

Dr. Luis Alberto Cáceres Díaz, Investigador Cátedra-CONACyT comisionado al CIATEQ A.C. Centro de Tecnología Avanzada unidad San Luis Potosí, México. *e-mail*: [luis.caceres@ciateq.mx](mailto:luis.caceres@ciateq.mx)

## THE ROLE OF TERNARY ADDITIONS ON PHASE TRANSFORMATIONS IN NICKEL-BASED ALLOYS APPLIED TO GAS TURBINE JET ENGINES

B2-(Ni,Pt)Al intermetallic alloy is a very well-known material for turbine blade applications due to its excellent properties at high temperatures, such as corrosion and oxidation resistance and thermodynamic stability in a wide range of composition. In Thermal Barrier Coating systems (TBC), The B2-(Ni,Pt)Al alloy works as a bond coat (BC) between a ceramic top coat (TC) and a Nickel-Based superalloy (SA) because provides Al for the formation of a protective and adherent alumina scale. Under operating conditions, interdiffusion phenomena promote the migration of ternary elements from the SA up to the bond coat generating disordering, lattice instabilities and phase transformations, which involve volumetric changes that promote high stress-strain fields and finally detonates in the failure of the TBC system. This behavior represents a critical shortcoming for turbine blade applications, due to the permanent thermal and mechanical stress fields to which they are exposed. In this work, we combine isothermal oxidation experiments and first-principles calculations to study the effect of thermal exposure on the lattice stability and the role of Cr, Co, and Pt on the martensitic transformation of B2-NiAl phase. Theoretical results correlate very well to phase transformation experiments of commercial B2-(Ni,Pt)Al bond coatings under isothermal oxidation at 1100 °C and  $p_{O_2}$ : 0.2 atm. It is observed that the cubic structure destabilizes and transforms to martensite at 36 % at. of Al content. Additions of Cr stabilizes the B2 phase and retard the transformation while additions of Co and Pt favor the martensitic transformation. These results are discussed in terms of the benefit of the ternary alloy additions to the BC and their effects on the  $M_s$ ,  $M_f$ ,  $A_s$  and  $A_f$  transformation temperatures.

**Keywords:** NiAl, Bond Coat, martensitic transformation, first principle calculations

**Reseña bibliográfica:**

El Dr. Luis Alberto Cáceres Díaz es ingeniero Físico de la Universidad Tecnológica de Pereira promoción 2009, maestro y doctor en Ciencias con especialidad en Materiales del Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN CINVESTAV unidad Querétaro, México. En el 2016 realizó un posdoctorado en el Centro de Ingeniería y Desarrollo Industrial CIDESI y actualmente es investigador CONACyT del CIATEQ A.C. Centro de Tecnología Avanzada unidad San Luis Potosí ([www.ciateq.mx](http://www.ciateq.mx)). Sus principales áreas de interés en investigación son mecánica cuántica, termodinámica y cinética computacional de materiales metálicos, manufactura aditiva, procesos metalúrgicos avanzados para síntesis, caracterización y procesamiento de metales, cerámicos y CERMETS. El objetivo de la plática es presentar a los estudiantes una perspectiva sobre la investigación en materiales metálicos orientada a atender distintas problemáticas de la industria de Moldes, Troqueles y Herramentales, aeronáutica, automotriz y generación de energía. Se estudia el caso particular de transformaciones de fase de aleaciones base níquel que suponen mecanismos de falla intrínsecos en sistemas de recubrimientos barreras térmicas para álabes de la sección de alta presión en turbinas aeronáuticas. Así mismo, se pretende mostrar a los estudiantes los campos de aplicación real de las herramientas académicas que aprenden durante su formación en ingeniería.

**Información de contacto:** Dr. Luis Alberto Cáceres Díaz, Investigador Cátedra-CONACyT  
CIATEQ A.C. Centro de Tecnología Avanzada, [www.ciateq.mx](http://www.ciateq.mx) e-mail: [luis.caceres@ciateq.mx](mailto:luis.caceres@ciateq.mx)