

УДК 544.3.032.72, 62-761, 625.1, 625.032.37

ПОДБОР ОПТИМАЛЬНОГО СОСТАВА ПОКРЫТИЯ ALTiZrVNb ПРИ ПОМОЩИ CALPHAD ПОДХОДОВ

© 2025 г. М. В. Киселев¹, А. А. Терехова^{1,*}, И. С. Бахтеев¹,
К. С. Литвинюк², К. И. Олейник^{1,3,**}

¹Уральский Федеральный Университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина,
ул. Мира 32, 620002, Екатеринбург, Россия

²Южно-Уральский государственный университет

(национальный исследовательский университет), 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76, Россия

³Институт металлургии УрО РАН, ул. Амундсена, 101, Екатеринбург, Россия

*E-mail: terekhovaalisia@yandex.ru

**E-mail: 1007o1007@gmail.com

Дата поступления: 03.03.2025

После доработки: 14.03.2025

Принята к публикации: 20.03.2025

С развитием научно-технологического прогресса изменились требования, предъявляемые к надёжности (повышению срока службы) узлов и деталей конструкций. Элементы машин, сделанные из высокоуглеродистой марганцевой стали, подвергаются износу, что может приводить к повышению затрат. Широко известно, что значительному износу подвержены конструкции, состоящие из стали 76, ГОСТ 51045-97. С помощью модификации поверхностного слоя с применением лазерной наплавки и последующего оплавления появляется возможность, путем активного перемешивания и скоростного затвердевания, происходящего при оплавлении, не только гомогенизировать структуру, но и реализовывать процессы закалки приповерхностных слоев наиболее нагруженных (уязвимых) зон. Используя методы CALPHAD в программном пакете ThermoCalc (номер версии программного обеспечения 2024.1.132110-55) было проведено моделирование влияния нанесённого защитного покрытия (AlTiZrVNb) с последующим оплавлением, на изменение фазового состава и распределение элементов на внешнем кристаллическом слое основы. Для проведения расчетов был выбран сплав состава $\text{Al}_{31.17}\text{Ti}_{18.55}\text{Zr}_{1.56}\text{V}_{27.53}\text{Nb}_{21.19}\text{Fe}$. При воздействии лазерного излучения на наплавленное покрытие, наблюдается активное взаимодействие компонентов покрытия с основным металлом (железом), вследствие чего образуется модифицированный верхний слой, содержащий в себе новые фазы с железом в составе. В связи с этим, при помощи математического моделирования, методом Шейла определены скорости кристаллизации и фазы, образующиеся при охлаждении в сплавах находящихся в части верхнего строения пути после процесса оплавления: $\text{Al}_{29.61}\text{Ti}_{17.62}\text{Zr}_{1.48}\text{V}_{26.15}\text{Nb}_{20.13}\text{Fe}_{5.00}$, $\text{Al}_{28.05}\text{Ti}_{16.70}\text{Zr}_{1.40}\text{V}_{24.78}\text{Nb}_{19.07}\text{Fe}_{10.00}$, $\text{Al}_{26.49}\text{Ti}_{15.77}\text{Zr}_{1.33}\text{V}_{23.40}\text{Nb}_{18.01}\text{Fe}_{15.00}$, $\text{Al}_{24.94}\text{Ti}_{14.84}\text{Zr}_{1.25}\text{V}_{22.02}\text{Nb}_{16.95}\text{Fe}_{20.00}$, $\text{Al}_{23.38}\text{Ti}_{13.91}\text{Zr}_{1.17}\text{V}_{20.65}\text{Nb}_{15.89}\text{Fe}_{25.00}$, $\text{Al}_{21.82}\text{Ti}_{12.99}\text{Zr}_{1.09}\text{V}_{19.27}\text{Nb}_{14.83}\text{Fe}_{30.00}$, $\text{Al}_{20.26}\text{Ti}_{12.06}\text{Zr}_{1.01}\text{V}_{17.89}\text{Nb}_{13.77}\text{Fe}_{35.00}$, $\text{Al}_{24.94}\text{Ti}_{14.84}\text{Zr}_{1.25}\text{V}_{22.02}\text{Nb}_{16.95}\text{Fe}_{40.00}$, $\text{Al}_{15.59}\text{Ti}_{9.28}\text{Zr}_{0.78}\text{V}_{13.77}\text{Nb}_{10.60}\text{Fe}_{60.00}$. С помощью расчетных методов описан процесс кристаллизации полученных составов от 1600 до 500 °С. При исследовании процесса затвердевания, для всех составов определено, что благоприятным для формирования покрытия хорошего качества является содержание железа в покрытии

порядка 10–25 ат.%, так как при этих концентрациях материал находится в однофазной области.

