

УДК 541.122

DOI: [https://doi.org/10.17721/1728-2209.2025.1\(60\).11](https://doi.org/10.17721/1728-2209.2025.1(60).11)

Олексій ЯКОВЕНКО, канд. хім. наук

ORCID ID: 0000-0003-4948-5101

e-mail: oleksii.yakovenko@knu.ua

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

Олександр РОЙК, д-р хім. наук, проф.

ORCID ID: 0000-0001-9705-1100

e-mail: oleksandr_roik@knu.ua

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

Ярославна КАШИРІНА, д-р філософії

ORCID ID: 0000-0002-2901-6140

e-mail: yasya.loba@gmail.com

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ, Україна

ЛОКАЛЬНЕ АТОМНЕ ВПОРЯДКУВАННЯ РОЗПЛАВІВ Al – Fe 20 ат. % – Sn

Вступ. Легування антифрикційних сплавів на основі алюмінію дозволяє підвищити зносостійкість і термічну стабільність. У промисловості вже широко використовуються мідь, кобальт, хром як добавки до алюмінієво-оловяних сплавів, але в науковій літературі відсутні роботи щодо впливу заліза. Встановлення закономірностей атомного впорядкування у розплавах Al-Fe-Sn дозволить спрогнозувати фазовий склад відповідних композитів.

Методи. Було отримано криві розсіювання рентгенівського випромінювання розплавів складу $Al_{67}Fe_{20}Sn_{13}$, $Al_{60}Fe_{20}Sn_{20}$ та $Al_{52}Fe_{20}Sn_{28}$ за 1500 °C. Проведено реконструкцію структурних моделей розплавів за допомогою методу оберненого Монте Карло, для характеристики яких застосовано статистично-геометричний метод Вороного – Делоне.

Результати. Підтверджено мікронеоднорідну будову розплавів $Al_{80-x}Fe_{20}Sn_x$ ($x=13, 20, 28$) за 1500 °C. Завдяки аналізу отриманих структурних моделей встановлено закономірності локального оточення атомів зі зміною концентрації.

Висновки. Показано, що за низького вмісту олова для сплавів $Al_{80-x}Fe_{20}Sn_x$ під час охолодження розплаву можливе отримання збагачених на Fe та Sn фаз в алюмінієвій матриці, що погіршуватиме експлуатаційні характеристики антифрикційних матеріалів, у зв'язку з чим рекомендовано використовувати складу $Al_{60}Fe_{20}Sn_{20}$ та $Al_{52}Fe_{20}Sn_{28}$.

Ключові слова: рентгенівська дифракція; металічний розплав; метод оберненого Монте Карло; ближній порядок.

Вступ

Алюмінієві сплави широко застосовуються як антифрикційні матеріали в авто- та літакобудуванні вже майже століття (Stuczynski, 1997). Їхньому впровадженню сприяла здатність витримувати значно вищі навантаження та краща стійкість до корозії, ніж у випадку поширених раніше сплавів на основі системи Sn-Pb (бабітів). Алюмінієві антифрикційні матеріали мають композитну будову і складаються з матриці із твердої фази й рівномірно розподілених краплень м'якої фази, наприклад, олова. Під час експлуатації м'яка фаза витискується на поверхню тертя і виступає як змашувальний матеріал, підвищуючи термін служби деталей. Для поліпшення стійкості за високих температур застосовують легування сплавів Al-Sn добавками кремнію, кобальту, магнію, міді, хрому тощо (Harris et al., 2000; Summer et al., 2019; Bhat et al., 2019; Huang et al., 2022).

Перспективною добавкою до антифрикційних алюмінієвих сплавів є залізо, оскільки у процесі отримання композитного матеріалу можливе формування твердих тугоплавких інтерметалідів Al_3Fe у складі матриці (Turchanin et al., 2014). Для потрібної системи Al-Fe-Sn проведені дослідження не показали утворення стабільних потрібних фаз (Fartushna et al., 2022; Wang et al., 2022), але необхідно врахувати можливу присутність станідів феруму, що негативно впливатиме на характеристики композиту. Оскільки компоненти системи Al-Sn не змішуються у твердому стані й мають значну різницю в температурах плавлення (McAlister & Kahan, 1983), то отримання рівномірного розподілу олова в алюмінієвій матриці є непростим технологічним завданням. Серед запропонованих методів варто виокремити швидке загартовування (Harris et al., 2000), осадження з газової фази (Bangert et al., 1996), порошкову металургію (Dixon, &

Skelly, 1973), механічне легування (Liu et al., 2008) і лиття з перемішуванням (Pathak, & Mohan, 2003). Для останнього методу попереднє встановлення особливостей атомного впорядкування в рідкій фазі дає змогу передбачити фазовий склад готового композиту. Враховуючи викладене, нами було проведено синтез сплавів системи Al-Fe-Sn і досліджено їхню будову після процесу плавлення.

