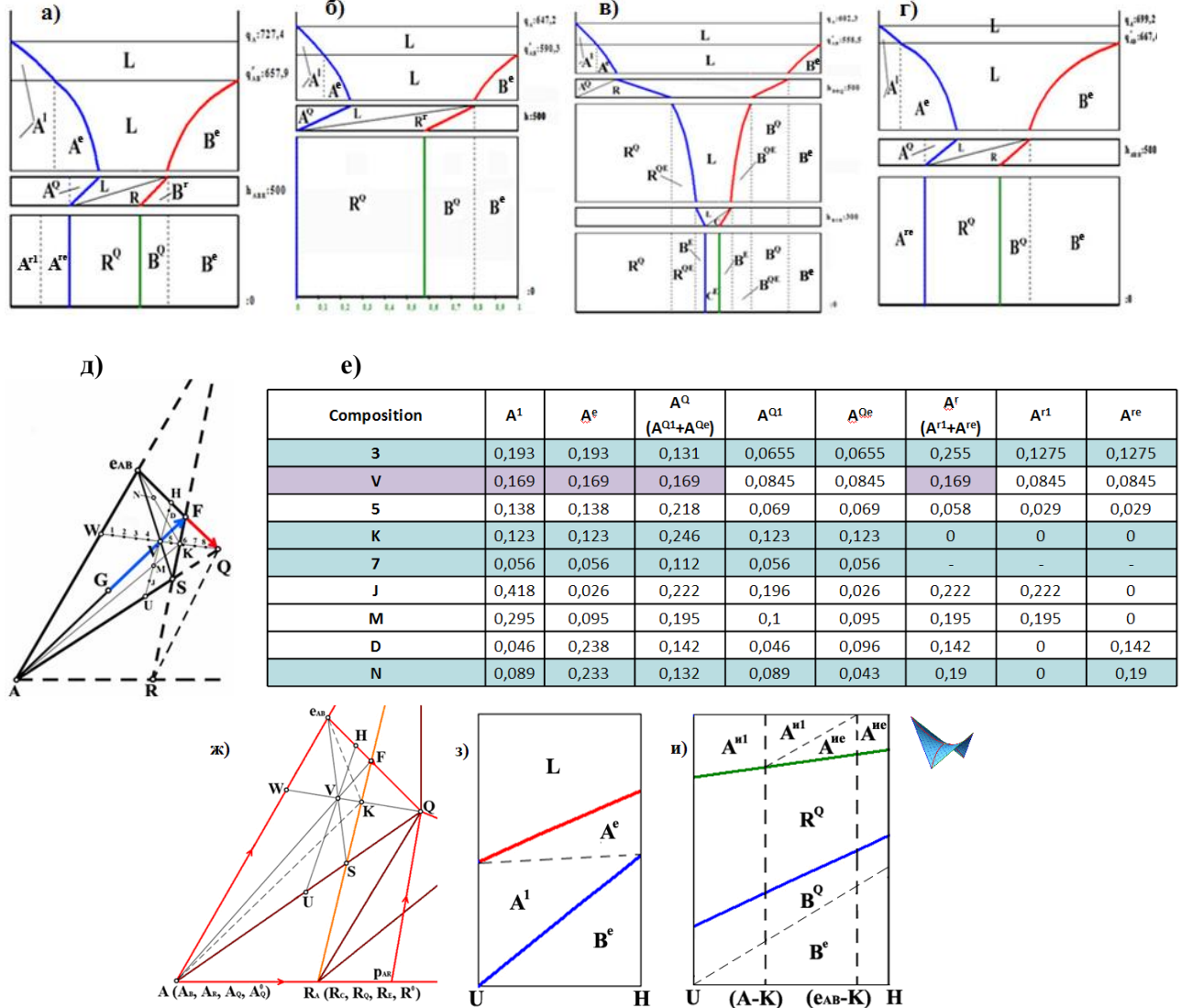


Рис. 3. Поле  $A\epsilon_{ABFS}$  в ФД с инконгруэнтным соединением  $R=A_3C$  (д,ж) состоит из фрагментов  $\epsilon_{AB}FK$ ,  $A\epsilon_{AB}K$ ,  $ASK$  с микроструктурами  $M+A^\epsilon$ ,  $M+A^\epsilon+A^1$ ,  $M+A^1$ , где  $M=R^Q+B^Q+B^\epsilon$ . (а-г) – Матбалансы составов 3, К, 7, N. (з,и) - Матбалансы изоплеты УН при  $T_Q+\delta$  и  $T_Q-\delta$ . Выявлены «замечательные» линии  $AF$  ( $A^\epsilon=A^Q$ );  $\epsilon_{AB}S$  ( $A^1=A^Q$ );  $WQ$  ( $A^1=A^\epsilon$ ) и точка  $V$  ( $A^1=A^\epsilon=A^Q=A^r$ ), где  $r$  - остаток после реакции  $L+A^Q=B^Q+R^Q$ . В отличие от трехмерного поля  $QFS$ , двумерное поле  $QF$  отличается отсутствием реакции  $L^1 \rightarrow A^1$ , Однако, вследствие конкуренции кристаллов  $A^1$  и  $A^\epsilon$ , оба поля обладают одной и той же микроструктурой, т.е.  $QF \in QFS$  и не является уникальным.

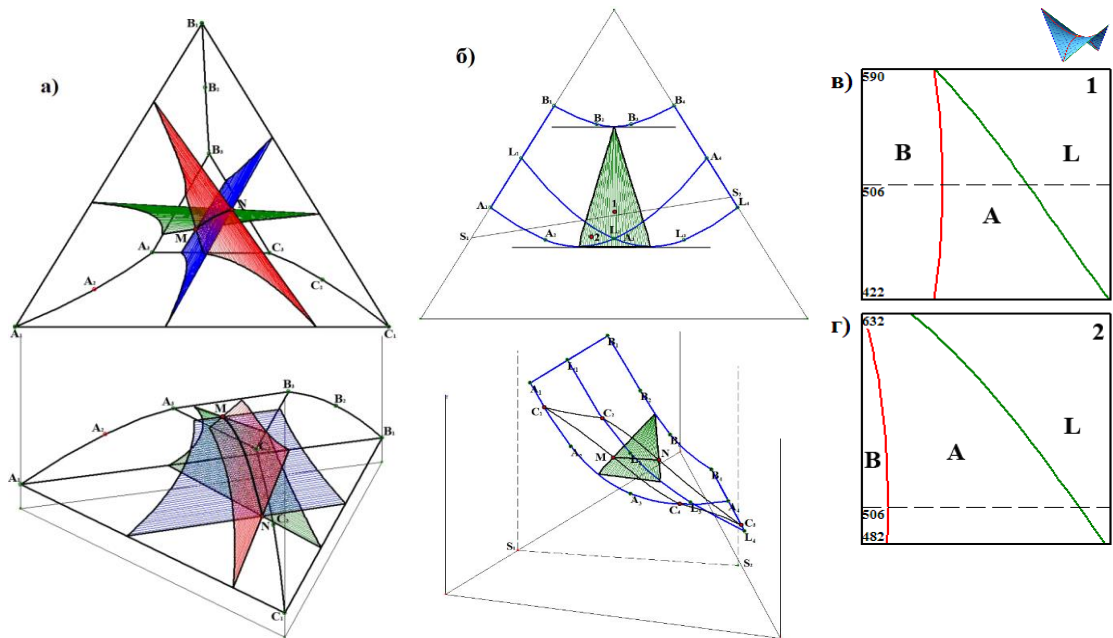


Рис. 4. Поверхности двухфазных реакций в области  $A+B+C$  (при смене знака приращения массы третьей фазы в процессе охлаждения гетерогенного материала) – (а). Подтверждение матбалансами изотермичности трехфазной трансформации по А.В.Сторонкину [ЖФХ. 1971. Т. 45, № 5. С. 1210-1213] – (б-г).

4. При дизайне сплавов учитывается разбиение трехфазных областей на фрагменты с различной динамикой приращения масс.

