

Научная статья
УДК 544.344.015.3
DOI 10.18101/2306-2363-2025-3-27-37

Технология прототипирования фазовых областей диаграммы Ag-Cu-Ni

© **Парфенова Мария Дмитриевна**

инженер,
Институт физического материаловедения СО РАН
Россия, 670047, г. Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, 6
krygentul@gmail.com

© **Луцык Василий Иванович**

доктор химических наук, профессор,
заведующий сектором компьютерного конструирования материалов,
Институт физического материаловедения СО РАН
Россия, 670047, г. Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, 6
vluts@ipms.bsnet.ru

© **Базарова Сэлмэг Жалсановна**

студентка,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова,
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, Ул. Смолина, 24а
seshka.lol@gmail.com

© **Цыремпилов Булат Ганжурович**

студент,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова,
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, Ул. Смолина, 24а
bulat2006@mail.ru

© **Сандаков Дамдин Доржиевич**

студент,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова,
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, Ул. Смолина, 24а

Аннотация. Визуализация и анализ трехмерных фазовых диаграмм состояния представляют значительную сложность из-за их пространственной структуры, что нередко приводит к ошибкам интерпретации, как это имело место в исторических диаграммах даже для простейших систем. В данной работе предложен инновационный подход к решению этой проблемы с использованием аддитивных технологий. Разработана и реализована методика создания физических разборных 3D-моделей фазовых диаграмм. На примере системы Ag-Cu-Ni выполнен комплекс работ: от построения цифровой модели на основе опубликованных экспериментальных и термодинамических данных в программных средах («Конструктор PD», Blender) до 3D-печати прототипа. Полученные разборные модели обеспечивают наглядную визуализацию сложных фазовых взаимодействий, способствуют выявлению ошибок в интерпретации диаграмм и могут служить эффективным инструментом в научных исследованиях и образовательном процессе в области материаловедения. Описаны ключевые этапы методики, преимущества подхода и возникающие технические сложности.

Ключевые слова: фазовая диаграмма состояния, тройная система, 3D-печать, аддитивные технологии, визуализация, ликвидус, солидус, субсолидус.

Благодарности

Исследование выполнено в соответствии с госзаданием ФГБУН ИФМ СО РАН, проект № 0270-2024-0013.

Для цитирования

Технология прототипирования фазовых областей диаграммы Ag-Cu-Ni / М. Д. Парфенова, В. И. Луцык, С. Ж. Базарова [и др.] // Вестник Бурятского государственного университета. Химия. Физика. 2025. Вып. 3. С. 27–37.

Введение

Создание разборных 3D-моделей фазовых диаграмм (ФД) позволяет наглядно демонстрировать их сложное строение и контролировать корректность интерпретации экспериментальных и расчетных данных на их изо- и политермических разрезах [1]. В статье мы рассматриваем 3D-печать ФД Ag-Cu-Ni на примере ее аналогов и прототипов. Первый такой прототип (без распада твердого раствора Cu(Ni)), рассмотренный в [2, р. 172, Fig. 172] и названный схематичной диаграммой, состоит из 8 фазовых областей и 13 поверхностей.

Аналогом ФД Ag-Cu-Ni является самая простая диаграмма с трехфазным равновесием (рис. 1), которая размещена на обложке знаменитого журнала¹. С этой же диаграммы начинается повествование о GEMINI [4] — минимизаторе энергии Гиббса из Thermo Suite, пакета хемоинформатики, посвященного термодинамике (рис. 1). Несмотря на очевидную простоту этой ФД (6 фазовых областей и 9 поверхностей), ее умудрились исказить в двух авторитетных монографиях прошлого века [4; 5], добавив лишнюю линию между двумя бинарными эвтектиками (рис. 1b, c). Эту ошибку заимствовали и авторы статьи нашего столетия (рис. 1a) [7]. Еще одна ошибка монографий [5; 6] связана с расположением фаз A(C) и B не на линиях пересечения солидусной и сольвусной поверхностей (на изотермическом разрезе трехфазной области (рис. 1b,c)).