Методи

Досліджувані потрібні сплави були отримані шляхом сплавлення у дуговій печі КПМТМ-2 з безвитратним вольфрамовим електродом у інертній аргонів атмосфері чистих компонентів: алюмінію (чист. 99,999 %), карбонільного заліза (99,95 %) та олова (99,999 %). Зважування зразків до та після виплавки показало, що зменшення маси зразка не перевищувало 0,2 мас. %.

Отримання кривих інтенсивності розсіяного рентгенівського випромінювання проводилось за допомогою високотемпературного рентгенівського θ - θ дифрактометра в діапазоні кутів розсіювання 6–94°. Генерація рентгенівського випромінювання здійснювалась трубкою БСВ-28 з молібденовим анодом ($\lambda(K\alpha) = 0,71069$ Å). Монохроматизацію випромінювання забезпечували пара збалансованих диференціальних Zr-Y-фільтрів. Досліджуваний зразок масою близько 10 г поміщали в корундовий тигель і нагрівали в атмосфері гелію до 1500 °C за допомогою вольфрамового нагрівача. Температура під час експерименту підтримувалась автоматично з точністю ± 5 °C. З метою гомогенізації розплаву перед початком отримання кривих розсіювання рентгенівського випромінювання систему витримували протягом 15 хв. Згідно з методикою, для кожного зразка було послідовно отримано три криві, які усереднювались, після чого проводились інтерполяція з кроком 0,25° у

© Яковенко Олексій, Ройк Олександр, Каширіна Ярославна, 2025

всьому кутовому інтервалі, нормування з урахуванням дисперсійних поправок у атомних факторах (Cromer, & Waber, 1965; Cromer, & Liberman, 1970), кутової залежності інтенсивності некогерентного розсіювання (Bol, 1967) і поляризації випромінювання. Подальша математична обробка полягала в розрахунку структурного фактора (СФ) $a(S)$, функції парного розподілу атомів (ФПРА) $g(r)$ (Казіміров та ін., 2009).

Для реконструювання структурних моделей розплавів було використано метод оберненого Монте Карло (McGreevy, & Pusztai, 1988; McGreevy, 2001), а саме – програмний пакет програм RMCA 3.14. Під час розрахунку кількість атомів у основній комірни становила 10^4 , а стехіометричне співвідношення ними відповідало складу розплаву. Як обмеження у процесі моделювання було використано атомні густини розплавів, а також розраховані відстані найближчого підходу атомів: для взаємодії атомів одного типу відповідні величини були отримані з ФПРА розплавів простих речовин як точки перетину кривої з віссю абсцис перед першим максимумом ($d_{min}(Al-Al) =$

$2,15 \text{ \AA}$, $d_{min}(Fe-Fe) = 2,05 \text{ \AA}$, $d_{min}(Sn-Sn) = 2,55 \text{ \AA}$), тоді як для гетероатомних взаємодій під час вибору значень було враховано ентальпії змішування відповідних подвійних систем ($(d_{min}(Al-Fe) = 2,10 \text{ \AA}$, $d_{min}(Al-Sn) = 2,35 \text{ \AA}$, $d_{min}(Fe-Sn) = 2,30 \text{ \AA}$). Після розрахунку парціальні СФ і ФПРА були усереднені по п'яти комірках, а тривимірні моделі були проаналізовані за допомогою статистично-геометричного методу Вороного – Делоне.

Результати

Розраховані з кривих інтенсивності розсіяного рентгенівського випромінювання структурні фактори та функції парного розподілу атомів розплавів $Al_{67}Fe_{20}Sn_{13}$, $Al_{60}Fe_{20}Sn_{20}$ та $Al_{52}Fe_{20}Sn_{28}$ наведені на рис. 1. Для порівняння також вказані відповідні залежності досліджених раніше подвійних розплавів $Fe_{20}Sn_{80}$ за 1110°C (Казіміров, & Смик, 2000) та $Al_{78}Fe_{22}$ за 1380°C (Roik et al., 2014). Структурні параметри розплавів, а саме положення та висота першого максимуму СФ (S_1 та $a(S_1)$), положення та висота першого максимуму ФПРА (R_1 і $g(R_1)$), положення першого мінімуму ФПРА наведені в табл. 1.