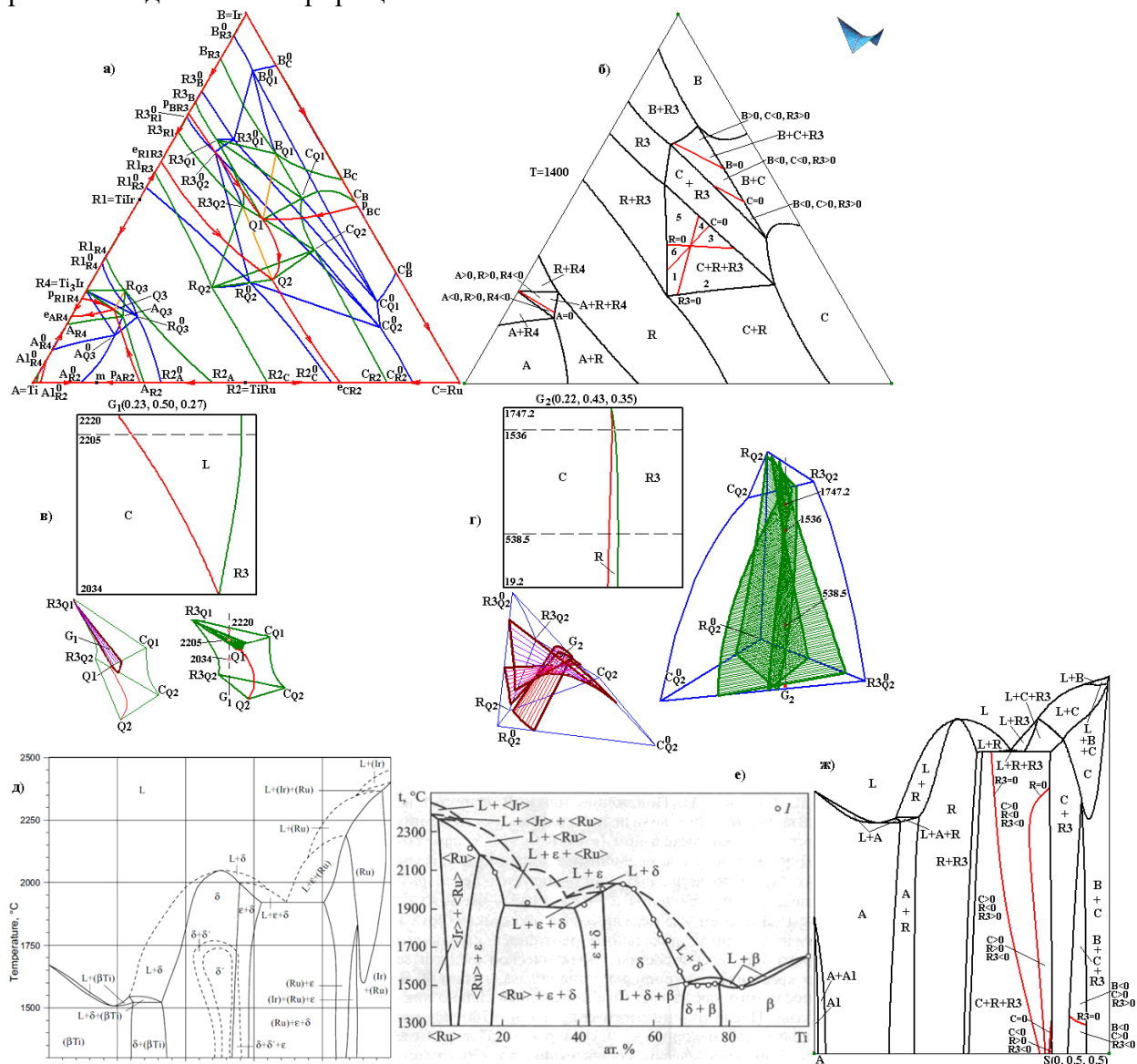


Рис. 5. Проекция ФД Ti-Ir-Ru (а) и ее изо- (б) и политермический (ж) - Ti-S(0, 0.5, 0.5) - разрез с разбиением трехфазных областей на фрагменты, и с подтверждением (ж) потери (д) [MSIT, G.Effenberg, S.Ilyenko. SpringerMaterials - The Landolt-Börnstein Database ([http://www.springermaterials.com/docs/info/10916070\\_53.html](http://www.springermaterials.com/docs/info/10916070_53.html)) области L+ε [Еременко В.Н. Избранные труды. Воспоминания. 2011]. (в,г) - Матбалансы в областях L+C+R3 и C+R+R3 со сменами реакций L+R3→C на L→C+R3 (в) и с R3→C+R на C+R3→R, а затем на C→R+R3 (г). К известной ранее эвтектико-перитектической трансформации области L+C+R3 добавлены аналогичные сведения по двум областям с расплавом и трем – без расплава. R - твердый раствор R1=TiIr и R2=TiRu=R.

