

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 544.344.3+546.8

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.01.003

ДВА ВАРИАНТА 3D КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ Ag-Sb-Sn, ОПРЕДЕЛЯЕМЫЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТЬЮ Sb_3Sn_4

Вера Павловна Воробьева¹, Анна Эдуардовна Зеленая², Василий Иванович. Луцык³, Мария Дмитриевна Парфенова⁴

^{1,2,3,4}ИФМ СО РАН, Улан-Удэ, Россия

¹Воробьева Вера Павловна, vvorobjeva@mail.ru ORCID 0000-0002-2714-3808

²Зеленая Анна Эдуардовна, zel_ann@mail.ru ORCID 0000-0001-5232-8567

³ Луцык Василий Иванович, vluts@ipms.bscnet.ru ORCID 0000-0002-6175-0329

⁴ Парфенова Мария Дмитриевна, krygentul@dmil.com ORCID 0000-0001-8572-2763

Аннотация. Система Ag-Sb-Sn представляет интерес для микроэлектроники и является перспективным материалом, используемым при высокотемпературной пайке. Анализ фазовых равновесий в системе осложнен отсутствием согласованного мнения о ее строении: различные версии обусловлены неоднозначным описанием образующихся соединений и условий их существования. Так, соединение Sb_3Sn_4 либо считается устойчивым вплоть до комнатной температуры, либо существует в ограниченном диапазоне температур 323-242°C.

Целью работы был анализ фазовых равновесий в системе Ag-Sb-Sn в зависимости от способа образования и температурных границ существования бинарного соединения Sb_3Sn_4 . Для этого были построены две версии трехмерной (3D) компьютерной модели фазовой диаграммы Ag-Sb-Sn. Использовалась технология сборки фазовой диаграммы из поверхностей и/или фазовых областей. Изо- и политермические разрезы рассчитывались по обоим вариантам 3D-модели. Полученные версии обеспечивают полное геометрическое описание фазовой диаграммы, в том числе в твердофазных областях. Кроме того, модель может быть скорректирована при получении новой экспериментальной информации и даже радикальном изменении понимания свойств соединений, образующихся в системе. Обе версии 3D-модели расширяют прогностические функции фазовой диаграммы, и в дальнейшем помогут понять структуру фазовых диаграмм других тройных систем, сформированных на основе бинарной системы Sb-Sn.

Ключевые слова: фазовая диаграмма, система Ag-Sb-Sn, компьютерное моделирование

Источник финансирования: исследование выполнено в соответствии с госзаданием ФГБУН Институт физического материаловедения СО РАН, проект № 0270-2024-0013.

Для цитирования: Воробьева, В.П., Зеленая, А.Э., Луцык, В.И., Парфенова, М.Д. (2025) Два варианта 3D компьютерной модели фазовой диаграммы Ag-Sb-Sn, определяемые термической стабильностью Sb_3Sn_4 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22, № 1. С. 31-41. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.01.003.

Original article

TWO VERSIONS OF 3D COMPUTER MODEL OF THE AG-SB-SN PHASE DIAGRAM, DETERMINED BY THE THERMAL STABILITY OF Sb_3Sn_4

Vera P. Vorob'eva¹, Anna E. Zelenaya², Vasily I. Lutsyk³, Maria D. Parfenova⁴^{1,2,3,4}IPMS SB RAS, Ulan-Ude, Russia,¹Vorob'eva Vera P., vvorobjeva@mail.ru ORCID 0000-0002-2714-3808²Zelenaya Anna E., zel_ann@mail.ru ORCID 0000-0001-5232-8567³Lutsyk Vasily I., vluts@ipms.bscnet.ru ORCID 0000-0002-6175-0329⁴Parfenova Maria D., krygentul@dmil.com ORCID 0000-0001-8572-2763

Abstract. The Ag-Sb-Sn system is of interest to microelectronics and is a promising material used in high temperature soldering. The analysis of phase equilibria in the system is difficult because of the lack of an agreed opinion on its structure: various versions are due to an ambiguous description of the formed compounds and the conditions for their existence. Thus, compound Sb_3Sn_4 is either considered stable up to room temperature or exists in a limited of 323-242°C temperature range.

The purpose of the work was to analyze phase equilibria in the Ag-Sb-Sn system depending on the method of formation and the temperature boundaries of the existence of the binary compound Sb_3Sn_4 . For this, two versions of a three-dimensional (3D) computer model of the Ag-Sb-Sn phase diagram were constructed. The technology of assembling a phase diagram from surfaces and/or phase regions was used. Iso- and polythermal sections were calculated for both versions of the 3D model. The resulting versions provide a complete geometric description of the phase diagram, including in solid regions. In addition, the model can be adjusted when new experimental information is obtained and even a radical change in the understanding of the properties of compounds formed in the system. Both versions of 3D models expand the predictive functions of the phase diagram, and in the future will help to understand the structure of phase diagrams of other ternary systems formed on the basis of the binary Sb-Sn system.

Keywords: phase diagram, Ag-Sb-Sn system, computer simulation

Funding: This work has been performed under the program of fundamental research IPMS SB RAS, project No 0270-2024-0013.

For citation: Vorob'eva, V.P., Zelenaya, A.E., Lutsyk, V.I., Parfenova, M.D. (2025) Two versions of 3D computer model of the Ag-Sb-Sn phase diagram, determined by the thermal stability of Sb_3Sn_4 . *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 22(1), 31-41. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.01.003.

Введение

Сплавы, получаемые на основе системы Ag-Sb-Sn, могут быть предложены в качестве высокотемпературных бессвинцовых припоев, соответствующих современным экологическим стандартам [1, 2]. Использование сплавов на основе Ag также актуально в электронных и оптоэлектронных устройствах в силу своих технических характеристик (стойкость к коррозии, высокая электро- и теплопроводность, высокая механическая прочность) [3]. Поскольку для разработки новых припоев на основе Ag необходимо знание надежных фазовых диаграмм, то целью настоящей работы явилась

разработка компьютерной модели фазовой диаграммы системы Ag-Sb-Sn.