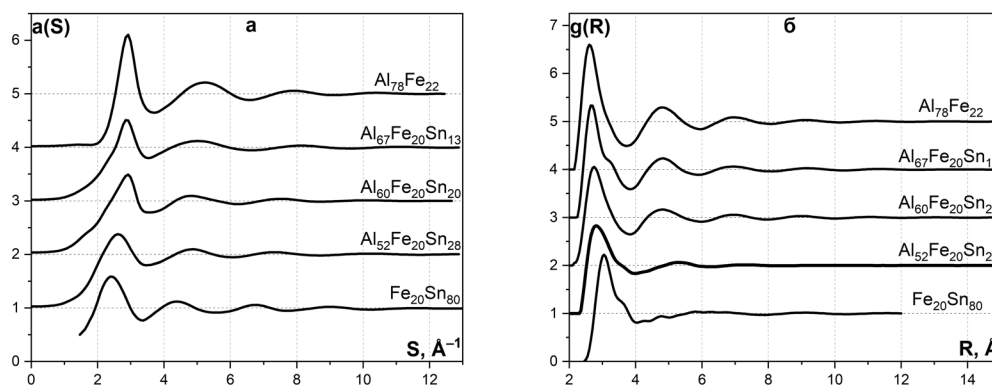


Рис. 1. СФ (а) і ФПРА (б) розплавів уздовж перерізу $Al_{80-x}Fe_{20}Sn_x$

Під час переходу від подвійного розплаву $Al_{78}Fe_{22}$ до потрійного розплаву з 13 ат. % та 20 ат. % олова спостерігається зміна форми першого максимуму СФ (рис. 1а), а саме – поява напливу на лівій гілці, незначний зсув положення в бік менших значень вектора розсіювання та значне зменшення інтенсивності. Висоти другого та наступних максимумів СФ також різко зменшуються, а положення зміщується до менших значень S . Зі збільшенням вмісту олова до 28 ат. % асиметрія першого максимуму СФ зменшується, його положення різко

зміщується в бік характерних для розплавів із високим вмістом олова значень, що можна пояснити зростанням мікронеоднорідності розплаву та збільшення внеску в загальну дифракційну картину від мікрогруповань з атомів Sn. Різка зміна інтенсивності першого максимуму СФ пояснюється набагато більшою розсіювальною здатністю атомів Sn порівняно з атомами Al та Fe, оскільки розсіювання рентгенівських променів відбувається на електронній оболонці атома і значно зростає зі збільшенням порядкового номера елемента.

Таблиця 1

Структурні параметри розплавів $Al_{80-x}Fe_{20}Sn_x$ за 1500°C

Склад	$S_1, \pm 0,01 \text{ \AA}^{-1}$	$a(S_1)$	$R_1, \pm 0,02 \text{ \AA}$	$g(R_1)$	$R_{min}, \pm 0,05 \text{ \AA}$
$Al_{78}Fe_{22}$	2,90	2,11	2,61	2,60	3,75
$Al_{67}Fe_{20}Sn_{13}$	2,89	1,53	2,67	2,35	3,85
$Al_{60}Fe_{20}Sn_{20}$	2,88	1,49	2,74	2,06	3,85
$Al_{52}Fe_{20}Sn_{28}$	2,61	1,38	2,81	1,83	4,00
$Fe_{20}Sn_{80}$	2,44	1,59	3,05	2,23	4,00

Зі зростанням вмісту олова в розплавах $Al_{80-x}Fe_{20}Sn_x$ спостерігається різке зменшення інтенсивності першого максимуму ФПРА (рис. 1, б) і монотонне зміщення положення в бік більших значень. Оскільки R_1 корелює з найбільш очікуваною найближчою відстанню між атомами, то збільшення R_1 із заміною атомів алюмінію на більші атоми олова є закономірним. Збільшення значень R_{min} свідчить про зростання об'єму простору, який можна зарахувати до найближчого оточення атома. Друга та наступні осциляції ФПРА швидко затухають за високих концентрацій олова в розплаві, але це не свідчить про

загальне зменшення рівня структурної організації розплаву та відсутність кластерів, оскільки накладання парціальних ФПРА у протифазі також може призводити до спостережуваного ефекту.

Дискусія і висновки

Додаткову інформацію про особливості взаємодії атомів у розплаві можна отримати за допомогою комп'ютерного моделювання, зокрема застосовуючи метод оберненого Монте Карло, який у випадку представленої роботи полягав у ітераційному зменшенні відхилення між експериментальним структурним фактором і СФ

модельної комірки. За низьких значеннях фактора збіжності та хорошому відтворенні особливостей форми, висоти й положення максимумів досягається структурна відповідність отриманих моделей дослідженням розпла-

вам. Найкраще зміни в міжатомній взаємодії зі збільшенням вмісту олова в розплаві простежуються на парціальних структурних факторах взаємодії в парах атомів Стануму ($a_{\text{SnSn}}(S)$) (рис. 2, а) і парах атомів Феруму ($a_{\text{FeFe}}(S)$) (рис. 2, б).