5. Выполнена проверка справочника по диаграммам состояния для бессвинцовых припоев [Atlas of Phase Diagrams for Lead-Free Soldering compiled by Dinsdale A. et al. COST 531, ESF. Brno, Czech Republic, 2008. V. 1].

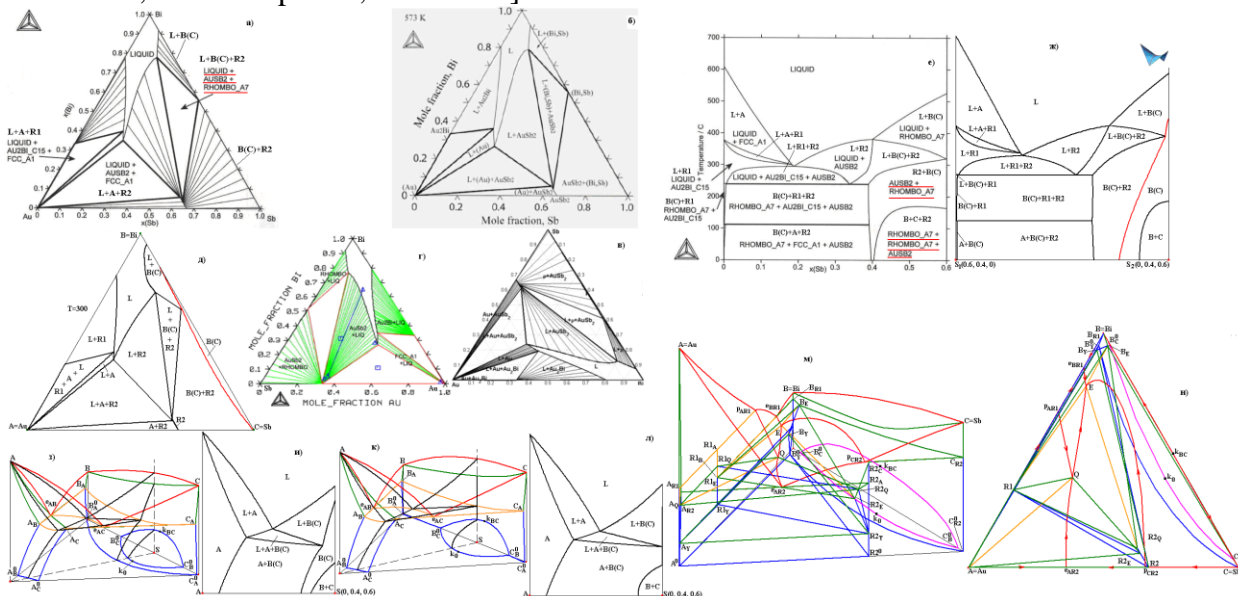


Рис. 6. В отличие от [Wang J. et al, J. Electron Mater. 2007. V. 36. No 5. P. 568] (б) и [http://td.chem.msu.ru/?page\_id=638] (г), на разрезе 300°C ФД Au-Bi-Sb в [Atlas...] (а) и в [Manasijevića D. et al, J. of Physics and Chemistry of Solids. 2008. V. 69. No 4. P. 847] (в), а также на политермическом разрезе  $z_{2(Bi)}=0.4$  [Atlas..] (е) пропущены поверхности солидуса  $s_{B(C)}$  и сольвуса  $v_{B(C)R2}$ . На разрезах (д,ж) компьютерной модели (м,н) пропущенные поверхности выделены красным). При поиске ошибок использован прототип ФД с «правильной»  $V_A C A C^0 A B^0 A$  (з,и) и «неправильной»  $V_A C A C^0 A C^0 B K^0 B^0 C V^0 A$  (к,л) поверхностью сольвуса.