Компьютерные модели ФД Ag-Cu-Ni и ее прототипы обсуждены в [7–9] и классифицированы как «валидированные» (отсутствие противоречий в интерпретации экспериментальных и расчетных данных на вертикальных и горизонтальных разрезах ФД [10–11]). Появление на вертикальных разрезах трехфазной области Ag+Cu+Ni в последующих публикациях [12; 13] той же объединенной международной команды [11] требует перевода ФД Ag-Cu-Ni в разряд «верифицированные» (противоречия с интерпретацией данных на разрезах, построенных по экспериментальным и(или) расчетным данным) и разработки нового варианта компьютерной модели ФД.

¹ Journal of Phase Equilibria and Diffusion. URL: <https://link.springer.com/journal/11669> (accessed 07.08.2025).

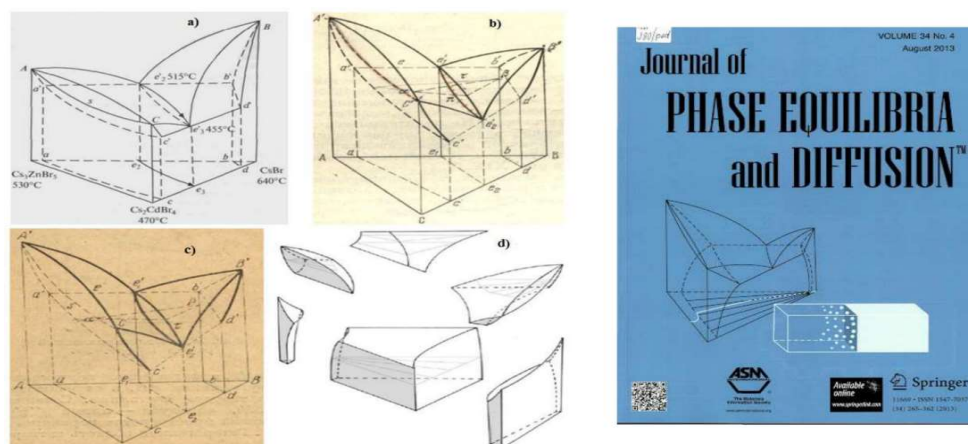


Рис. 1. Изображение фазовых диаграмм в различных источниках:
а) [5]; б) [6, рис. 592, с. 614]; в) [8, рис. XIX.19, с. 243]; д) [8]

Основная часть

Для преодоления неточностей, связанных с использованием традиционных средств отображения и интерпретации фазовых диаграмм состояния, была реализована методика создания физических разборных 3D-моделей. Работы начались с компьютерного моделирования в программном обеспечении «Конструктор PD» [14], позволившего построить трехмерную модель прототипа T - x_1 - x_2 диаграммы Ag-Cu-Ni из 9 фазовых областей и 14 поверхностей, 3D-модель была построена на основе 23 базовых точек с уточнением кривизны линий и поверхностей (рис. 2) [7]. Прототип фазовой диаграммы — это некая «идеальная» модель системы, в которой присутствуют все фазовые поверхности и области, они искусственно «растягиваются» для достижения наиболее полного понимания внутреннего строения системы (рис. 2). Далее проанализированы требования к графикам фазовых областей, компьютерная модель прототипа была разделена на 9 фазовых областей, которые в дальнейшем станут элементами разборной фазовой диаграммы (рис. 3).