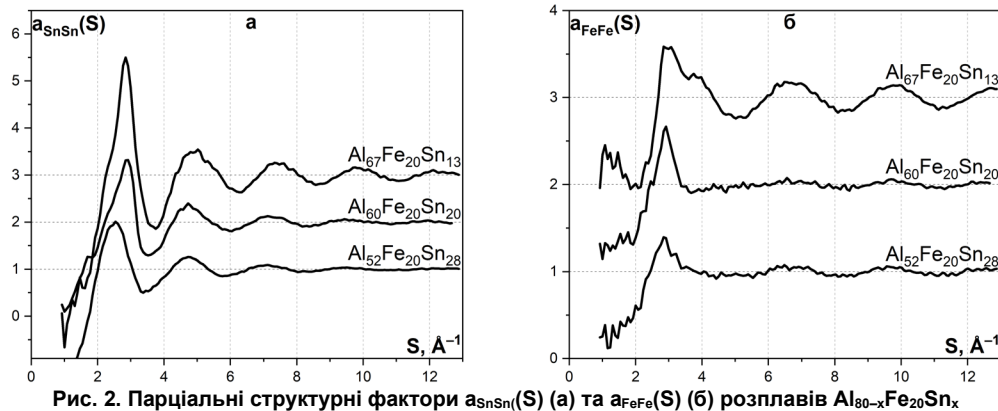


Рис. 2. Парціальні структурні фактори $a_{\text{SnSn}}(S)$ (а) та $a_{\text{FeFe}}(S)$ (б) розплавів $\text{Al}_{80-x}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_x$

Для розплаву складу $\text{Al}_{67}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{13}$ необхідно наголосити на значній висоті першого максимуму $a_{\text{SnSn}}(S)$, що вказує на високий рівень структурної організації. Також перші максимуми $a_{\text{SnSn}}(S)$ розплавів складу $\text{Al}_{67}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{13}$ та $\text{Al}_{60}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{20}$ є асиметричними, причому внесок від мікрогрупувань із структурою рідкого олова зростає зі збільшенням вмісту Sn. Парціальний структурний фактор $a_{\text{FeFe}}(S)$ розплаву $\text{Al}_{67}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{13}$ характеризується роздвоєнням першого максимуму, тобто реалізуються два різні типи структурної організації. Парціальні $a_{\text{FeFe}}(S)$ розплавів $\text{Al}_{60}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{20}$ та $\text{Al}_{52}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{28}$ подібні між собою і практично не мають дальніх осциляцій, що вказує на відсутність кореляції у взаємному розташуванні атомів Fe і статистичний розподіл атомів цього сорту в розплаві.

Для кількісної характеристики отриманих структурних моделей було використано метод Вороного – Делоне, зокрема розраховано математичні сподівання (K_{sph}) і середньоквадратичне відхилення (σ_{sph}) розподілів коефіцієнта сферичності поліедрів Вороного, побудованих навколо атомів різного типу (табл. 2). Для потрібних розплавів наведені значення практично однакові для поліедрів Вороного навколо атомів Al та Fe, що вказує на ідентичність локального оточення, тоді як підвищення K_{sph} разом із зниженням σ_{sph} у процесі переходів до атомів Sn свідчить про реалізацію більш щільного пакування атомів.

Таблиця 2

Значення параметрів розподілу K_{sph} для розплавів $\text{Al}_{80-x}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_x$ за 1500 °C

Склад	Al		Fe		Sn	
	K_{sph}	σ_{sph}	K_{sph}	σ_{sph}	K_{sph}	σ_{sph}
$\text{Al}_{67}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{13}$	0,634	0,0402	0,631	0,0386	0,695	0,0290
$\text{Al}_{60}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{20}$	0,639	0,0357	0,634	0,0367	0,675	0,0287
$\text{Al}_{52}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{28}$	0,639	0,0351	0,637	0,0367	0,687	0,0275

Геометричний простір модельних комірок було розбито на симплекси Делоне, серед яких виділено кластери щільних некристалічних пакувань, утворені поєднаними гранями слабкодеформованих тетраедрів і квартоктаедрів. Результати аналізу такого розбиття наведені в табл. 3. Як можна бачити, загальний вміст щільних кластерів невисокий, що пояснюється високою

температурою розплаву. Треба позначити розплав $\text{Al}_{67}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{13}$, для якого частка тетраедричних кластерів сягає 1,4 % від загальної кількості атомів, а також значне перевищення вмісту атомів Sn у кластерах порівняно зі стехіометрією розплаву.