Ключевые слова: лазерная наплавка, CALPHAD, ThermoCalc, лазерное оплавление поверхности, AlTiZrVNbFe

DOI: 10.31857/S0235010625020067

ВВЕДЕНИЕ

Одной из важнейших научно-технических задач является повышение износостойкости деталей машин и механизмов [1]. Для решения такой задачи были разработаны различные методы, среди которых особо выделяется лазерная обработка материалов [2, 3]. Благодаря высокой плотности мощности волоконных источников лазерного излучения и высокой степени автоматизации, технологии лазерной обработки нашли применение в резке, сварке и наплавке [4], так же, как и гибридные технологии, сочетающие оплавление покрытия полученного газотермическим способом [5].

Лазерное оплавление покрытий — один из процессов лазерной обработки материалов [6]. Высокая скорость оплавления, отсутствие электрических и магнитных полей, присущих дуговым способам воздействия на материал и высокая локальность обеспечивают высокую скорость и гомогенность благодаря конвективным потокам внутри трека наплавки, позволяя уравновесить, усреднить состав и улучшить его характеристики [7].

Изменяя параметры плотности мощности и скорости обработки лазерным излучением возможно управление процессом кристаллизации в зоне оплавления, в том числе и создание условий для высоких скоростей кристаллизации [8], что открывает новые возможности для получения износостойких покрытий за счет выделения новых фаз [9]. При этом, устраняется негативное влияние других фаз, которые выделяются при меньших скоростях обработки, что позволяет спрогнозировать и получить более качественный состав.

Материал конструкций, состоящих из стали 76 (ГОСТ 51045-97) восприимчив к воздействию высоких температур, а также при износе достаточно хрупок. Нанесение покрытия на начальных этапах имеет более высокую эффективность. Для достижения лучших результатов наплавления нами выбрано перспективное покрытие состава $\text{Al}_{31.17}\text{Ti}_{18.53}\text{Zr}_{1.56}\text{V}_{27.53}\text{Nb}_{21.19}$ на основании его более подходящих к применению механических характеристик [10, 11, 12].

Многие элементы железных дорог подвергаются активному износу, в частности острия стрелочных переводов, подвергающиеся усталостному выкрашиванию [13]. В условиях всех видов трения происходит разрушение трущихся поверхностей, т.е. поверхности изнашиваются [14]. Для придания особых свойств поверхности изделий, при сохранении свойств основного материала, применяются разнообразные технологии и методы [5]. В числе таких методов — технологии газотермического напыления, лазерной наплавки, детонационного напыления, дуговой сварки [15–20].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для получения всех результатов были использованы расчетные методики CALPHAD в программном пакете ThermoCalc 2024a (от 20.12.2023), номер версии

программного обеспечения 2024.1.132110-55. Были исследованы составы, представленные в таблице 1.

Данный выбор составов обусловлен определением высокоэнтروпийных сплавов, которые являются сплавами без основного элемента, что подразумевает содержание каждого элемента до 35 ат. % [21]. В связи с этим, в интервале от 0 до 40 ат. %, для более детального рассмотрения, был выбран шаг 5 ат. %, при увеличении концентрации железа от 40 до 60 ат. % был взят шаг 10 ат. %.

Кристаллизация всех описанных составов покрытия AlTiZrVNbFe была математически определена методом Шейла. В ходе моделирования были получены скорости кристаллизации и фазовые составы в температурном интервале 1600–500 °С. Представлены типовые варианты (0 ат. %, 20 ат. % и 50 ат. % Fe), показывающие типичные фазовые переходы и составы на рассматриваемых интервалах (Рис. 1). На рис. 1 (а, в, д) пунктирной линией представлена равновесная скорость охлаждения для составов $Al_{31.17}Ti_{18.55}Zr_{1.56}V_{27.53}Nb_{21.19}Al_{24.94}Ti_{14.84}Zr_{1.25}V_{22.02}Nb_{16.95}Fe_{20.00}$ и $Al_{15.59}Ti_{9.28}Zr_{0.78}V_{13.77}Nb_{10.60}Fe_{50.00}$. На рис. 1 (б, г, е) представлено распределение элементов при 0 ат. %, 20 ат. % и 50 ат. % железа соответственно.

При Fe=0 ат.% на графике скорости системы (рис. 1а) наблюдается 3 участка, разделенных двумя фазовыми переходами. Процесс кристаллизации начинается при T=1571 °С, когда из жидкой фазы начинают выделяться кристаллы ОЦК+В2 фазы, что находится в хорошем согласии с [22, 23]. Структуру фазы В2 можно наблюдать во многих ВЭС, содержащих Al, что в основном обусловлено высокой энтропией и активностью Al (добавление Al может значительно увеличивать энтропию) [24]. Первый фазовый переход (T=1449 °С) соответствует началу выделения из жидкости соединений с гексагональной плотноупакованной решеткой параллельно с ОЦК+В2 фазами. Объемная доля ОЦК+В2 начинает уменьшаться до 0.75, пока при T=1367 °С ГПУ фаза не распадается на интерметаллид TiAl и ОЦК+В2. При температуре 1367 °С начинает образовываться TiAl₃. При окончании кристаллизации структура имеет фазовый состав TiAl₃, TiAl и ОЦК+В2.