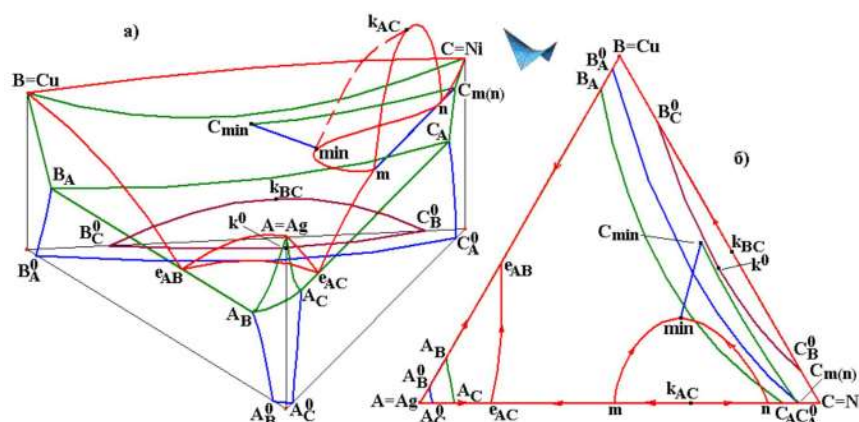


Рис. 2. 3D-модель прототипа T - x_1 - x_2 диаграммы Ag-Cu-Ni (а) и x_1 - x_2 проекция (б)

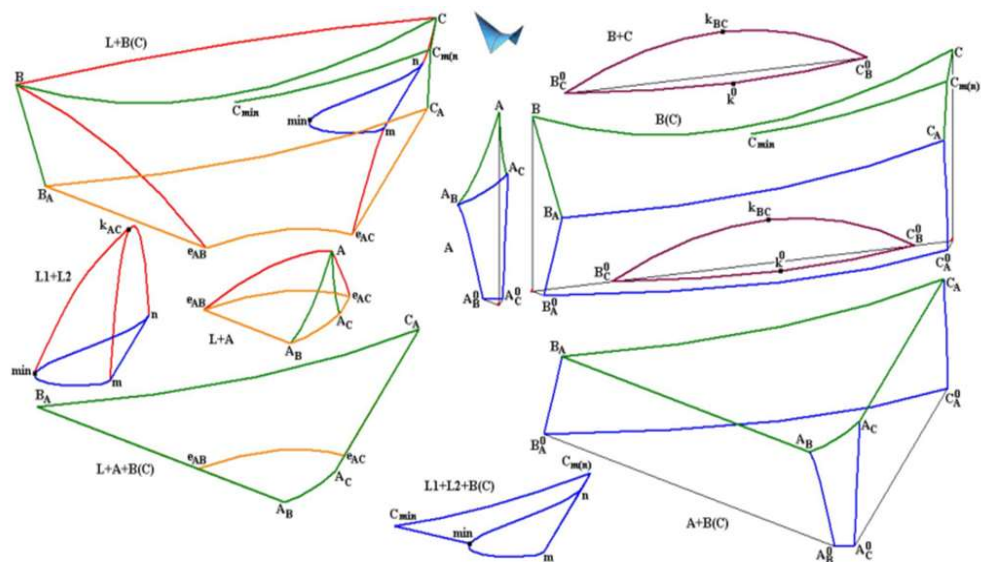


Рис. 3. Прототип развернутой фазовой диаграммы с 9 фазовыми областями

При дальнейшей работе следует обратить особое внимание на фазовую область $L1+L2+B(C)$ (рис. 4), она ограничена тремя линейчатыми поверхностями, образованными при движении горизонтальных сегментов вдоль направляющих линий. Для повышения качества ее визуализации следует рассмотреть два варианта выпуклостей для линий m_min , n_min и $C_{m(n)}C_{min}$:

1. Две ветви m_min_n должны быть выпуклы вниз, а линия $C_{m(n)}C_{min}$ должна быть выпукла вверх, не допуская перехода линии в экстремум.
2. Две ветви цикла m_min_n должны быть выпуклы вверх, а линия $C_{m(n)}C_{min}$ должна быть выпукла вниз. Обе кривые не должны переходить в экстремумы.