Таблиця 3

Частка атомів у складі тетраедричних ξ_T і квартоктаедричних ξ_O кластерів і вміст атомів кожного типу у кластерах для розплавів $\text{Al}_{80-x}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_x$ за 1500 °C

Склад	Тетраедричні кластери				Квартоктаедричні кластери			
	ξ_T	Al, %	Fe, %	Sn, %	ξ_O	Al, %	Fe, %	Sn, %
$\text{Al}_{67}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{13}$	1,40	31,67	17,6	50,73	0,50	49,83	19,71	30,46
$\text{Al}_{60}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{20}$	0,22	40,82	12,29	48,89	0,24	30,75	18,59	50,66
$\text{Al}_{52}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{28}$	0,28	24,77	24,86	50,37	0,37	43,14	13,67	43,19

Використовуючи структурні моделі, було розраховано частку атомів кожного типу на відстані R_{min} від атомів Sn, тобто в найближчому оточенні (рис. 3). Важливим результатом є встановлення збагачення локального оточення атомів Sn атомами цього ж типу порівняно зі стехіометрією розплаву. Збіднення локального оточення атомами Al пояснюється нижчою енергетикою взаємодії в парах атомів Al – Sn порівняно з парою Fe –

Sn, оскільки питома ентальпія змішування розплавів алюміній – олово є позитивною у всьому концентраційному діапазоні з максимумом 4 кДж/моль за 45 ат. % олова і 700 °C (Predel, 1991), а питома ентальпія змішування розплавів алюміній – залізо є негативною з екстремумом –21 кДж/моль при 45 ат. % заліза і 1500 °C (Desai, 1987). Цікаво, що для розплаву $\text{Al}_{67}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{13}$ вміст

атомів Fe у найближчому оточенні атомів Sn суттєво перевищує стехіометричні 20 ат.%, що може свідчити про

можливе утворення інтерметалідів системи Fe-Sn під час швидкого загартування розплаву.

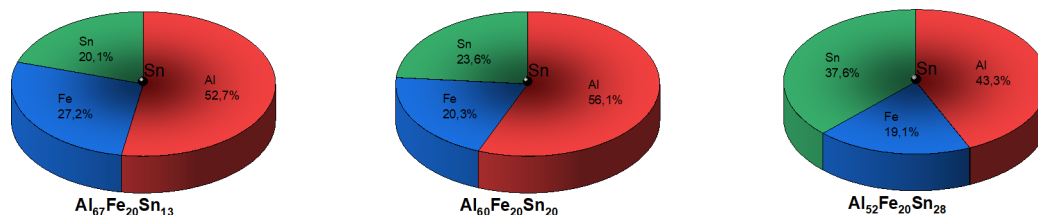


Рис. 3. Частки атомів у найближчому оточенні атомів Sn розплавів $\text{Al}_{80-x}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_x$

Отже, на основі проведено дослідження було встановлено мікронеоднорідну будову потрійних розплавів уздовж перерізу $\text{Al}_{80-x}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_x$ 1500 °C, розраховано структурні характеристики розплавів, показано відмінність складу мікрогрупповань у розплаві $\text{Al}_{67}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{13}$ завдяки входженню атомів Fe в найближче оточення атомів Sn. Під час отримання антифрикційних матеріалів з рідкої фази рекомендовано використовувати склади $\text{Al}_{60}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{20}$ та $\text{Al}_{52}\text{Fe}_{20}\text{Sn}_{28}$.

Внесок авторів: Олексій Яковенко – проведення рентгенодифракційних експериментів, моделювання, написання. Олександр Роїк – концептуалізація, методологія, проведення рентгенодифракційних експериментів перегляд і редагування. Ярославна Каширіна – моделювання, аналіз, обговорення.

Джерела фінансування. Ця робота була підтримана Міністерством освіти і науки України (договір № БФ/30-2021 на виконання завдань перспективного плану розвитку наукового напрямку "Математичні науки та природничі науки" в Київському національному університеті імені Тараса Шевченка).