6. При дизайне керамик производится анализ концентрационных полей, получаемых при проецировании фазовых областей на основание ФД. Сопоставлением последовательности фазовых превращений и наборов микроструктурных элементов в закристаллизовавшемся в равновесных условиях расплаве выявляются поля с совпадающими наборами схем кристаллизации и микроструктурами и поля с различием в этих характеристиках.

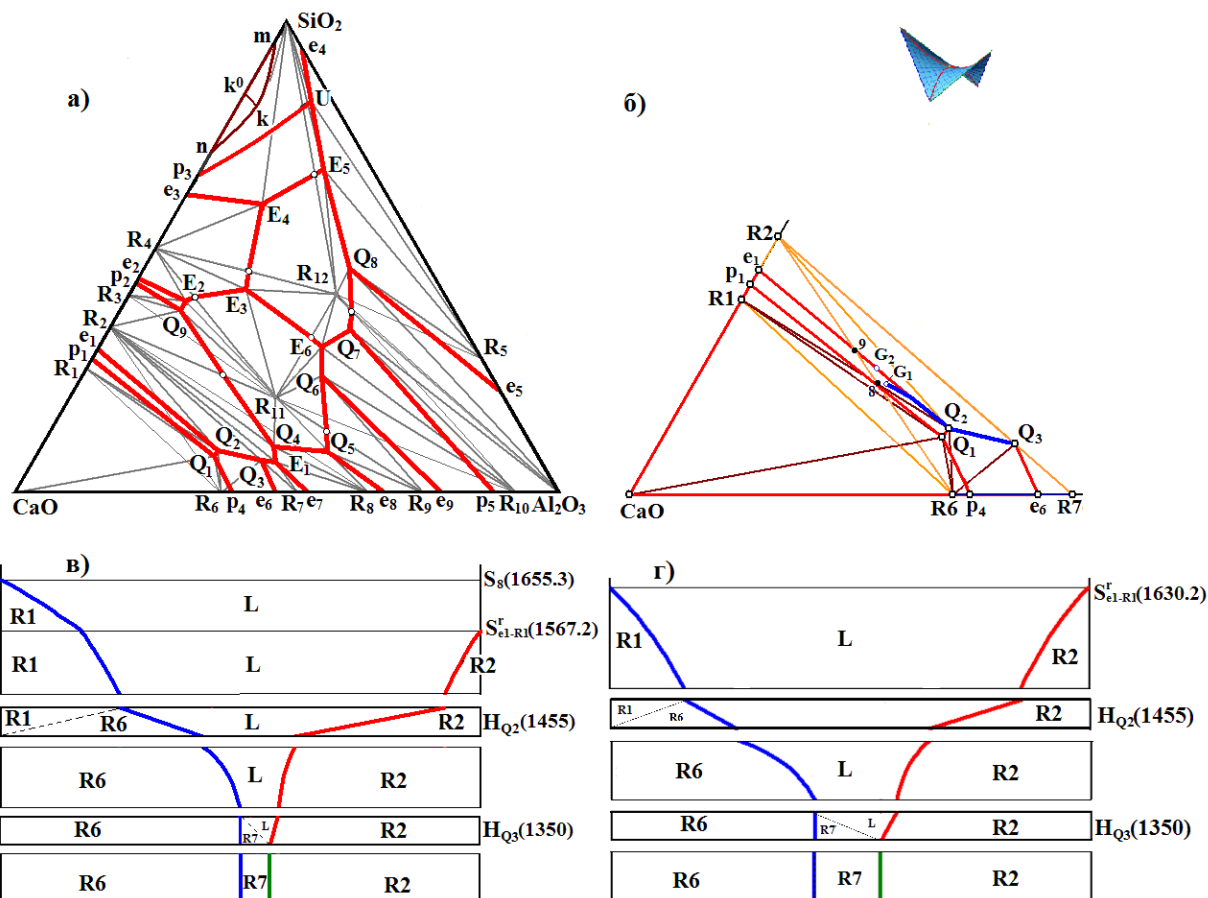


Рис. 7. XY-проекция ФД CaO-SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (а) и ее фрагмент со схемой кристаллизации состава G<sub>1</sub> ∈ Q<sub>2</sub>-8-9 (б), матбалансы для составов G<sub>1</sub> ∈ Q<sub>2</sub>-8-9 (в) и G<sub>2</sub> ∈ Q<sub>2</sub>-9 (г) (поле Q<sub>2</sub>-9 совпадает по микроструктуре с Q<sub>2</sub>-8-9, но отличается отсутствием реакции L<sup>1</sup>→R<sub>1</sub><sup>1</sup>, т.