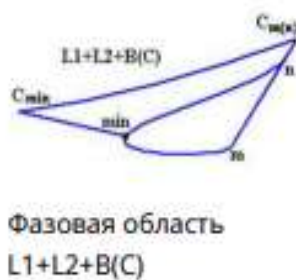


Рис. 4. Фазовая область $L1+L2+B(C)$

Для создания 3D-модели фазовой диаграммы, пригодной для печати, был выполнен следующий алгоритм:

1. Преобразование координат: исходные данные о фазовых равновесиях, полученные в программном обеспечении Конструктор PD, преобразованы из бари-

центрической системы координат (T - x_1 - x_2) в декартову (T - x - y) [11] и импортированы в среду 3D-моделирования Blender (рис. 5).

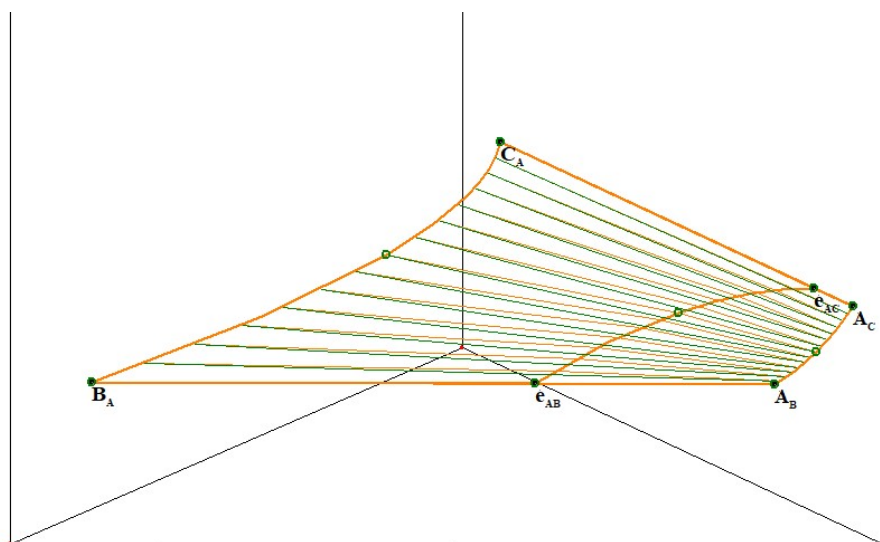


Рис. 5. Фазовая область $L1 + L2 + B$ (C) в программе Конструктор PD

2. В Blender была создана плоскость, на которую проецировались фазовые области (рис. 6), на основе полученных точек были построены контуры фазовых областей с использованием кривых Bezier. Этот метод обеспечивает высокую точность и гибкость при создании сложных контуров.

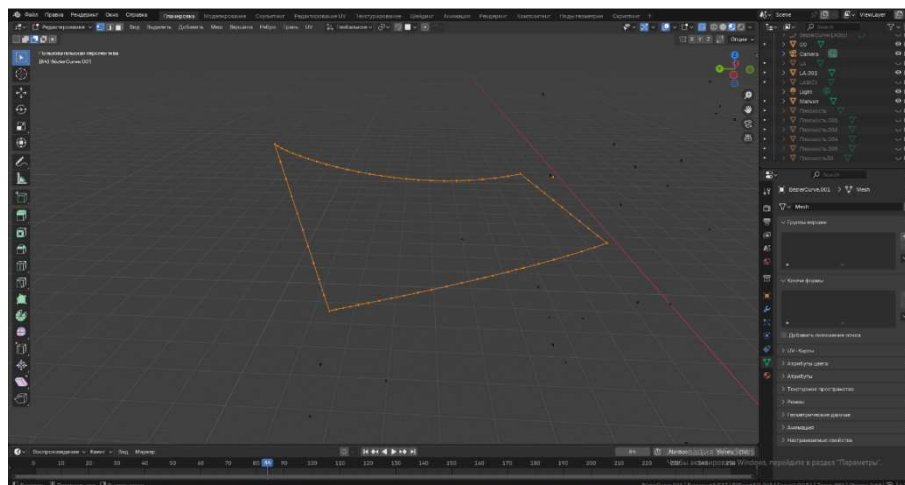


Рис. 6. Работа в Blender: построение плоскости фазовой области $L1 + L2 + B$ (C)

3. Используется инструмент Grid Fill для заполнения контуров сеткой (рис. 7).