Покрытие с составом Al-Ti-Zr-V-Nb, перспективный кандидат суперсплавов следующего поколения [25], обладает высокими механическими характеристиками, но недостаточно высоким сопротивлением к усталостному выкрашиванию, для повышения которого было использовано лазерное оплавление поверхности, способствующее активному перемешиванию. После оплавления несколько снижаются механи-

Таблица 1. Составы покрытия AlTiZrVNbFe в ат. %

| Элемент | Содержание элемента, ат. % | | | | | | | | | | |
|---------|----------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Al | 31.17 | 29.61 | 28.05 | 26.49 | 24.94 | 23.38 | 21.82 | 20.26 | 18.70 | 15.59 | 12.47 |
| Ti | 18.55 | 17.62 | 16.70 | 15.77 | 14.84 | 13.91 | 12.99 | 12.06 | 11.13 | 9.28 | 7.42 |
| Zr | 1.56 | 1.48 | 1.40 | 1.33 | 1.25 | 1.17 | 1.09 | 1.01 | 0.94 | 0.78 | 0.62 |
| V | 27.53 | 26.15 | 24.78 | 23.40 | 22.02 | 20.65 | 19.27 | 17.89 | 16.52 | 13.77 | 11.01 |
| Nb | 21.19 | 20.13 | 19.07 | 18.01 | 16.95 | 15.89 | 14.83 | 13.77 | 12.71 | 10.60 | 8.48 |
| Fe | 0 | 5.00 | 10.00 | 15.00 | 20.00 | 25.00 | 30.00 | 35.00 | 40.00 | 50.00 | 60.00 |