Данные по фазовой диаграмме бинарной системы Sb-Sn имеют противоречивый характер. Разногласия касаются числа соединений, образующихся в системе, их стехиометрии, а также температурных границ, в которых они существуют [4-17]. В наиболее ранней работе [5, цит. по 4] говорится об образовании одного соединения β -SbSn инконгруэнтного типа плавления с широкой областью гомогенности и трансформацией "порядок-беспорядок". В статье [6, цит. по 4] показано, что в системе Sb-Sn имеют место три перитектические реакции, и в результате двух из них образуются соединения β -SbSn и Sb_2Sn_3 , плавящиеся инконгруэнтно.

Согласно [6], соединение Sb_2Sn_3 существует в узком диапазоне температур, тогда как авторы [4] отмечают его существование вплоть до комнатной температуры. Позднее авторы [7] рассказали об изучении области, богатой Sb, и был представлен фрагмент гипотетической фазовой диаграммы, включающей уже четыре соединения: $SnSb$, $Sn_{12}Sb_{13}$, Sn_2Sb_3 , $SnSb_2$.

Авторами [8] в результате совместной экспериментальной и расчетной работы предложена фазовая диаграмма, включающая два инконгруэнтно плавящихся соединения: β - $SbSn$ переменного состава и стехиометрического Sb_2Sn_3 , последнего - в ограниченном диапазоне температур: по данным [9, 10] оно разлагается при $242.4^\circ C$ на β - $SbSn$ и Sn . Разложение этого соединения при той же температуре подтверждается при изучении тройной системы Ni-Sb-Sn [11]. Кроме того, в [9] на фазовой диаграмме Sb-Sn учитывается низкотемпературная модификация Sn и образование фазовых областей с ее участием. Данный вид диаграммы подтвержден расчетными исследованиями.

Альтернативный вариант строения фазовой диаграммы Sb-Sn, в котором оба соединения β - $SbSn$ и Sb_2Sn_3 существуют во всем температурном диапазоне, помимо [4], представлен также в работах [12-14]. В этих, более поздних публикациях, соединение Sb_2Sn_3 обозначено как Sb_3Sn_4 . Обосновывается это тем, что изначально соединению Sb_2Sn_3 , имеющему в своем составе 57 ат. % олова [6], приписана неверная стехиометрия [15]. Существование Sb_2Sn_3 также было исключено в [16] и экспериментально обосновано образование двух соединений β - $SbSn$ и Sb_3Sn_4 , существующих во всем температурном диапазоне и разделенных между собой узкой двухфазной областью.

В работе [17] получены два варианта строения фазовой диаграммы Sb-Sn, причем тоже с образованием двух соединений β - $SbSn$ и Sb_3Sn_4 . Один из них подтверждается в [16]: образование в системе двух соединений, образованных по перитектической схеме. Во втором варианте предполагается, что соединение Sb_3Sn_4 формируется в результате кататектической реакции без участия расплава. В расчетной работе [18] предложен "компромиссный" вариант фазовой диаграммы, включающий три соединения β - $SbSn$, Sb_2Sn_3 и Sb_3Sn_4 , при этом Sb_2Sn_3 существует в ограниченном температурном интервале.

В настоящее время расхождение во мнениях о температурных границах существования соединения Sb_3Sn_4 до сих пор так и не преодолено: авторы [12, 14] сходятся во мнении, что Sb_3Sn_4 существует вплоть до комнатной температуры, а в работах [9, 10] – его существование ограничено снизу температурой $515 K (242^\circ C)$.

Очевидно, что при добавлении третьего металла противоречивые мнения о строении фазовой диаграммы бинарной системы Sb-Sn влияют на строение фазовых диаграмм тройных систем: с серебром [18-20], золотом [14], висмутом [21-23], индием [24-26], магнием [13], никелем [11], свинцом [8]. Следует отметить, что для таких тройных систем (в данном случае – с серебром), целесообразно разработать несколько версий компьютерных 3D-моделей фазовых диаграмм.

Во-первых, такого рода пространственные компьютерные модели дают возможность для более полного понимания геометрического строения фазовых диаграмм и для детальной визуализации трехмерных объектов фазовых диаграмм тройных и четверных систем [27]. Во-вторых, 3D-модель может быть построена как на основе верифицированных исходных данных, так и на основе гипотетических в случае нехватки исходной информации или неоднозначного описании.

Описание метода

Компьютерная 3D-модель фазовой диаграммы создается в виде 3D-объекта в координатах "состав x_1 , x_2 – температура T" с учетом правил физико-химического анализа. В качестве начальных данных используются координаты бинарных и тройных инвариантных точек на контуре поверхностей, учитывается тип образующихся соединений и кривизна поверхностей. Для построения 3D-моделей фазовых диаграмм используется авторское программное обеспечение PD Designer и Neditor [28].

На первом этапе разрабатывается схема моно- и инвариантных состояний системы, учитывающая все взаимосвязи между фазовыми реакциями в бинарных и тройной системе, включая область субсолидуса. В отличие от традиционной схемы Шейла, данная схема дополнительно содержит информацию о траектории фаз на границах трехфазных областей. На следующем этапе схема переводится из табличной формы в графическую. Для этого при

помощи программы PD Designer строятся горизонтальные (изотермические) комплексы, соответствующие невариантным реакциям тройной системы. К этим плоскостям достраиваются линейчатые поверхности - границы трехфазных областей. Затем полученный каркас дополняется поверхностями ликвидуса, солидуса, сольвуса, трансуса и формируются фазовые области, в результате чего получается прототип фазовой диаграммы. Он полностью соответствует топологическому строению фазовой диаграммы изучаемой системы, но точки на контуре его поверхностей разнесены по составам и температурам. В такой форме прототип позволяет избежать наложения линий или точек при их близком расположении, а также вырождения поверхностей и фазовых областей. Использование прототипа дает возможность лучше понять строение фазовой диаграммы, а также наиболее корректно провести расшифровку разрезов. При введении в прототип координат точек, соответствующих реальной системе, он трансформируется в готовую 3D-модель фазовой диаграммы изучаемой системы.