Список використаних джерел

- Казіміров, В. П., & Смик, С. Ю. (2000). Аналіз структури розплавів системи Fe-Sn з використанням методу RMCA. *Журнал фізичних досліджень*, 4(1), 68–72.
- Казіміров, В. П., Сольський, В. Е., Роїк, О. С., & Самсоніков, О. В. (2009). *Структура неупорядкованих систем. Теорія. Експериментальні методи, моделювання*. ВПЦ "Київський університет".
- Bol, W. (1967). The use of balanced filters in X-ray diffraction. *Journal of Scientific Instruments*, 44(9), 736–739. <https://doi.org/10.1088/0950-7671/44/9/323>
- Bangert, H., Eisenmenger-Sittner, C., & Bergauer, A. (1996). Deposition and structural properties of two-component metal coatings for tribological applications. *Surface and Coatings Technology*, 80(1–2), 162–170. [https://doi.org/10.1016/0257-8972\(95\)02704-1](https://doi.org/10.1016/0257-8972(95)02704-1)
- Bhat, J., Pinto, R., & Satyanarayan. (2019). A review on effect of alloying elements and heat treatment on properties of Al-Sn alloy. *Materials Today: Proceedings*, 35, 340–343. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.01.617>
- Cromer, D. T., & Liberman, D. (1970). Relativistic calculation of anomalous scattering factors for X rays. *The Journal of Chemical Physics*, 53(5), 1891–1898. <https://doi.org/10.1063/1.1674266>
- Cromer, D. T., & Waber, J. T. (1965). Scattering factors computed from relativistic Dirac-Slater wave functions. *Acta Crystallographica*, 18(1), 104–109. <https://doi.org/10.1107/S0365110X6500018X>
- Desai, P. D. (1987). Thermodynamic properties of selected binary aluminum alloy systems. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 16(1), 109–124. <https://doi.org/10.1063/1.555788>
- Dixon, C. F., & Skelly, H. M. (1973). Properties of aluminium-tin alloys produced by powder metallurgy. *Powder Metallurgy*, 16(32), 366–373. <https://doi.org/10.1179/pom.1973.16.32.012>
- Fartushna, I., Bajenova, I., Khvan, A., Shilundeni, S., Cheverikin, V., Bulanova, M., & Kondratiev, A. (2022). Analysis of the effect of the liquid phase separation on the formation of microstructure in the Sn-Fe and Al-Fe-Sn alloys. *Materials Characterization*, 186, 111812. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2022.111812>
- Harris, S. J., McCartney, D. G., Horlock, A. J., & Perrin, C. (2000). Production of ultrafine microstructure in Al-Sn, Al-Sn-Cu and Al-Sn-Cu-Si alloys for use in tribological applications. *Materials Science Forum*, 331. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/msf.331-337.519>
- Huang, S., Zhu, B., Zhang, Y., Liu, H., Wu, S., & Xie, H. (2022). Microstructure Comparison for AlSn20Cu Antifriction Alloys Prepared by Semi-Continuous Casting, Semi-Solid Die Casting, and Spray Forming. *Metals*, 12(10). <https://doi.org/10.3390/met12101552>

- Liu, X., Zeng, M. Q., Ma, Y., & Zhu, M. (2008). Wear behavior of Al-Sn alloys with different distribution of Sn dispersoids manipulated by mechanical alloying and sintering. *Wear*, 265(11–12), 1857–1863. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2008.04.050>
- McAlister, A. J., & Kahan, D. J. (1983). The Al-Sn (Aluminum-Tin) system. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 4(4), 410–414. <https://doi.org/10.1007/BF02868095>
- McGreevy, R. L. (2001). Reverse Monte Carlo modelling. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13(46), R877. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/13/46/201>
- McGreevy, R. L., & Pusztai, L. (1988). Reverse Monte Carlo simulation: A new technique for the determination of disordered structures. *Molecular Simulation*, 1(6), 359–367. <https://doi.org/10.1080/08927028808080958>
- Pathak, J. P., & Mohan, S. (2003). Tribological behaviour of conventional Al-Sn and equivalent Al-Pb alloys under lubrication. *Bulletin of Materials Science*, 26(3), 315–320. <https://doi.org/10.1007/BF02707453>
- Predel, B. (1991). Al-Sn (Aluminum-Tin). In O. Madelung (Ed.), *Landolt-Börnstein – Group IV Physical Chemistry 5A (Ac-Au – Au-Zr)*. Springer-Verlag. https://doi.org/10.1007/10000866_144
- Roik, O. S., Muratov, O. S., Yakovenko, O. M., Kazimirov, V. P., Golovataya, N. V., & Sokolskii, V. E. (2014). X-ray diffraction studies and Reverse Monte Carlo simulations of the liquid binary Fe-Si and Fe-Al alloys. *Journal of Molecular Liquids*, 197, 215–222. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2014.05.009>
- Stuczynski, T. (1997). Metallurgical problems associated with the production of aluminium-tin alloys. *Materials & Design*, 18(4–6), 369–372. [https://doi.org/10.1016/S0261-3069\(97\)00078-2](https://doi.org/10.1016/S0261-3069(97)00078-2)
- Summer, F., Grün, F., Offenbecher, M., & Taylor, S. (2019). Challenges of friction reduction of engine plain bearings – Tackling the problem with novel bearing materials. *Tribology International*, 131, 238–250. <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2018.10.042>
- Turchanin, M., Kolchugina, N., Watson, A., & Kroupa, A. (2014). Al-Fe binary phase diagram evaluation. *MSI Eureka*, 56, 20.10236.1.8. <https://doi.org/10.7121/msi-eureka-20.10236.1.8>
- Wang, C. P., Wang, M. S., Deng, Y. L., Zhang, J. B., Yang, S. Y., Huang, Y. X., & Liu, X. J. (2022). Phase equilibria in the Fe-Al-Sn ternary system. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 43(1), 51–57. <https://doi.org/10.1007/s11669-022-00941-0>