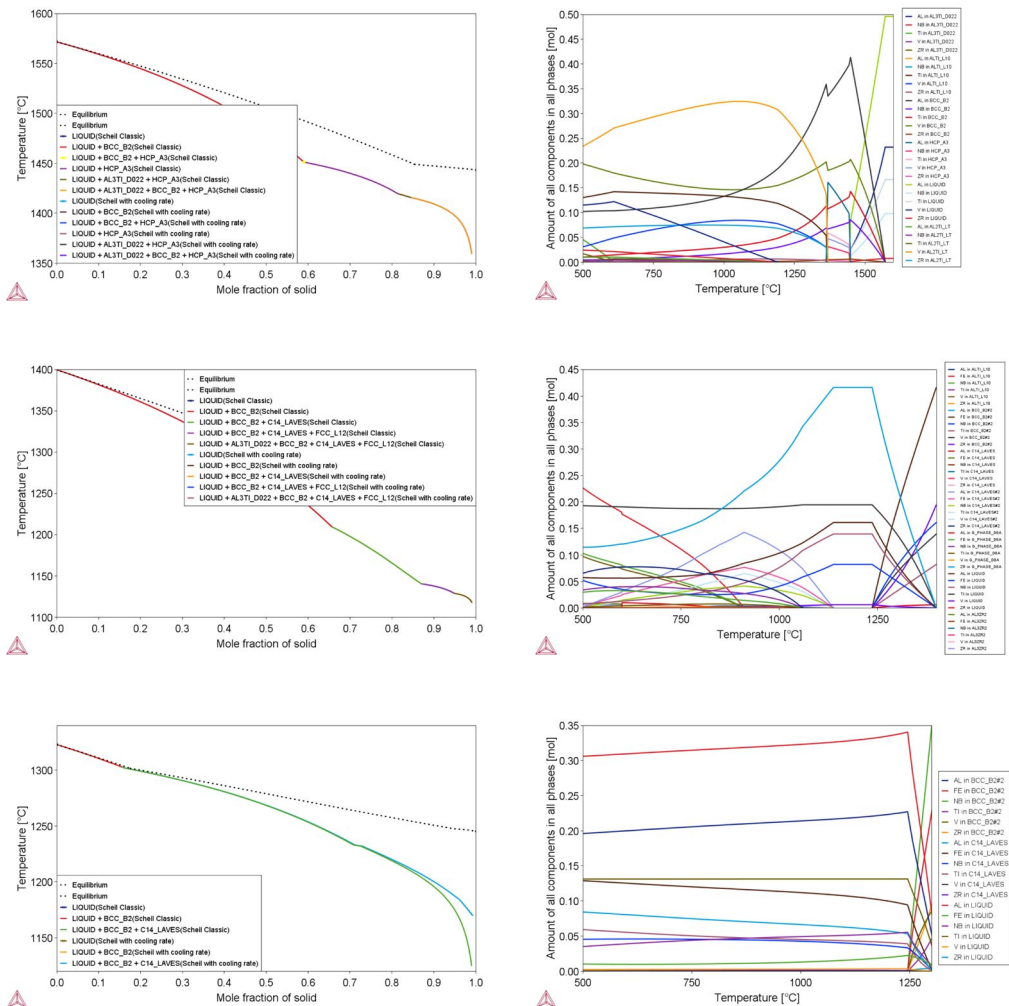


Рис. 1. Скорости кристаллизации и фазовые составы в температурном интервале 1600–500 °С, полученные методом Шейла: *а* – скорость кристаллизации системы $Al_{31.17}Ti_{18.55}Zr_{1.56}V_{27.53}Nb_{21.19}$; *б* – фазы, образующиеся при охлаждении системы $Al_{31.17}Ti_{18.55}Zr_{1.56}V_{27.53}Nb_{21.19}$; *в* – скорость кристаллизации системы $Al_{24.94}Ti_{14.84}Zr_{1.25}V_{22.02}Nb_{16.95}Fe_{20.00}$; *г* – фазы образующиеся при охлаждении системы $Al_{24.94}Ti_{14.84}Zr_{1.25}V_{22.02}Nb_{16.95}Fe_{20.00}$; *д* – скорость кристаллизации системы $Al_{15.59}Ti_{9.28}Zr_{0.78}V_{13.77}Nb_{10.60}Fe_{50.00}$; *е* – фазы образующиеся при охлаждении системы $Al_{15.59}Ti_{9.28}Zr_{0.78}V_{13.77}Nb_{10.60}Fe_{50.00}$.

ческие характеристики, но при этом повышается пластичность и адгезия покрытия к металлу-основе.

На рис. 1 (*в*, *г*) представлены скорость охлаждения и фазовый состав сплава $Al_{24.94}Ti_{14.84}Zr_{1.25}V_{22.02}Nb_{16.95}Fe_{20.00}$. При температуре 1397 °С начинается процесс выделения из жидкости ОЦК+В2 фаз. На температурном интервале от 1237 до 1137 °С существует только структура ОЦК+В2 – гомогенная область. При температуре 1137 °С начинает выделяться фаза Лавеса типа C14–Fe₂Nb, объёмная доля которой посте-

пенно увеличивается до 0.3 при $T=1200$ К. При температуре 1057°C , параллельно с фазой Лавеса, начинает выделяться фаза AlTi , объемная доля которой не превышает 0.1. При содержании Fe в покрытии от 10 до 25 ат. % фазовый состав является оптимальным, так как в покрытии присутствует только одна фаза (отсутствуют интерметаллические соединения и фазы Лавеса).

При увеличении содержания железа до 60 ат. % однофазная область состава $\text{OЦК}+\text{B2}$ уменьшается. На рис. 1 (d, e) представлены скорость охлаждения и фазовый состав сплава $\text{Al}_{15.59}\text{Ti}_{9.28}\text{Zr}_{0.78}\text{V}_{13.77}\text{Nb}_{10.60}\text{Fe}_{50.00}$. На интервале от 1347 до 1320°C из жидкости выделяются только кристаллы $\text{OЦК}+\text{B2}$ фаз. При температуре 1320°C начинает выделяться фаза Лавеса гексагонального типа, объемная доля $\text{OЦК}+\text{B2}$ при начале выделения фазы Лавеса составляет 0.2.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Путем математического моделирования в программном пакете ThermoCalc было исследовано влияние оплавления на свойства покрытия $\text{Al}_{31.17}\text{Ti}_{18.55}\text{Zr}_{1.56}\text{V}_{27.53}\text{Nb}_{21.19}$, нанесенного на сталь высокомарганцовистую (ГОСТ 51045-97).

В системах $\text{Al}_{31.17}\text{Ti}_{18.55}\text{Zr}_{1.56}\text{V}_{27.53}\text{Nb}_{21.19}$, $\text{Al}_{29.61}\text{Ti}_{17.62}\text{Zr}_{1.48}\text{V}_{26.15}\text{Nb}_{20.13}\text{Fe}_{5.00}$, $\text{Al}_{28.05}\text{Ti}_{16.70}\text{Zr}_{1.40}\text{V}_{24.78}\text{Nb}_{19.07}\text{Fe}_{10.00}$, $\text{Al}_{26.49}\text{Ti}_{15.77}\text{Zr}_{1.33}\text{V}_{23.40}\text{Nb}_{18.01}\text{Fe}_{15.00}$, $\text{Al}_{24.94}\text{Ti}_{14.84}\text{Zr}_{1.25}\text{V}_{22.02}\text{Nb}_{16.95}\text{Fe}_{20.00}$, $\text{Al}_{23.38}\text{Ti}_{13.91}\text{Zr}_{1.17}\text{V}_{20.65}\text{Nb}_{15.89}\text{Fe}_{25.00}$, $\text{Al}_{21.82}\text{Ti}_{12.99}\text{Zr}_{1.09}\text{V}_{19.27}\text{Nb}_{14.83}\text{Fe}_{30.00}$, $\text{Al}_{20.26}\text{Ti}_{12.06}\text{Zr}_{1.01}\text{V}_{17.89}\text{Nb}_{13.77}\text{Fe}_{35.00}$, $\text{Al}_{18.70}\text{Ti}_{11.13}\text{Zr}_{0.94}\text{V}_{16.52}\text{Nb}_{12.71}\text{Fe}_{40.00}$, $\text{Al}_{15.59}\text{Ti}_{9.28}\text{Zr}_{0.78}\text{V}_{13.77}\text{Nb}_{10.60}\text{Fe}_{50.00}$, $\text{Al}_{12.47}\text{Ti}_{7.42}\text{Zr}_{0.62}\text{V}_{11.01}\text{Nb}_{8.48}\text{Fe}_{60.00}$ методом Шейла в интервале температур $1600\text{--}500^\circ\text{C}$ исследованы скорости кристаллизации и фазы, образующиеся в процессе охлаждения.