В полученной 3D-модели выполняется соответствие правилу фаз, правилу Палатника о соприкасающихся пространствах состояния и основным принципам геометрической термодинамики [29]. Следует отметить, что в случае недостатка исходных данных или неоднозначном описании в 3D-модель могут быть введены гипотетические данные, которые впоследствии могут уточняться по мере поступления новых данных. Сопоставление сечений, рассчитанных на основе 3D-модели фазовой диаграммы с полученными экспериментально или при помощи термодинамических пакетов, является своего рода проверкой корректности полученных результатов.

Для задания поверхностей в PD Designer выбран кинематический метод, основанный на интерполяционных полиномах n -й степени, где n определяется геометрическими особенностями поверхности. Поверхность задается базовыми точками и формируется путем скольжения образующей кривой по направляющим. Сложные поверхности собираются из фрагментов. Фрагментационные и безфрагментационные

технологии позволяют проектировать поверхности с отверстиями, складками, седловыми точками и экстремумами.

Программы PD Designer и Neditor предоставляют широкие возможности визуализации 3D-модели фазовой диаграммы: вращение трехмерных объектов, построение любых изо- и политермических разрезов, а также путей кристаллизации. Кроме того, они позволяют проводить расчеты материальных балансов на любых этапах кристаллизации, восстанавливать картину формирования микроструктуры путем исследования качественного и количественного состава сосуществующих фаз [30, 31], обнаруживать эффект смены типа трехфазного превращения при изменении знака приращения массовой доли одной из фаз [32], определять условия конкуренции разнородных составляющих в невариантных процессах и формирования материала с заданными свойствами.

Подобного рода 3D-модели могут модифицироваться по мере получения достоверной, экспериментально подтвержденной информации (в данном случае об условиях существования соединения Sb_3Sn_4) с минимальными преобразованиями. В связи с этим, были построены два варианта 3D-модели фазовой диаграммы Ag-Sb-Sn, соответствующие двум версиям существования соединения Sb_3Sn_4 : 1) Sb_3Sn_4 не разлагается вплоть до комнатной температуры (по данным экспериментальной [19] и расчетной [20] работ); 2) Sb_3Sn_4 существует в температурных границах 325.1-242.4°C [9]).

Помимо Sb-Sn, фазовые диаграммы других бинарных систем Ag-Sb и Ag-Sn имеют схожее строение: в каждой из них образуются по два инконгруэнтно плавящихся соединения: ζ - $Ag_{17}Sb_3$ и ε - Ag_3Sb (в системе Ag-Sb); ε - Ag_3Sn и ζ - Ag_5Sn (в системе Ag-Sn) [19, 20].

Первая версия: соединение Sb_3Sn_4 стабильно во всем температурном диапазоне

При построении первого варианта 3D-модели учитывается, что соединение Sb_3Sn_4 существует вплоть до комнатной температуры [4] (рис. 1а).

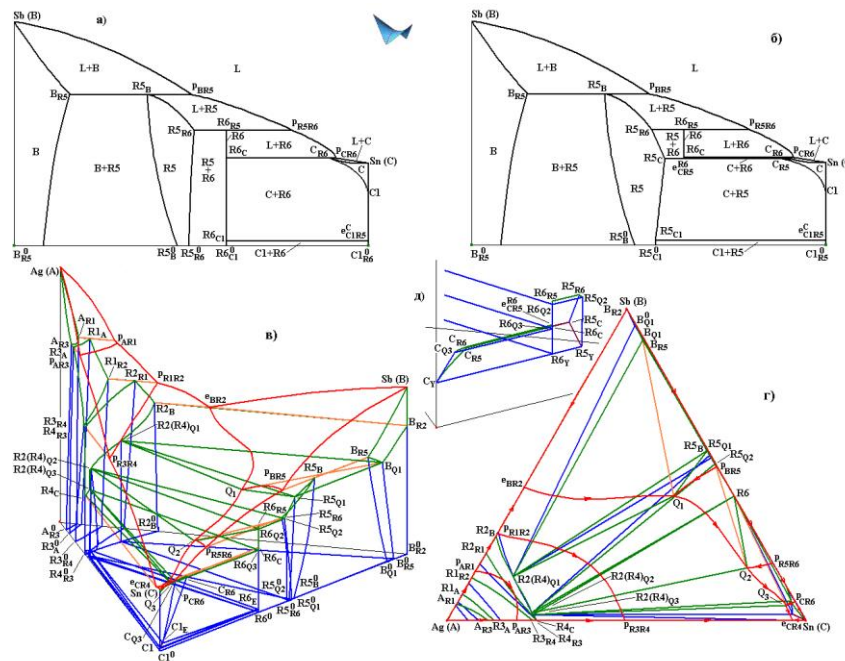
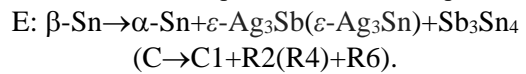
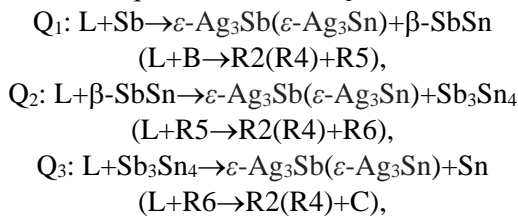


Рис. 1. Варианты бинарной системы Sn-Sb: по данным [4, 12] (а), по данным [9] (б), проекции T-x₁-x₂ (в), x₁-x₂ (г) 3D-модели фазовой диаграммы Ag-Sb-Sn, построенной по данным [19],

согласно которой соединение Sb₃Sn₄ (R6) существует вплоть до комнатной температуры (вынесен (д) фрагмент 3D-модели фазовой диаграммы с разложением соединения при Sb₃Sn₄ (R6) при 242°C)



Согласно [19, 20], тройная система Ag-Sb-Sn (A-B-C) характеризуется тремя инвариантными квазиперитектическими реакциями



в которых участвует твердый раствор $\varepsilon\text{-Ag}_3\text{Sb}(\varepsilon\text{-Ag}_3\text{Sn})$ или R2(R4) (рис. 1в, 1г). Соединениями $\zeta\text{-Ag}_{17}\text{Sb}_3$ (R1) и $\zeta\text{-Ag}_5\text{Sn}$ (R3) в системе формируется еще один твердый раствор $\zeta\text{-Ag}_{17}\text{Sb}_3(\zeta\text{-Ag}_5\text{Sn})$ или R1(R3).