к. принадлежит линии ликвидуса e<sub>1</sub>Q<sub>2</sub>; R<sub>1</sub>=C<sub>3</sub>S, R<sub>2</sub>=C<sub>2</sub>S, R<sub>3</sub>=C<sub>3</sub>S<sub>2</sub>, R<sub>4</sub>=CS, R<sub>5</sub>=A<sub>3</sub>S<sub>2</sub>, R<sub>6</sub>=C<sub>3</sub>A, R<sub>7</sub>=C<sub>12</sub>A<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>=CA, R<sub>9</sub>=CA<sub>2</sub>, R<sub>10</sub>=CA<sub>6</sub>, R<sub>11</sub>=C<sub>2</sub>AS, R<sub>12</sub>=CAS<sub>2</sub>). В системе CaO-SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> выявлено 117 двухмерных, 163 одномерных и 45 нульмерных полей. Поля ликвидусов CaO, C<sub>3</sub>S, C<sub>3</sub>A, SiO<sub>2</sub><sup>cr</sup> (кristобалит), SiO<sub>2</sub><sup>tr</sup> (тридимит), A<sub>3</sub>S<sub>2</sub> и купола расщавивания делятся в проекции на 104 концентрационных поля: двух- (34), одно- (49) и нуль- (21) мерные, среди которых 31 поле (2 двух-, 20 одно- и 9 нульмерных) не имеют уникальных наборов микроструктуры.