Определено, что оптимальными являются составы с содержанием железа в покрытии от 10 до 25 ат. %, т. к. в данном концентрационном интервале при температуре $1138\text{--}1237^\circ\text{C}$ присутствует только однофазная область.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ranjan R. Protection from corrosion and wear by different weld cladding techniques / Ranjan R., Das A.K // Materials Today: Proceedings. 2022. 57 (4). P. 1687–1693.
2. Олейник К.И., Бахтеев И.С., Русских А.С., Осинкина Т.В., Жилина Е.М. Наплавление многокомпонентных сплавов, содержащих тугоплавкие металлы // Расплавы. 2024. №1. С. 90–100.
3. Jindal, Chamkaur & Sidhu, Buta & Kumar, Pardeep & Sidhu, Hazoor. Performance of hard-faced/heat treated materials under solid particle erosion: A systematic literature review // Materials Today: Proceedings. 2022. 50. №5. 2022. P. 629–639.
4. Григорьянц А.Г., Шиганов И.Н., Мисюров А.И. Теоретические основы лазерной обработки: монография / ред. Григорьянц А.Г. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана. 2022.
5. Девойно О.Г., Туричин Г.А., Кардаполова М.А., Касач Ю.И., Погудо Е.В., Косякова И.М. Триботехнические характеристики композиционных покрытий на никелевой основе, полученных гибридными технологиями // Наука и техника. 2023. 22. №6. 450–459.
6. Devoino O.G., Kardapolova M.A., Kalinichenko A.S., Zharskii V.V., Vasilenko A.G. Technology of Forming Wear-Resistant Coatings on an Iron Base by Laser Treatment Methods (BNTU, Minsk, 2020).

7. Yousub L., Nordin M., Sudarsanam B., Farson D. Influence of Fluid Convection on Weld Pool Formation in Laser Cladding // *Welding journal*. 2014. **93**. P. 292–300.
8. Бахтеев И. С., Олейник К. И., Литвинюк К.С., Фурман Е. Л., Валиев Р. М. Подбор оптимального состава плазменного покрытия системы Ni-B-Si методом CALPHAD воздушных доменных фурм // *Расплавы*. 2025. № 2 (в печати).
9. Yongfei J., Li J., Jiang Y.Q., Jia W.L., Lu, Z.J. Modified criteria for phase prediction in the multi-component laser-clad coatings and investigations into microstructural evolution/wear resistance of FeCrCoNiAlMox laser-clad coatings // *Applied Surface Science*. 2019. **465**. P. 700–714.
10. Zhilina E.M., Russkikh A.S., Krasikov S.A. et al. Synthesis of high-entropy alloy AlTiZrVNb by aluminothermic reaction // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2022. **67**. № 6. P. 888–891.
11. Balakirev V.F., Osinkina T.V., Krasikov S.A. et al. Joint metallothermic reduction of titanium and rare refractory metals of group V // *Russian Journal of Non-Ferrous Metals*. 2021. **62**. № 2. P. 190–196.
12. Карфидов Э. А., Никитина Е. В., Русанов Б. А. Коррозионное поведение высокоэнтروпийного сплава AlNiCoCuZr эквиатомного состава в растворе NaCl. // *Расплавы*. 2024. № 1. С. 82–89.
13. Николаенко А.А., Третьяк П.А., Быстров А.В. Повреждения и отказы рельсов на западно-сибирской железной дороге // *Вестник Сибирского государственного университета путей сообщения*. 2015. № 3. С.13–16.
14. Филиппов М.А., Макаров А.В., Шешуков О.Ю., Шевченко О.И., Метелкин А.А. Износ и износостойкие материалы: учебное пособие для студентов вуза, обучающихся по направлениям подготовки 22.03.01, 22.04.01 – Материаловедение и технология материалов; 22.03.02 – Металлургия / науч. ред. М. А. Гервасьев. Мин-во науки и высш. образования РФ ; ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина», Нижнетагил. технол. ин-т (фил.). — Нижний Тагил: НТИ (филиал) УрФУ. 2019. 372 с.
15. Chen J.H., Chen P.N., Lin C.M., Chang C.M., Chang Y.Y., Wu W. Microstructure and wear properties of multicomponent alloy cladding formed by gas tungsten arc welding (GTAW) // *Surf. Coat. Technol*. 2009. **203** (20–21). P.3231–3234.
16. Sethi A.K. Studies on hard surfacing of structural steel by gas thermal spraying process // *Mater. Today: Proceedings*. 2020. **21**. P.1436–1440.
17. Furman E.L., Usoltsev E.A., Bakhteev I.S., Furman I.E., Shak A.V. Effect of laser heat treatment on structure and wear resistance of cobalt stellite // *J. Phys.: Conf. Ser*. 2019. **1396** (1). P. 12016.
18. Momin A.G., Khatri B.C., Chaudhari M., Shah V.U., Valaki J. Parameters for cladding using plasma transfer arc welding—a critical // *Mater. Today: Proceedings*. 2023. **77**. P. 614–618.
19. Ulianitsky V.Y., Batraev I.S., Rybin D.K., Dudina D.V., Korchagin M.A., Gavrilov A.I., Ukhina A.V., Samodurova M.N., Trofimov E.A. FeCoNiCu alloys obtained by detonation spraying and spark plasma sintering of high-energy ball-milled powders // *Journal of thermal spray technology*. 2022. **31** (4). P.1067–1075.
20. Ulianitsky V.Y., Rybin D.K., Dudina D.V., Ukhina A.V., Bokhonov B.B., Samodurova M.N., Trofimov E.A., Structure and composition of Fe–Co–Ni and Fe–Co–Ni–Cu coatings obtained by detonation spraying of powder mixtures // *Materials Letters*. 2021. **290**. P. 129498.
21. Гельчинский Б.Р., Балякин И.А., Юрьев А.А., Ремпель А.А. Высокоэнтропийные сплавы: исследование свойств и перспективы применения в качестве защитных покрытий // *Успехи химии*. 2022. **91** (6). RCR5023.
22. Junjie G., Yan L., Wei W., Yongxin W., Zheng C. Chemical ordering enhancing mechanical properties of Nb25Ti35V5Zr35Alx refractory high-entropy alloys. // *Journal of Alloys and Compounds*. 2025. **1017**. 178990.