На основе схемы моно- и инвариантных состояний прогнозируется еще одна инвариантная реакция - в субсолидусе, предположительно эвтектоидного типа с участием двух полиморфных модификаций олова $\beta\text{-Sn}$ (C) и $\alpha\text{-Sn}$ (C1):

После преобразования табличной схемы в трехмерную конструкцию получается композиция линейчатых поверхностей – границ трехфазных областей (согласно схеме, таких поверхностей, состоящих из 15 комбинаций по три, - 45) и горизонтальных (изотермических) плоскостей, соответствующих четырем инвариантным реакциям Q₁-Q₃ и E (4 комплекса, каждый из которых разбивается на 4 симплекса). Далее на них достраиваются по 7 поверхностей ликвидуса и солидуса, а также 2 поверхности трансуса и 11 пар поверхностей сольвуса. В итоге, 3D-модель фазовой диаграммы формируется путем сборки из 99 поверхностей и 42 фазовых областей (рис. 1в), включая 7 двухфазных и 9 трехфазных с расплавом, а также 8, 12 и 6, соответственно, одно-, двух-, трехфазных областей без расплава.

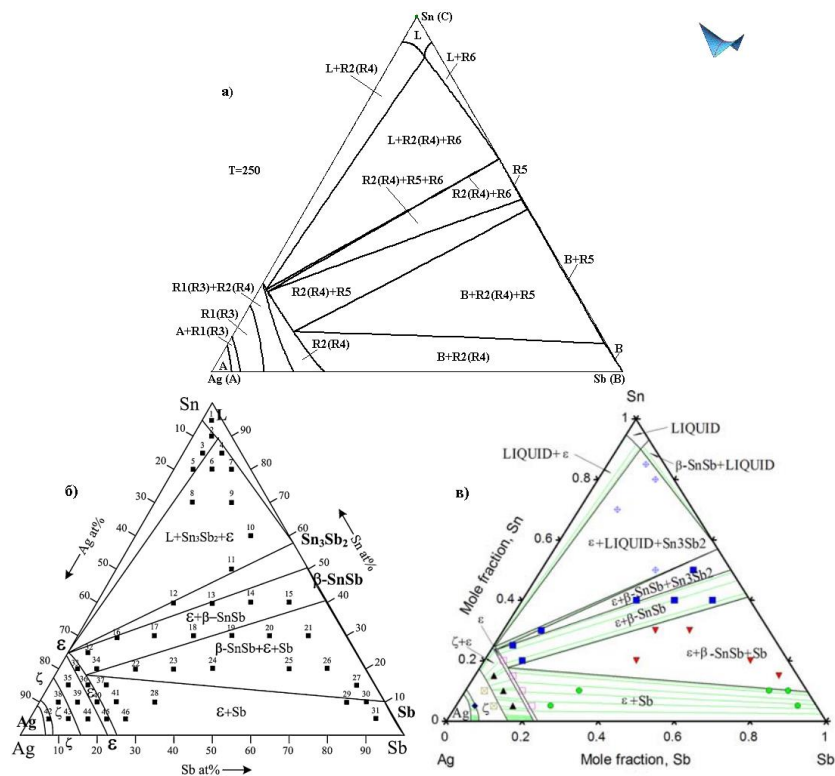


Рис. 2. Изотермический разрез $T=250^{\circ}\text{C}$, полученный на основе 3D-модели (а), и представленный в [19] (б), [20] (в)

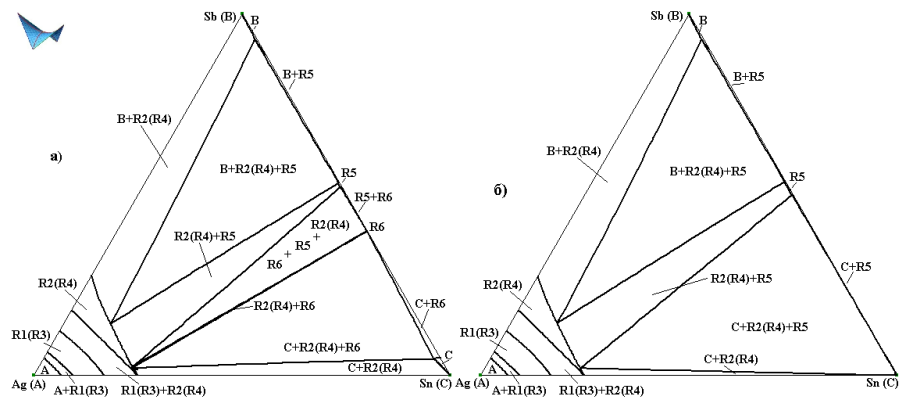


Рис. 3. Изотермический разрез $T < T_{\gamma}$ двух версий 3D-модели фазовой диаграммы, построенных по данным [19] (а) и [9] (б)

($T_{\gamma} \approx 150^{\circ}\text{C}$ - предполагаемая температура разложения соединения Sb_3Sn_4 (R6) в тройной системе)

На основе 3D-модели фазовой диаграммы могут быть рассчитаны любые изо- и политермические разрезы. Сопоставление расчетных разрезов с представленными в литературе дает возможность проверить корректность модели, либо, наоборот, провести верификацию исходных данных. Например, при сопоставлении модельного изотермического сечения $T=250^{\circ}\text{C}$ (рис. 2а) с представленным в [19] (рис. 2б), видно, что авторы [19] пропустили линию на границе фазовых областей L и L+R6 ($\text{L}+\text{Sn}_3\text{Sb}_2$). При этом в работе [20] эта линия

есть, но допущена ошибка в обозначении разрезов фазовых областей: вместо L+ Sn_3Sb_2 указано сечение L+ $\beta\text{-SnSb}$, (рис. 2в). (В [19, 20] рассматривается соединение Sb_2Sn_3 , а не Sb_3Sn_4).