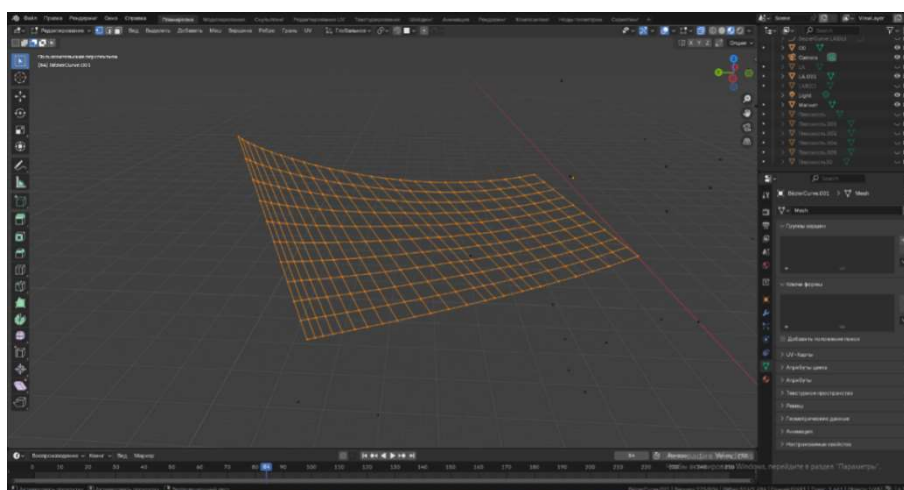


Рис. 7. Заполнение контура сеткой Grid Fill

4. Подготовка к печати (слайсинг): итоговая модель экспортируется из Blender в формат, поддерживаемый программным обеспечением для слайсинга. В слайсере модель была разбита на слои, определены параметры печати (температура, скорость, заполнение) и сгенерирован G-код, необходимый для управления 3D-принтером (рис. 8–10).

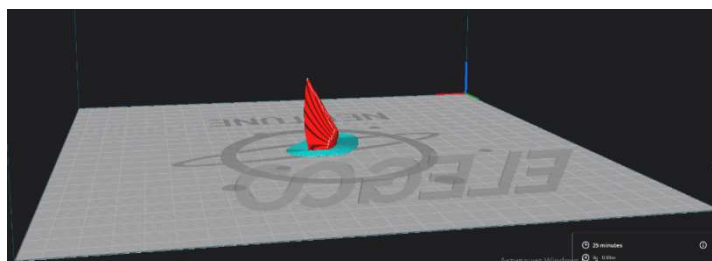


Рис. 8. Работа слайсера: общий вид нарезанной модели

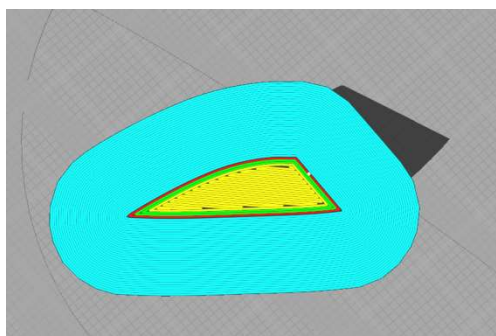


Рис. 9. Первый слой (голубой — кайма, красный — внешний контур, желтый — заполнение). Кайма используется для увеличения площади прилегания к столу

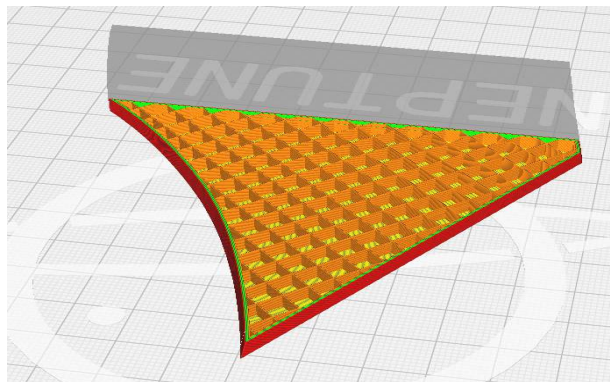


Рис. 10. Заполнение сеткой

После заполнения всех контуров получаем сформированную итоговую 3D-модель готовых для печати (рис. 11).