23. Junjie G., Wenji L., Yan L., Shilong L., Yongxin W., Zheng C. A single-phase Nb₂₅Ti₃₅V₅Zr₃₅ refractory high-entropy alloy with excellent strength-ductility synergy // Journal of Alloys and Compounds, 2024. **1006**. 176290.
24. Brodie J., Wang J., Couzinié J. P., Heczko M., Mazánová V., Mills M. J., Ghazisaeidi M. Stability of the B2 phase in refractory high entropy alloys containing aluminum // Acta Materialia. 2024. **1006**. 119745.
25. Hao W., Weiping C., Zhiqiang F., Chenliang C., Zhao T., Zhenfei J., Haiming W. Lightweight Ti-Zr-Nb-Al-V refractory high-entropy alloys with superior strength-ductility synergy and corrosion resistance // International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. 2023. **116**. 106331.

SELECTION OF THE OPTIMAL COMPOSITION OF ALTIZRVNB COATING USING CALPHAD APPROACHES

**M. V. Kiselev¹, A. A. Terekhova^{1,*}, I. S. Bakhteev¹,
K. S. Litvinyuk², K. I. Oleinik^{1,3,**}**

¹*Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin,
Mira str., 32, 620002, Ekaterinburg, Russia*

²*South Ural State University (national research university), 76 Lenin Av., 454080, Chelyabinsk, Russia*

³*Institute of Metallurgy, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,
Amundsen str., 101, 620016, Ekaterinburg, Russia*