Вторая версия: соединение Sb_3Sn_4 разлагается при 242.4°C

3D-модель второй версии фазовой диаграммы строится с учетом того, что инконгруэнтно плавящееся бинарное соединение Sb_3Sn_4

(R6), образующееся по перитектической реакции $L+\beta-SbSn \rightarrow Sb_3Sn_4$ ($L+R5 \rightarrow R6$) при $325.1^\circ C$, разлагается при $242.4^\circ C$ на $\beta-SbSn$ (R5) и Sn (C) (рис. 1б) [9]. Соответственно, по сравнению с первым вариантом, схема моно- и non-вариантных состояний усложняется:

1) разложение Sb_3Sn_4 (R6) на Sn (C) и $\beta-SbSn$ (R5) в бинарной системе принимает форму реакции разложения по эвтектидной схеме

Y: $Sb_3Sn_4 \rightarrow Sn + \varepsilon-Ag_3Sb(\varepsilon-Ag_3Sn) + \beta-SbSn$ ($R6 \rightarrow C+R2(R4)+R5$)

в тройной системе;

2) если в первом варианте non-вариантная квазиперитектическая реакция при Q_2 заканчивается трехфазным превращением с участием соединений $\beta-SbSn$ (R5), Sb_3Sn_4 (R6) и твердого раствора $\varepsilon-Ag_3Sb(\varepsilon-Ag_3Sn)$ или $R2(R4)$, то во втором варианте это фазовое превращение связывает реакцию Q_2 с non-вариантной реакцией разложения Y.

В остальном схема фазовых реакций схожа с первым вариантом и включает три фазовых превращения с участием расплава и завершающий кристаллизацию полиморфный переход между двумя модификациями олова.

Вторая версия 3D-модели фазовой диаграммы тоже строится методом сборки из поверхностей (фазовых областей). Но ее геометрическое строение немного сложнее, чем у первой версии. Ее образуют 111 поверхностей: по 7 поверхностей ликвидуса и солидуса, 2 – трансуса, 12 пар поверхностей сольвуса, 17 триад линейчатых поверхностей и 5 комплексов, разбиваемых каждый на четыре симплекса и соответствующих пяти non-вариантным реакциям Q_1-Q_3 , Y, E. Количество фазовых областей тоже возрастает до 44-х за счет появления двухфазных C+R5, C1+R5 и трехфазных C+R2(R4)+R5, C+C1+R5, C1+R2(R4)+R5 областей взамен C1+R6, C+C1+R6, C1+R2(R4)+R6 (рис. 1д).

Отличия в строении двух вариантов фазовых диаграмм Ag-Sb-Sn прослеживаются и на разрезах. Если рассмотреть изотермический разрез для обеих версий 3D-моделей, рассчитанный в интервале температур между полиморфным превращением E (~10) и температурой разложения Sb_3Sn_4 (R6) (~150), то на разрезе первого варианта 3D-модели, учитывающего существование Sb_3Sn_4 (R6) во всем температурном диапазоне, проявляются две дополнительные фазовые области $R2(R4)+R6$ и $R2(R4)+R5+R6$ (рис. 3а), в отличие от второй

версии 3D-модели, предполагающей существование Sb_3Sn_4 в ограниченном диапазоне температур (рис. 3б). Кроме того, фазовые области C+R6 и C+R2(R4)+R6 (рис. 3а) заменяются на C+R5 и C+R2(R4)+R5 (рис. 3б). Это связано с тем, что в первой версии оба соединения $\beta-SbSn$ (R5) и Sb_3Sn_4 (R6) существуют при низких температурах, а во второй соединении Sb_3Sn_4 (R6) разлагается при более высокой температуре (рис. 1д).

Аналогично различаются и политермические разрезы, построенные для двух вариантов 3D-модели фазовой диаграммы. При дополнительном экспериментальном изучении тройной системы Ag-Sb-Sn подобного рода разрезы помогут лучше и быстрее определить характеристики соединения Sb_3Sn_4 .

Выводы

Разработаны две версии компьютерной 3D-модели фазовой диаграммы системы Ag-Sb-Sn, различающиеся температурными границами существования соединения Sb_3Sn_4 . В первой версии предполагается его устойчивость во всем температурном диапазоне вплоть до комнатной температуры. Эта версия характеризуется тремя non-вариантными реакциями с участием расплава и эвтектидным превращением с участием полиморфных модификаций олова, прогнозируемым в субсолидусе. 3D-модель этой версии конструируется из 99-ти поверхностей и 42-х фазовых областей. Второй вариант 3D-модели воспроизводит строение фазовой диаграммы при условии существования Sb_3Sn_4 в ограниченном диапазоне температур $325-242.4^\circ C$. В этом случае к трем non-вариантным превращениям с участием расплава дополнительно прогнозируются две четырехфазные реакции в субсолидусе. Модель фазовой диаграммы включает 111 поверхностей и 44 фазовые области.

На основе обоих вариантов 3D-модели фазовой диаграммы Ag-Sb-Sn проведен расчет изо- и политермических сечений. Полученные модели расширяют прогностические функции фазовой диаграммы и могут быть использованы для анализа экспериментальных данных в системах, построенных на основе бинарной системы Sb-Sn. Стоит отметить, что компьютерные 3D-модели фазовых диаграмм могут быть использованы при разработке цифровых паспортов сплавов [33] и, в частности, образую-

щихся в данной системе. Следующим этапом в цифровизации фазовой диаграммы Ag-Sb-Sn должны быть ее цифровые двойники, учитывающие изменение стехиометрии соединения Sb_3Sn_4 при понижении температуры.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы

- Xu, J., Wu, M., Pu, J., Xue, S. (2020) Novel Au-based solder alloys: a potential answer for electrical packaging problem, *Adv. Mater. Science and Engineering*, 4969647. 1-16. <https://doi.org/10.1155/2020/4969647>.
- Peng, J., Wang, M., Sadeghi, B., Wang, R., Liu, H., Cavaliere, P. (2021) Increasing shear strength of Au-Sn bonded joint through nano-grained interfacial reaction products, *J. Mater. Sci.*, 56, 7050-7062. <https://doi.org/10.1007/s10853-020-05623-1>.
- Wang, X., Zhang, L., Li, M. (2022) Structure and properties of Au-Sn lead-free solders in electronic packaging, *Mater. Trans.*, 63, 93-104. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-M2021200>.
- Chen, S.-W., Chen, C.-C., Gierlotka, W., Zi, A.-R., Chen, P.-Y., Wu, H.-J. (2008) Phase equilibria of the Sn-Sb binary system. *J. Electron. Mater.*, 37(7), 992-1002. <https://doi.org/10.1007/s11664-008-0464-x>.
- Hansen, M., Anderko, K. (1958) Constitution of binary alloys. New York: McGraw Hill. 1175 p.
- Predel, B., Schwermann, W. (1971) Constitution and thermodynamics of the antimony-tin system. *J. Inst. Metals*, 99, 169-172.
- Vassiliev, V., Lelaurain, M., Hertz, J. (1997) A new proposal for the binary (Sn, Sb) phase diagram and its thermodynamic properties based on a new e.m.f. study, *J. Alloys Compd*, 247(1-2), 223-233. [https://doi.org/10.1016/s0925-8388\(96\)02654-0](https://doi.org/10.1016/s0925-8388(96)02654-0).
- Ohtani, H., Okuda, K., Ishida, K. (1995) Thermodynamic study of phase equilibria in the Pb-Sn-Sb system, *J. Phase Equilib*, 16, 416-429. <https://doi.org/10.1007/BF02645349>.
- COST Action 531 - Atlas of Phase Diagrams for Lead-Free Soldering. Vol. 1. Vydavatelství KNIHAR, Brno; 2008. 289 p.
- Kroupa, A., Vízdal, J. (2007) The Thermodynamic database for the development of modern lead-free solders, *Defect Diffus. Forum*, 263, 99-104. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.263.99>.
- COST MP0602 - Handbook of high-temperature lead-free solders - Atlas of phase diagrams. Vol. 1. K-economy and Tiskárna Helbich, Brno; 2012. 218 p.
- Gierlotka, W.J. (2020) On the binary Sb-Sn system: ab initio calculation and thermodynamic remodeling, *J. Mater. Sci.*, 55, 347-357. <https://doi.org/10.1007/s10853-019-03934-6>.
- Zhang, J., Wang, J., Yuan, Y.A. (2021) Thermodynamic assessment of the Mg-Sn-Sb ternary system, *CALPHAD*, 75, 102361. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2021.102361>.
- Ge, J., Tong, Q., Rong, M., Ye, H., Bai, Y., Wang, J. (2023) Thermodynamic description of the Au-Sb-Sn ternary system, *Metals*, 13(6), 1082-1099. <https://doi.org/10.3390/met13061082>.
- Lysenko, V.A. (2019) Thermodynamic reassessment of the Sb-Sn and In-Sb-Sn systems, *J. Alloys Compd*, 776, 850-857. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.10.223>.
- Schmetterer, C., Polt, J., Flandorfer, H. (2018) The phase equilibria in the Sb-Sn system - Part II: experimental results, *J. Alloys Compd*, 743, 523-536. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.11.367>.
- Borzzone, G., Delsante, S., Li, D., Novakovic, R. (2021) New insights into phase equilibria of the Sb-Sn system, *J. Phase Equilib. Diffus.*, 42, 63-76. <https://doi.org/10.1007/s11669-020-00849-7>.
- Лысенко, В.А. (2020) Термодинамическое моделирование системы Ag-Sb-Sn, *Журн. физ. химии*, 94(9), 1303-1311. 10.31857/S0044453720090174.
- Chen, S.-W., Chen, P.-Y., Chin, C.-N., Huang, Y.-C., Wang, C.-H. (2008) Phase equilibria of the Sn-Sb-Ag ternary system (I): experimental, *Metall. Mater. Trans. A*, 39A, 3191-3198. <https://doi.org/10.1007/s11661-008-9673-4>.
- Gierlotka, W., Huang, Y.C., Chen, S.W. (2008) Phase equilibria of the Sn-Sb-Ag ternary system (II): calculation, *Metall. Mater. Trans. A*, 39A, 3199-3209. <https://doi.org/10.1007/s11661-008-9671-6>.
- Ghosh, G., Loomans, M., Fine, M.E. (1994) An investigation of phase equilibria of the

- Bi-Sb-Sn system, *J. Electron. Mater.*, 23(7), 619-623. <https://doi.org/10.1007/BF02653347>.
22. Manasijević, D., Vřešťál, J., Minić, D., Kroupa, A., Živković, D., Živković, Ž. (2007) Phase equilibria and thermodynamics of the Bi-Sb-Sn ternary system, *J. Alloys Compd.*, 438(1-2), 150-157. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2006.08.021>.
23. Minić, D., Kolarević, M., Manasijević, D., Čosović, V., Živković, D., Talijan, N., Marković, M. (2012) Characterization of alloys and liquidus projections of ternary Bi-Sb-Sn system, *High Temp. Mater. Processes*, 31(1), 19-25. <https://doi.org/10.1515/htmp.2011.124>.
24. Manasijević, D., Vřešťál, J., Minić, D., Kroupa, A., Živković, D., Živković, Ž. (2008) Experimental investigation and thermodynamic description of the In-Sb-Sn ternary system, *J. Alloys Compd.*, 450, 193-199. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2006.10.075>
25. Vassiliev, V., Feutelais, Y., Sghaier, M., Legendre, B. (2001) Thermodynamic investigation in In-Sb, Sb-Sn and In-Sb-Sn liquid systems, *J. Alloys Compd.*, 314, 198-205. [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(00\)01243-3](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(00)01243-3).
26. Васильев, В.П., Лежандр, Б. (2007) Термодинамические свойства и фазовые равновесия в системе In-Sn-Sb, *Неорган. матер.*, 43(8), 903-916. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=9550681>.
27. Vorob'eva, V.P., Zelenaya, A.E., Lutsyk, V.I., Lamueva, M.V. (2020) 3D computer models of the T-x-y diagrams, forming the LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ T-x-y-z diagram, *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 11(3), 345-354. <https://doi.org/10.17586/2220-8054-2020-11-3-345-354>.
28. Lutsyk, V.I., Zelenaya, A.E., Zyryanov, A.M. (2008) Multicomponent systems simulation by the software of "Diagrams Designer", *J. Materials, Methods & Technologies. International Scientific Publications*, 2(1), 176-184.
29. Prince, A. (1966) Alloy phase equilibria. Amsterdam-London-New York: Elsevier Publ. Comp., 290 p.
30. Луцык, В.И., Воробьева, В.П. (2016) 3D-модель T-x-y диаграммы Bi-In-Sn для конструирования микроструктуры сплавов, *Журн. неорган. химии*, 61(2), 200-219. [10.7868/S0044457X16020124](https://doi.org/10.7868/S0044457X16020124).
31. Воробьева, В.П., Зеленая, А.Э., Луцык, В.И., Парфенова, М.Д., Балданов, В.Д. (2023) Коррекция компьютерной 3D-модели фазовой диаграммы системы LiCl-PrCl₃-KCl по термограммам, *Журн. неорган. химии*. 68(8) 1090-1098. [10.31857/S0044457X23600524](https://doi.org/10.31857/S0044457X23600524).
32. Lutsyk, V.I., Vorob'eva, V.P., Shodorova, S.Ya. (2015) Determining the conditions for changes of the three-phase reaction type in a V-Zr-Cr system, *Russ. J. Phys. Chem.*, 89(13), 2331-2338. <http://link.springer.com/article/10.1134/S0036024415130245>.
33. Zelenaya, A.E., Vorob'eva, V.P., Lutsyk, V.I., Parfenova, M.D. (2024) Creating a digital passport based on the spatial computer model of the isobaric phase diagram for the Ag-Au-Sb system, *Mater. Sci. Eng. B*, 304(117365). <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2024.117365>.