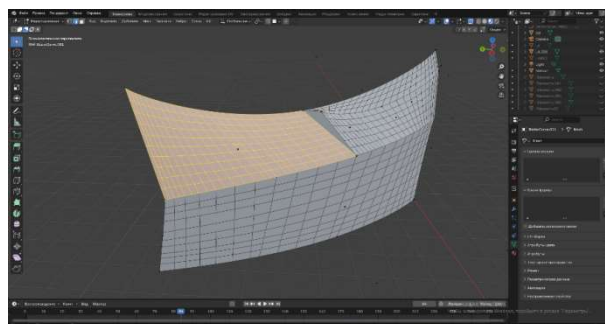


Рис. 11. Итоговый вид детали готовый для печати

3D-печать: с использованием полученного G-кода модель подетально по каждой фазовой области (рис. 3) отправляется на печать 3D-принтере (рис. 12–13).

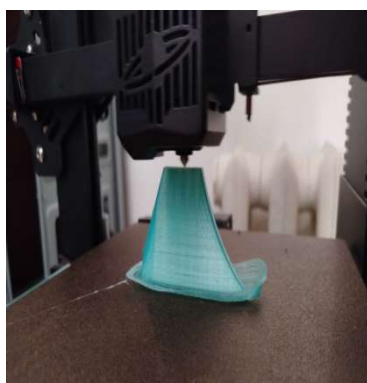


Рис. 12. Процесс печати фазовой области $L+A+B(C)$

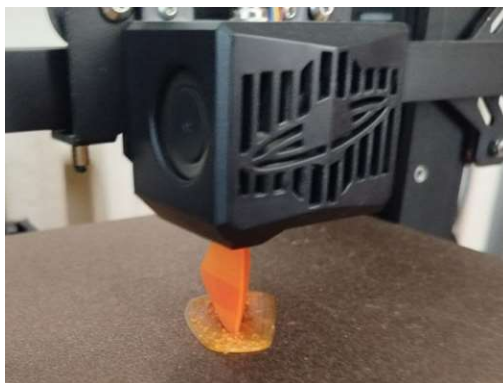


Рис. 13. Процесс печати фазовой области L+A

В результате был получен физический прототип фазовой диаграммы, который можно использовать для визуализации и анализа фазовых равновесий (рис. 14). Полученная трехмерная модель позволяет визуализировать сложные фазовые взаимодействия и улучшает понимание геометрического строения системы Ag-Cu-Ni.



Рис. 14. Готовая модель прототипа T-x-y диаграммы Ag-Cu-Ni

Заключение и выводы

При использовании 3D-печати для создания фазовых диаграмм могут возникать различные сложности, которые могут негативно повлиять на качество и точность моделей, такие как:

- **неравномерная подача материала.** Проблемы с экструзией могут привести к недостаточному или избыточному количеству материала, что вызывает дефекты в модели, такие как пропуски или наплывы;
- **деформация модели.** Во время печати может происходить деформация углов и краев, что может быть вызвано неправильной настройкой температуры или скорости печати;
- **проблемы с адгезией.** Модель может отклеиваться от печатного стола, что приводит к сбоям в процессе печати и необходимости повторного запуска. Это

может быть связано с неправильным выравниванием стола или неподходящими условиями для первого слоя;

– **низкая детализация мелких элементов.** При печати мелких деталей могут возникать проблемы с их воспроизведением, что затрудняет отображение тонких линий и структур на диаграмме;

– **вибрации и механические дефекты.** Неправильная работа механических частей принтера может привести к смещению слоев или образованию волн на поверхности модели. Это требует регулярного обслуживания оборудования.