**E-mail: terekhovaalisia@yandex.ru*

***E-mail: 1007o1007@gmail.com*

With the development of scientific and technological progress, the requirements for reliability (increased service life) of components and structural parts have changed. Machine components made from high-carbon manganese steel are subject to wear, which can lead to increased costs. It is widely known that structures consisting of steel 76, GOST 51045-97 are significantly wearing out. By modifying the surface layer using laser surfacing and subsequent melting, it becomes possible, through active mixing and rapid solidification that occurs during melting, not only to homogenize the structure, but also to implement hardening processes of the near-surface layers of the most loaded (vulnerable) zones. Using the CALPHAD methods in the ThermoCalc software package (software version number 2024.1.132110-55), the effect of the applied protective coating (AlTiZrVNb) with subsequent melting on the change in the phase composition and distribution of elements on the outer crystalline layer of the substrate was simulated. An alloy of the composition Al_{29.61}Ti_{17.62}Zr_{1.48}V_{26.15}Nb_{20.13}Fe_{5.00} was selected for the calculations. When laser radiation is applied to the deposited coating, active interaction of the coating components with the base metal (iron) is observed, resulting in the formation of a modified top layer containing new phases with iron in the composition. In this regard, using mathematical modeling, the Scheil method determined the crystallization rates and phases formed upon cooling in alloys located in the upper structure of the path after the reflow process: Al_{29.61}Ti_{17.62}Zr_{1.48}V_{26.15}Nb_{20.13}Fe_{5.00}, Al_{28.05}Ti_{16.70}Zr_{1.40}V_{24.78}Nb_{19.07}Fe_{10.00}, Al_{26.49}Ti_{15.77}Zr_{1.33}V_{23.40}Nb_{18.01}Fe_{15.00}, Al_{24.94}Ti_{14.84}Zr_{1.25}V_{22.02}Nb_{16.95}Fe_{20.00}, Al_{23.38}Ti_{13.91}Zr_{1.17}V_{20.65}Nb_{15.89}Fe_{25.00}, Al_{21.82}Ti_{12.99}Zr_{1.09}V_{19.27}Nb_{14.83}Fe_{30.00}, Al_{20.26}Ti_{12.06}Zr_{1.01}V_{17.89}Nb_{13.77}Fe_{35.00}, Al_{18.70}Ti_{11.13}Zr_{0.94}V_{16.52}Nb_{12.71}Fe_{40.00}, Al_{15.59}Ti_{9.28}Zr_{0.78}V_{13.77}Nb_{10.60}Fe_{50.00}, Al_{12.47}Ti_{7.42}Zr_{0.62}V_{11.01}Nb_{8.48}Fe_{60.00}. The crystallization process from 1600 to 500 °C of the obtained compositions is described using computational methods. When studying the solidification process, it was determined for all compositions that the iron content in the

coating is about 10–25 at.% favorable for the formation of a good-quality coating, since at these concentrations the material is in a single-phase region.

Keywords: laser cladding, CALPHAD, TermoCalc, laser surface melting, AlTiZrVNbFe

REFERENCES

1. Ranjan R. Protection from corrosion and wear by different weld cladding techniques / Ranjan R., Das A. K // *Materials Today: Proceedings*. 2022. **57** (4). P. 1687–1693.
2. Oleynik K.I., Bakhteev I.S., Russkikh A.S., Osinkina T.V., Zhilina E.M. Naplavlennye mnogokomponentnykh splavov, soderzhashchikh tugoplavkie metally [Surfacing of multicomponent alloys containing refractory metals] // *Rasplavy (Melts)*. 2024. №1. P. 90–100. [In Russian]
3. Jindal, Chamkaur & Sidhu, Buta & Kumar, Pardeep & Sidhu, Hazoor. Performance of hard-faced/heat treated materials under solid particle erosion: A systematic literature review // *Materials Today: Proceedings*. 2022. **50**. №5. 2022. P. 629–639.
4. Grigoryants A.G., Shiganov I.N., Misyurov A.I. Teoreticheskie osnovy lazernoy obrabotki: monografiya [Theoretical foundations of laser processing: monograph] / red. Grigor'yanc A.G. M.: Izd-vo MGTU im. N. E. Bauman [edited by Grigoryants A. G. Moscow: Publishing house of Bauman Moscow State Technical University]. 2022. [In Russian]
5. Devoino O.G., Turichin G.A., Kardapolova M.A., Kasach Yu.I., Pogudo E.V., Kosyakova I.M. Tribotekhnicheskie karakteristiki kompozitsionnykh pokrytij na nikel'noy osnove, poluchennykh gibridnymi tekhnologiyami [Tribological characteristics of nickel-based composite coatings obtained by hybrid technologies] // *Nauka i tekhnika [Science and Technology]*. 2023. **22**. №6. 450–459. [In Russian]
6. Devoino O.G., Kardapolova M.A., Kalinichenko A.S., Zharskii V.V., Vasilenko A.G. Technology of Forming Wear-Resistant Coatings on an Iron Base by Laser Treatment Methods (BNTU, Minsk, 2020).
7. Yousub L., Nordin M., Sudarsanam B., Farson D. Influence of Fluid Convection on Weld Pool Formation in Laser Cladding // *Welding journal*. 2014. **93**. P. 292–300.
8. Bakhteyev I.S., Oleinik K.I., Litvinyuk K.S., Furman E.L., Valiev R.M. Podbor optimal'nogo sostava plazmennogo pokrytiya sistemy Ni-B-Si metodom CALPHAD vozdushnykh domennykh furn [Selection of the power of plasma coating of Ni-B-Si by the CALPHAD method of air blast bellows] // *Rasplavy (Melts)*. 2025. № 2 (in press). [In Russian]
9. Yongfei J., Li J., Jiang Y.Q., Jia W.L., Lu, Z.J. Modified criteria for phase prediction in the multi-component laser-clad coatings and investigations into microstructural evolution/wear resistance of FeCrCoNiAlMox laser-clad coatings // *Applied Surface Science*. 2019. **465**. P. 700–714.
10. Zhilina E.M., Russkikh A.S., Krasikov S.A. et al. Synthesis of high-entropy alloy AlTiZrVNb by aluminothermic reaction // *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2022. **67**. № 6. P. 888–891.
11. Balakirev V.F., Osinkina T.V., Krasikov S.A. et al. Joint metallurgical reduction of titanium and rare refractory metals of group V // *Russian Journal of Non-Ferrous Metals*. 2021. **62**. № 2. P. 190–196.
12. Karfidov E.A., Nikitina E.V., Rusanov B.A. Korrozionnoe povedenie vysokoentropijnogo splava AlNiCoCuZr ekvatomnogo sostava v rastvore NaCl [Corrosion behavior of high-entropy AlNiCoCuZr alloy of equiatomic composition in NaCl solution] // *Rasplavy (Melts)*. 2024. №1. P. 82–89. [In Russian]
13. Nikolaenko A.A., Tretyak P.A., Bystrov A.V. Povrezhdeniya i otkazy rel'sov na zapadno-sibirskoy zheleznoj doroge // *Vestnik Sibirskogo gosudarstvennogo universiteta putej soobshcheniya [Damage and failures of rails on the West Siberian railway]* // *Bulletin of the Siberian State Transport University*. 2015. №3. P. 13–16. [In Russian]