Информация об авторах

В.П. Воробьева, д.ф.-м.н., доц., сектор компьютерного конструирования материалов, Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (Улан-Удэ, Российская Федерация). 8(3012)415863

А.Э. Зеленая, к.ф.-м.н., сектор компьютерного конструирования материалов, Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (Улан-Удэ, Российская Федерация). 8(3012)415863

В.И. Луцык, д.х.н., проф., сектор компьютерного конструирования материалов, Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (Улан-Удэ, Российская Федерация). 8(3012)415863

М.Д. Парфенова, сектор компьютерного конструирования материалов, Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (Улан-Удэ, Российская Федерация). 8(3012)415863.

References

- Xu, J., Wu, M, Pu, J., Xue, S. (2020) Novel Au-based solder alloys: a potential answer for electrical packaging problem, *Adv. Mater. Science and Engineering*, 4969647. 1-16. <https://doi.org/10.1155/2020/4969647>.
- Peng, J., Wang, M., Sadeghi, B., Wang, R., Liu, H., Cavaliere, P. (2021) Increasing shear strength of Au-Sn bonded joint through nano-

- grained interfacial reaction products, *J. Mater. Sci.*, 56, 7050–7062. <https://doi.org/10.1007/s10853-020-05623-1>.
3. Wang, X., Zhang, L., Li, M. (2022) Structure and properties of Au-Sn lead-free solders in electronic packaging, *Mater. Trans.*, 63, 93-104. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MT-M2021200>.
 4. Chen, S.-W., Chen, C.-C., Gierlotka, W., Zi, A.-R., Chen, P.-Y., Wu, H.-J. (2008) Phase equilibria of the Sn-Sb binary system. *J. Electron. Mater.*, 37(7), 992-1002. <https://doi.org/10.1007/s11664-008-0464-x>.
 5. Hansen, M., Anderko, K. (1958) Constitution of binary alloys. New York: McGraw Hill. 1175 p.
 6. Predel, B., Schwermann, W. (1971) Constitution and thermodynamics of the antimony-tin system. *J. Inst. Metals*, 99, 169-172.
 7. Vassiliev, V., Lelaurain, M., Hertz, J. (1997) A new proposal for the binary (Sn, Sb) phase diagram and its thermodynamic properties based on a new e.m.f. study, *J. Alloys Compd*, 247(1-2), 223-233. [https://doi.org/10.1016/s0925-8388\(96\)02654-0](https://doi.org/10.1016/s0925-8388(96)02654-0).
 8. Ohtani, H., Okuda, K., Ishida, K. (1995) Thermodynamic study of phase equilibria in the Pb-Sn-Sb system, *J. Phase Equilib*, 16, 416-429. <https://doi.org/10.1007/BF02645349>.
 9. COST Action 531 - Atlas of Phase Diagrams for Lead-Free Soldering. Vol. 1. Vydavatelství KNIHAR, Brno; 2008. 289 p.
 10. Kroupa, A., Vizdal, J. (2007) The Thermodynamic database for the development of modern lead-free solders, *Defect Diffus. Forum*, 263, 99-104. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.263.99>.
 11. COST MP0602 - Handbook of high-temperature lead-free solders - Atlas of phase diagrams. Vol. 1. K-economy and Tiskárna Helbich, Brno; 2012. 218 p.
 12. Gierlotka, W. J. (2020) On the binary Sb-Sn system: ab initio calculation and thermodynamic remodeling, *J. Mater. Sci.*, 55, 347-357. <https://doi.org/10.1007/s10853-019-03934-6>.
 13. Zhang, J., Wang, J., Yuan, Y.A. (2021) Thermodynamic assessment of the Mg-Sn-Sb ternary system, *CALPHAD*, 75, 102361. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2021.102361>.
 14. Ge, J., Tong, Q., Rong, M., Ye, H., Bai, Y., Wang, J. (2023) Thermodynamic description of the Au-Sb-Sn ternary system, *Metals*, 13(6), 1082-1099. <https://doi.org/10.3390/met13061082>.
 15. Lysenko, V.A. (2019) Thermodynamic re-assessment of the Sb-Sn and In-Sb-Sn systems, *J. Alloys Compd*, 776, 850-857. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.10.223>.
 16. Schmetterer, C., Polt, J., Flandorfer, H. (2018) The phase equilibria in the Sb-Sn system - Part II: experimental results, *J. Alloys Compd*, 743, 523-536. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.11.367>.
 17. Borzone, G., Delsante, S., Li, D., Novakovic, R. (2021) New insights into phase equilibria of the Sb-Sn system, *J. Phase Equilib. Diffus.*, 42, 63-76. <https://doi.org/10.1007/s11669-020-00849-7>.
 18. Lysenko, V.A. (2020) Thermodynamic modeling of the Ag-Sb-Sn system, *Russ. J. Phys. Chem. A*, 94(9), 1747-1755. <https://doi.org/10.34/S0036024420090174>.
 19. Chen, S.-W., Chen, P.-Y., Chin, C.-N., Huang, Y.-C., Wang, C.-H. (2008) Phase equilibria of the Sn-Sb-Ag ternary system (I): experimental, *Metall. Mater. Trans. A*, 39A, 3191-3198. <https://doi.org/10.1007/s11661-008-9673-4>.
 20. Gierlotka, W., Huang, Y.C., Chen, S.W. (2008) Phase equilibria of the Sn-Sb-Ag ternary system (II): calculation, *Metall. Mater. Trans. A*, 39A, 3199-3209. <https://doi.org/10.1007/s11661-008-9671-6>.
 21. Ghosh, G., Loomans, M., Fine, M.E. (1994) An investigation of phase equilibria of the Bi-Sb-Sn system, *J. Electron. Mater.*, 23(7), 619-623. <https://doi.org/10.1007/BF02653347>.
 22. Manasijević, D., Vrešćal, J., Minić, D., Kroupa, A., Živković, D., Živković, Ž. (2007) Phase equilibria and thermodynamics of the Bi-Sb-Sn ternary system, *J. Alloys Compd.*, 438(1-2), 150-157. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2006.08.021>.
 23. Minić, D., Kolarević, M., Manasijević, D., Čosović, V., Živković, D., Talijan, N., Marković, M. (2012) Characterization of alloys and liquidus projections of ternary Bi-Sb-Sn system, *High Temp. Mater. Processes*, 31(1), 19-25. <https://doi.org/10.1515/htmp.2011.124>.
 24. Manasijević, D., Vrešćal, J., Minić, D., Kroupa, A., Živković, D., Živković, Ž. (2008) Experimental investigation and thermodynamic description of the In-Sb-Sn ternary system, *J. Alloys Compd.*, 450, 193-199. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2006.10.075>.
 25. Vassiliev, V., Feutelais, Y., Sghaier, M., Legendre, B. (2001) Thermodynamic investigation in In-Sb, Sb-Sn and In-Sb-Sn liquid systems, *J. Al-*