Перечисленные сложности подчеркивают необходимость тщательной подготовки и настройки оборудования, а также внимательного подхода к моделированию для достижения качественных результатов при 3D-печати разборных ФД.

В настоящей работе предложен и успешно реализован инновационный подход к визуализации и анализу трехмерных фазовых диаграмм состояния с использованием технологии 3D-печати для создания физических разборных моделей. На примере системы Ag-Cu-Ni разработаны комплексная методика, компьютерное моделирование («Конструктор PD»), 3D-дизайн (Blender), слайсинг и FDM-печать. Применение аддитивных технологий для данной цели обладает убедительными преимуществами: обеспечивает глубокое понимание геометрического строения, позволяет тактильно изучать взаимосвязи фазовых областей, способствует выявлению ошибок и представляет высокую ценность для образовательного процесса. Основные сложности связаны с ограничениями по детализации мелких элементов и риском деформации при печати. Перспективы дальнейших исследований видятся в применении данной методики к другим сложным тройным и многокомпонентным системам, повышении точности и детализации моделей за счет использования более совершенных технологий 3D-печати (например, SLA, DLP), разработке специализированного ПО для автоматизированного перевода термодинамических данных в оптимизированные для печати 3D-модели, а также активном внедрении созданных моделей в учебный процесс.

Разработка разборных 3D-моделей может стать ценным инструментом для образования и научных исследований, позволяя исследователям и студентам наглядно изучать фазовые диаграммы и их строение. Открываются перспективы для конкуренции с 3D-печатью в химии, биохимии и фармацевтике [15].

Литература

1. Парфенова М. Д., Ламуева М. В., Луцык В. И. Разработка технических заданий для прототипирования разборных Т-х-у диаграмм (Excel+AutoCAD технология): учебно-методическое пособие. Улан-Удэ: Изд-во Бурят. гос. ун-та, 2021. 58 с. Текст: непосредственный.
2. Prince A. Alloy Phase Equilibria // Elsevier, Amsterdam. 1966. 283 p.
3. Cheynet B., Bonnet C., Stankov M. GEMINI-DiagPlot: 2D & 3D ternary phase diagrams. *CALPHAD*. 2009; 33(2): 312–316.
4. Аносов В. Я., Погодин С. А. Основные начала физико-химического анализа. Москва; Ленинград: Изд-во АН СССР, 1947. 876 с. Текст: непосредственный.
5. Аносов В. Я., Озерова М. И., Фиалков Ю. Я. Основы физико-химического анализа. Москва: Наука, 1976. 504 с. Текст: непосредственный.
6. Зайцева И. Я., Ковалева И. С., Федоров В. А. Четырехкомпонентная система CsBr-Cs₂ZnBr₄-Cs₂CdBr₄-Cs₂HgBr₄ // Журнал неорганической химии. 2010. Вып. 55, № 2. С. 261–268. Текст: непосредственный.