References

- Bol, W. (1967). The use of balanced filters in x-ray diffraction. *Journal of Scientific Instruments*, 44(9), 736–739. <https://doi.org/10.1088/0950-7671/44/9/323>
- Bangert, H., Eisenmenger-Sittner, C., & Bergauer, A. (1996). Deposition and structural properties of two-component metal coatings for tribological applications. *Surface and Coatings Technology*, 80(1–2), 162–170. [https://doi.org/10.1016/0257-8972\(95\)02704-1](https://doi.org/10.1016/0257-8972(95)02704-1)
- Bhat, J., Pinto, R., & Satyanarayan. (2019). A review on effect of alloying elements and heat treatment on properties of Al-Sn alloy. *Materials Today: Proceedings*, 35, 340–343. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.01.617>
- Cromer, D. T., & Liberman, D. (1970). Relativistic calculation of anomalous scattering factors for X Rays. *The Journal of Chemical Physics*, 53(5), 1891–1898. <https://doi.org/10.1063/1.1674266>
- Cromer, D. T., & Waber, J. T. (1965). Scattering factors computed from relativistic Dirac-Slater wave functions. *Acta Crystallographica*, 18(1), 104–109. <https://doi.org/10.1107/S0365110X6500018X>
- Desai, P. D. (1987). Thermodynamic properties of selected binary aluminum alloy systems. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 16(1), 109–124. <https://doi.org/10.1063/1.555788>
- Dixon, C. F., & Skelly, H. M. (1973). Properties of aluminium-tin alloys produced by powder metallurgy. *Powder Metallurgy*, 16(32), 366–373. <https://doi.org/10.1179/pom.1973.16.32.012>
- Fartushna, I., Bajenova, I., Khvan, A., Shilundeni, S., Cheverikin, V., Bulanova, M., & Kondratiev, A. (2022). Analysis of the effect of the liquid phase separation on the formation of microstructure in the Sn-Fe and Al-Fe-Sn alloys. *Materials Characterization*, 186, 111812. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2022.111812>
- Harris, S. J., McCartney, D. G., Horlock, A. J., & Perrin, C. (2000). Production of ultrafine microstructure in Al-Sn, Al-Sn-Cu and Al-Sn-Cu-Si

alloys for use in tribological applications. *Materials Science Forum*, 331. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/msf.331-337.519>

Huang, S., Zhu, B., Zhang, Y., Liu, H., Wu, S., & Xie, H. (2022). Microstructure Comparison for AlSn₂₀Cu Antifriction Alloys Prepared by Semi-Continuous Casting, Semi-Solid Die Casting, and Spray Forming. *Metals*, 12(10). <https://doi.org/10.3390/met12101552>

Kazimirov, V. P., & Smyk, S. Yu. (2000). The analysis of the melt structure of the Fe–Sn system using the RMCA method. *Journal of Physical Studies*, 4(1), 68–72. Publishing and Polygraphic Centre "Kyiv University" [In Ukrainian].

Kazimirov, V. P., Sokolskii, V. E., Roik, O. S., & Samsonnikov, O. V. (2009). *Structure of disordered systems. Theory, Experimental methods, modeling*. Publishing and Polygraphic Centre "The University of Kyiv".

Liu, X., Zeng, M. Q., Ma, Y., & Zhu, M. (2008). Wear behavior of Al–Sn alloys with different distribution of Sn dispersoids manipulated by mechanical alloying and sintering. *Wear*, 265(11–12), 1857–1863. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2008.04.050>

McAlister, A. J., & Kahan, D. J. (1983). The Al–Sn (Aluminum–Tin) system. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 4(4), 410–414. <https://doi.org/10.1007/BF02868095>

McGreevy, R. L. (2001). Reverse Monte Carlo modelling. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13(46), R877. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/13/46/201>

McGreevy, R. L., & Pusztai, L. (1988). Reverse Monte Carlo simulation: A new technique for the determination of disordered structures. *Molecular Simulation*, 1(6), 359–367. <https://doi.org/10.1080/08927028808080958>