- loys *Compd.*, 314, 198-205. [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(00\)01243-3](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(00)01243-3).
26. Vasil'ev, V.P., Legendre, B. (2007) Thermodynamic properties of alloys and phase equilibria in the In-Sb-Sn system, *Inorgan. Mater.*, 43, 803-815. <https://doi.org/10.1134/S0020168507080018>.
27. Vorob'eva, V.P., Zelenaya, A.E., Lutsyk, V.I., Lamueva, M.V. (2020) 3D computer models of the T-x-y diagrams, forming the LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ T-x-y-z diagram, *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 11(3), 345-354, <https://doi.org/10.17586/2220-8054-2020-11-3-345-354>.
28. Lutsyk, V.I., Zelenaya, A.E., Zyryanov, A.M. (2008) Multicomponent systems simulation by the software of "Diagrams Designer", *J. Materials, Methods & Technologies. International Scientific Publications*, 2(1), 176-184.
29. Prince, A. (1966) Alloy phase equilibria. Amsterdam-London-New York: Elsevier Publ. Comp., 290 p.
30. Луцык, В.И., Воробьева, В.П. (2016) 3D-модель T-x-y диаграммы Bi-In-Sn для конструирования микроструктуры сплавов, *Журн. неорганической химии*, 61(2), 200-219. [10.7868/S0044457X16020124](https://doi.org/10.7868/S0044457X16020124).
31. Lutsyk, V.I., Vorob'eva, V.P., Shodorova, S.Ya. (2015) Determining the conditions for changes of the three-phase reaction type in a V-Zr-Cr system, *Russ. J. Phys. Chem.*, 89(13), 2331-2338. <http://link.springer.com/article/10.1134/S0036024415130245>.
32. Vorob'eva, V.P., Zelenaya, A.E., Lutsyk, V.I., Parfenova, M.D., Baldanov, V.D. (2023) Correction of the 3D computer model of the phase diagram for the LiCl-PrCl₃-KCl system using thermoanalytical curves, *Russ. J. Inorgan. Chem.*, 68(8), 1045-1053. <https://doi.org/10.1134/S0036023623601174>.
33. Kimmig, J., Zeche, S., Schubert, U.S. (2021) Digital transformation in materials science: a paradigm change in material's development, *Adv. Mater.*, 33, 2004940. <https://doi.org/10.1002/adma.202004940>.
34. Arroyave, R. (2022) Phase stability through Machine Learning, *J. Phase Equilib. Diffus.*, 43, 606-628. <https://doi.org/10.1007/s11669-022-01009-9>.
35. Milman, B.L., Zhurkovich, I.K. (2020) Big data in modern chemical analysis, *J. Anal. Chem.*, 75, 443-452. <https://doi.org/10.1134/S1061934820020124>.
36. Zelenaya, A.E., Vorob'eva, V.P., Lutsyk, V.I., Parfenova, M.D. (2024) Creating a digital passport based on the spatial computer model of the isobaric phase diagram for the Ag-Au-Sb system, *Mater. Sci. Eng. B*, 304(117365). <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2024.117365>.

Information about the authors

V.P. Vorob'eva, Dr. Sci. (Phys.-math.), Sector of Computer Materials Design, Institute of Physical Materials Science of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (Ulan-Ude, Russian Federation). +7(3012)415863

A.E. Zelenaya, Cand. Sci. (Phys.-math.), Sector of Computer Materials Design, Institute of Physical Materials Science of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (Ulan-Ude, Russian Federation). +7(3012)415863

V.I. Lutsyk, Dr. Sci. (Chem.), Prof., Sector of Computer Materials Design, Institute of Physical Materials Science of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (Ulan-Ude, Russian Federation). +7(3012)415863

M.D. Parfenova, Sector of Computer Materials Design, Institute of Physical Materials Science of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (Ulan-Ude, Russian Federation). 8(3012)415863.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 03.10.2024; одобрена после рецензирования 17.01.2025; принята к публикации 03.02.2025.

The article was received by the editorial board on 03 Oct 2024; approved after reviewing 17 Jan. 2025; accepted for publication 03 Feb. 2025.