7. Parfenova M. D., Lutsyk V. I., Vorob'eva V. P., Zelenaya A. E. Puzzles of phase regions and their complex elements for the virtual ${}^{\text{ep}}Q > P_{\text{ce}}$ and real Ag-Cu-Ni (A-B-C) diagrams // Book of abstracts. XXIV International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia. Ivanovo, 2024. P. 353.
8. Парфенова М. Д., Воробьева В. П., Луцык В. И. 3D-компьютерная модель Т-х-у диаграммы Ag-Cu-Ni: верификация разрезов в атласе фазовых диаграмм для бессвинцовых припоев // Весті Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Сэрыя хімічных навук. 2021. Вып. 57, № 1. С. 15–24.
9. Vorob'eva V. P., Lutsyk V. I., Parfenova M. D. Problems in Imaging the Decomposition of Liquid and Solid Solutions in the Ag-Cu-Ni and Ag-Cu-Pb Systems. *Rus. J. Inorg. Chem.* 2023. 68(1): 69–77.
10. Atlas of Phase Diagrams for Lead-Free Soldering // Eds. Dinsdale A. et al. Brno: Vydavatelství KNIHAR, 2008. V. 1. 289 p.
11. Liu X. J., Wang C. P., Gao F., Ohnuma I., Ishida K. Thermodynamic Calculation of Phase Equilibria in the Sn-Ag-Cu-Ni-Au System. *J. Electronic Materials.* 2007. 36(11): 1429–1441.
12. Liu X.J., Gao F., Wang C.P., Ishida K. Thermodynamic Assessments of the Ag-Ni Binary and Ag-Cu-Ni Ternary Systems. *J. Electronic Materials.* 2008. 37(2): 210–217.
13. Ohnuma I., Saegusa T., Takaku Y., Wang C. P., Liu X. J., Kainuma R., Ishida K. Microstructural Evolution of Alloy Powder for Electronic Materials with Liquid Miscibility Gap. *J. Electronic Materials.* 2009. 38(1): 2–9.
14. Lutsyk V. I., Zelenaya A. E., Zyryanov A. M. Multicomponent Systems Simulation by the Software of «Diagrams Designer». *Journal Materials, Methods & Technologies. International Scientific Publications.* 2008. 2(1): 176–184.
15. Гордеев Е. Г., Анаников В. П. Общедоступные технологии 3D-печати в химии, биохимии и фармацевтике: приложения, материалы, перспективы // Успехи химии. 2020. № 89(12). С. 1507–1561. Текст: непосредственный.

Статья поступила в редакцию 07.10.2025; Одобрена после рецензирования 10.11.2025; Принята к публикации 17.11.2025.

Prototyping Technology for Phase Regions of the Ag-Cu-Ni Diagram

Mariya D. Parfenova

Engineer

Institute of Physical Material Science SB RAS

6 Sakhyanovoy St., 670047 Ulan-Ude, Russia

krygentul@gmail.com

Vasilii I. Lutsyk

Dr. Sci. (Chemistry), Prof., Head of Computer Designing Material Section

Institute of Physical Material Science SB RAS

6 Sakhyanovoy St., 670047 Ulan-Ude, Russia

vluts@ipms.bscnet.ru

Selmeg Zh. Bazarova

Student

Dorzhi Banzarov Buryat State University

24a Smolina St., 670000 Ulan-Ude, Russia

seshka.lol@gmail.com

Bulat G. Tsyrempilov

Student

Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina St., 670000 Ulan-Ude, Russia
bulat2006@mail.ru

Damdin D. Sandakov

Student

Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina St., 670000 Ulan-Ude, Russia

Abstract. Visualization and analysis of three-dimensional phase diagrams present significant challenges due to their spatial structure, which often leads to interpretation errors, as occurred in historical diagrams even for the simplest systems. The article proposes an innovative approach to solving this problem using additive technologies. A method for creating physical, disassemblable 3D models of phase diagrams has been developed and implemented. Using the Ag-Cu-Ni system as an example, a comprehensive workflow was completed, from building a digital model based on published experimental and thermodynamic data in software environments (*PD Constructor*, *Blender*) to 3D printing the prototype. The resulting disassemblable models provide clear visualization of complex phase interactions, help identify errors in diagram interpretation, and can serve as an effective tool in scientific research and in the educational process in the field of materials science. The key stages of the method, the advantages of the approach, and the associated technical challenges are described.

Keywords: phase diagram of state, ternary system, 3D printing, additive manufacturing, visualization, liquidus, solidus, subsolidus.

Acknowledgments

The study was carried out in accordance with the state assignment FSBIS IPMS SB RAS, project No. 0270-2024-0013

For citation

Parfenova M. D., Lutsyk V. I., Bazarova S. Zh., Tsyrempilov B. G., et al. Prototyping Technology for Phase Regions of the Ag-Cu-Ni Diagram. *Bulletin of Buryat State University. Chemistry. Physics*. 2025; 3: 27–37 (in Russ.).

The article was submitted 07.10.2025; approved after reviewing 10.11.2025; accepted for publication 17.11.2025.