14. Filippov M.A., Makarov A.V., Sheshukov O.Yu., Shevchenko O.I., Metelkin A.A. Iznos i iznosostojkie materialy : uchebnoe posobie dlya studentov vuza, obuchayushchihhsya po napravleniyam podgotovki 22.03.01, 22.04.01 – Materialovedenie i tekhnologiya materialov; 22.03.02 – Metallurgiya [Wear and wear-resistant materials: a textbook for university students studying in the areas of training 22.03.01, 22.04.01 – Materials Science and Technology of Materials; 22.03.02 – Metallurgy] / scientific editor M. A. Gervasyev. Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation; Ural Federal University named after the first President of Russia B. N. Yeltsin”, Nizhny Tagil. Technological Institute (branch). – Nizhny Tagil: NTI (branch) of UrFU. 2019. [In Russian]
15. Chen J.H., Chen P.N., Lin C.M., Chang C.M., Chang Y.Y., Wu W. Microstructure and wear properties of multicomponent alloy cladding formed by gas tungsten arc welding (GTAW) // Surf. Coat. Technol. 2009. **203** (20–21). P.3231–3234.
16. Sethi A.K. Studies on hard surfacing of structural steel by gas thermal spraying process // Mater. Today: Proceedings. 2020. **21**. P.1436–1440.
17. Furman E.L., Usoltsev E.A., Bakhteev I.S., Furman I.E., Shak A.V. Effect of laser heat treatment on structure and wear resistance of cobalt stellite // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. **1396** (1). P. 12016.
18. Momin A.G., Khatri B.C., Chaudhari M., Shah V.U., Valaki J. Parameters for cladding using plasma transfer arc welding—a critical // Mater. Today: Proceedings. 2023. **77**. P. 614–618.
19. Ulianitsky V.Y., Batraev I.S., Rybin D.K., Dudina D.V., Korchagin M.A., Gavrilov A.I., Ukhina A.V., Samodurova M.N., Trofimov E.A. FeCoNiCu alloys obtained by detonation spraying and spark plasma sintering of high-energy ball-milled powders // Journal of thermal spray technology. 2022. **31** (4). P.1067–1075.
20. Ulianitsky V.Y., Rybin D.K., Dudina D.V., Ukhina A.V., Bokhonov B.B., Samodurova M.N., Trofimov E.A., Structure and composition of Fe–Co–Ni and Fe–Co–Ni–Cu coatings obtained by detonation spraying of powder mixtures // Materials Letters. 2021. 290. P. 129498.
21. Gelchinsky B.R., Balyakin I.A., Yuryev A.A., Rempel A.A. Vysokoentropijnye splavy: issledovanie svoystv i perspektivy primeneniya v kachestve zashchitnykh pokrytij [High-entropy alloys: research and prospects for application as protective coatings] // Chemical Research. 2022. **91** (6). RKR5023 [In Russian]
22. Junjie G., Yan L., Wei W., Yongxin W., Zheng C. Chemical ordering enhancing mechanical properties of Nb25Ti35V5Zr35Alx refractory high-entropy alloys. // Journal of Alloys and Compounds. 2025. **1017**. 178990.
23. Junjie G., Wenji L., Yan L., Shilong L., Yongxin W., Zheng C. A single-phase Nb25Ti35V5Zr35 refractory high-entropy alloy with excellent strength-ductility synergy // Journal of Alloys and Compounds, 2024. **1006**. 176290.
24. Brodie J., Wang J., Couzinié J. P., Heczko M., Mazánová V., Mills M. J., Ghazisaeidi M. Stability of the B2 phase in refractory high entropy alloys containing aluminum // Acta Materialia. 2024. **1006**. 119745.
25. Hao W., Weiping C., Zhiqiang F., Chenliang C., Zhao T., Zhenfei J., Haiming W. Lightweight Ti-Zr-Nb-Al-V refractory high-entropy alloys with superior strength-ductility synergy and corrosion resistance // International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. 2023. **116**. 106331.