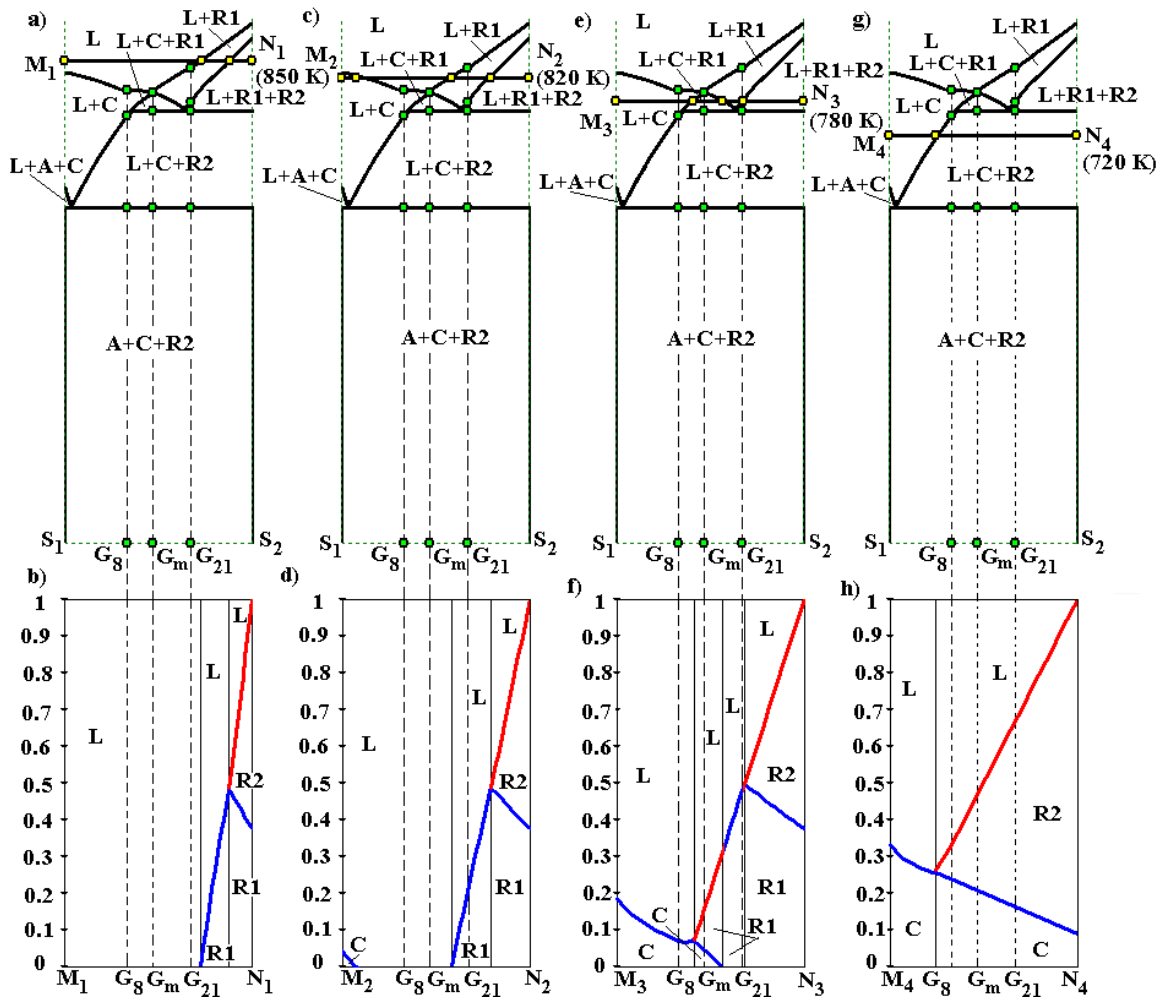


Рис. 10. Горизонтальные диаграммы материального баланса на политермическом разрезе  $S_1(0.3, 0, 0.7)$ - $S_2(0, 0.3, 0.7)$  при температурах 850 К (а, б), 820 К (с, д), 780 К (е, ф), 720 К (г, h)\*

\* вертикальные диаграммы матбаланса для расплавов  $G_8$ ,  $G_{21}$ ,  $G_m$  см. на рис. 11а, 11с, 11д