Pathak, J. P., & Mohan, S. (2003). Tribological behaviour of conventional Al–Sn and equivalent Al–Pb alloys under lubrication. *Bulletin of Materials Science*, 26(3), 315–320. <https://doi.org/10.1007/BF020707453>

Predel, B. (1991). Al–Sn (Aluminum–Tin). In O. Madelung (Ed.), *Landolt-Börnstein – Group IV Physical Chemistry 5A (Ac–Au – Au–Zr)*. Springer-Verlag. https://doi.org/10.1007/10000866_144

Roik, O. S., Muratov, O. S., Yakovenko, O. M., Kazimirov, V. P., Golovataya, N. V., & Sokolskii, V. E. (2014). X-ray diffraction studies and Reverse Monte Carlo simulations of the liquid binary Fe–Si and Fe–Al alloys. *Journal of Molecular Liquids*, 197, 215–222. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2014.05.009>

Stuczyński, T. (1997). Metallurgical problems associated with the production of aluminium–tin alloys. *Materials & Design*, 18(4–6), 369–372. [https://doi.org/10.1016/S0261-3069\(97\)00078-2](https://doi.org/10.1016/S0261-3069(97)00078-2)

Summer, F., Grün, F., Offenbecher, M., & Taylor, S. (2019). Challenges of friction reduction of engine plain bearings – Tackling the problem with novel bearing materials. *Tribology International*, 131, 238–250. <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2018.10.042>

Turchanin, M., Kolchugina, N., Watson, A., & Kroupa, A. (2014). Al–Fe binary phase diagram evaluation. *MSI Eureka*, 56, 20.10236.1.8. <https://doi.org/10.7121/msi-eureka-20.10236.1.8>

Wang, C. P., Wang, M. S., Deng, Y. L., Zhang, J. B., Yang, S. Y., Huang, Y. X., & Liu, X. J. (2022). Phase equilibria in the Fe–Al–Sn ternary system. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 43(1), 51–57. <https://doi.org/10.1007/s11669-022-00941-0>

Отримано редакцією журналу / Received: 11.09.25

Прорецензовано / Received: 07.10.25

Схвалено до друку / Accepted: 14.10.25

Olexiy YAKOVENKO, PhD (Chem.)
ORCID ID: 0000-0003-4948-5101
e-mail: olexsii.yakovenko@knu.ua
Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

Oleksandr ROIK, DSc (Chem.), Prof.
ORCID ID: 0000-0001-9705-1100
e-mail: oleksandr_roik@knu.ua
Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

Yaroslava KASHIRINA, PhD (Chem.)
ORCID ID: 0000-0002-2901-6140
e-mail: yasya.loba@gmail.com
Frantsevich Institute for Problems in Materials Science, Kyiv, Ukraine

LOCAL ATOMIC ARRANGEMENT OF Al – Fe 20 at. % – Sn MELTS

Background. Alloying of the aluminum-based antifriction materials enhances the wear resistance and thermal stability. Copper, cobalt, and chromium are widely used in the industry as additions to aluminum–tin alloys; however, there are no studies on the influence of iron in the scientific literature. The determination of the peculiarities of atomic ordering in Al–Fe–Sn melts should allow to predict the phase composition of the corresponding composites.

Methods. The scattering curves of Al₆₇Fe₂₀Sn₁₃, Al₆₀Fe₂₀Sn₂₀ and Al₅₂Fe₂₀Sn₂₈ melts have been obtained at 1500 °C by means of X-ray diffraction. The structural models of melts have been reconstructed using Reverse Monte Carlo simulation, and statistical-geometric approach with Voronoi diagrams and Delaunay tessellations was applied for characterization.

Results. The micro-inhomogeneous structure of Al_{60-x}Fe₂₀Sn_x (x=13, 20, 28) melts at 1500 °C was confirmed. After the analysis of the obtained structural models, the regularities of changes in the local environment of atoms with concentration were established.

Conclusions. The possibility of the existence of the enriched in Fe and Sn phases in the aluminum matrix after solidification of the Al_{60-x}Fe₂₀Sn_x alloys with low tin content has been demonstrated. Such phases have a negative impact on the operational characteristics of antifriction materials, therefore the compositions Al₆₀Fe₂₀Sn₂₀ and Al₅₂Fe₂₀Sn₂₈ are more preferable.

Keywords: X-ray diffraction; metallic melt; Reverse Monte Carlo simulation; short range order.

Автори заявляють про відсутність конфлікту інтересів. Спонсори не брали участі в розробленні дослідження; у зборі, аналізі чи інтерпретації даних; у написанні рукопису; в рішенні про публікацію результатів.

The authors declare no conflicts of interest. The funders had no role in the design of the study; in the collection, analyses or interpretation of data; in the writing of the manuscript; in the decision to publish the results.