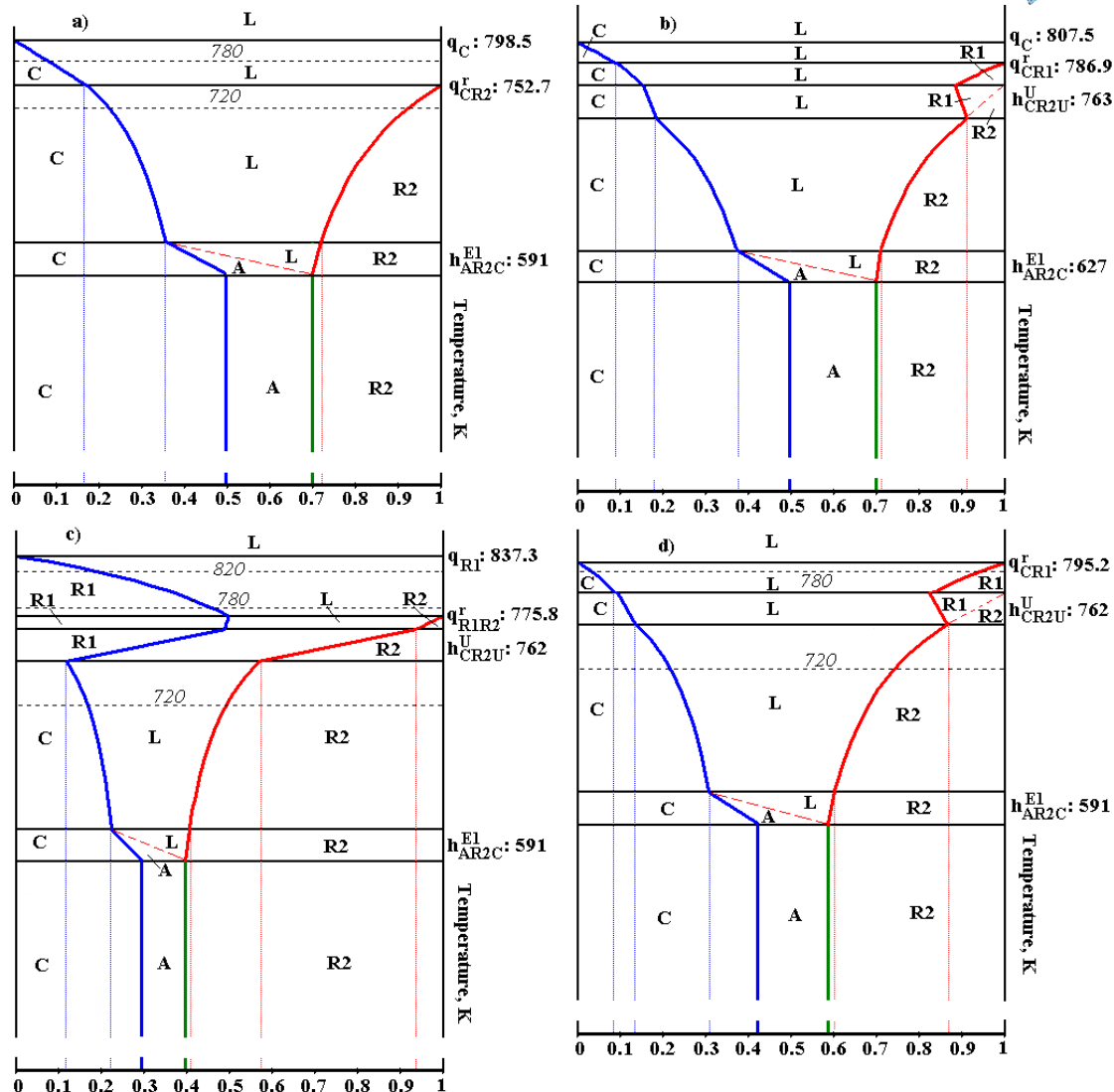


Рис. 11. Вертикальные диаграммы матбаланса для центров масс  $G_8$  (0.2, 0.1, 0.7) [S. Ghosh, et al. // *Thermochim. Acta.* 653 (2017) 16-26.] (a),  $G_8$  (0.2, 0.1, 0.7) [Sridar S, Hao L, Xiong W. // *CALPHAD.* 2023. V. 81. P. 102552.] (b),  $G_{21}$  (0.1, 0.2, 0.7) [Ghosh S., et al. // *Thermochim. Acta.* 2017. V. 653. P. 16-26.] (c),  $G_m$  (0.163, 0.137, 0.70)  $\in e_{CR1U}$  на рис. 9c (d)

9. Устранено противоречие между желанием исследователя иметь единственную (эталонную) фазовую диаграмму и реальным набором вариантов этой фазовой диаграммы, каждый из которых соответствует определенным нарушениям в установлении истинных физико-химических равновесий (экспериментальные диаграммы) или же упрощению определенных вычислительных процедур при расчетах фазовых диаграмм (термодинамическим и из первых принципов). Кроме реализации всех вариантов фазовой диаграммы для конкретной физико-химической системы в виде цифровых двойников (ими являются компьютерные модели, создаваемые при помощи авторского программного обеспечения), необходимо, конечно, работать над цифровым двойником и для эталонной диаграммы. Понимая при этом, что эталонность такого цифрового двойника в любой момент может быть подвергнута сомнению. Цифровые двойники фазовых диаграмм (пространственные компьютерные модели) знаменуют переход к новому технологическому укладу. Они предоставляют новые возможности для извлечения той мудрости, которую содержат фазовые диаграммы (phase diagrams: the beginning of wisdom, not the end of it).