Cod. 8853 | Tecnología metalúrgica | 3315.07 Productos metalúrgicos

Vidrios metálicos y high entropy alloys... ¿es el desorden la clave de los materiales del futuro?

Metallic glasses and high entropy alloys.... is disorder the key to future materials?

Jon-Mikel Sánchez, Iban Vicario y Antton Meléndez
TECNALIA Research & Innovation (España)

DOI: http://dx.doi.org/10.6036/8853

Las aleaciones metálicas tradicionales han consistido en la mezcla de un elemento mayoritario con otros elementos en menores proporciones, que actúan de solutos en la estructura cristalina del elemento principal mejorando las propiedades del metal base. En el acero, los átomos de carbono de un tamaño mucho menor se encuentran insertados en los huecos intersticiales de la microestructura del hierro. A pesar de que se mejoran las propiedades de los elementos puros, las aleaciones siguen manteniendo unas determinadas propiedades derivadas del elemento mayoritario. Los estudios de nuevas aleaciones se han basado históricamente en el empleo de diagramas de fase bien conocidos a los que se iban añadiendo elementos secundarios en menores cantidades, ya que si se sobrepasaran los límites de solubilidad en la microestructura del soluto podría acarrear la precipitación de compuestos indeseados que, en general, fragilizarían la aleación final.

Dos descubrimientos revolucionarios cambiaron por completo la concepción de la metalurgia física de las aleaciones metálicas. Primero, en 1960 se descubrió el primer vidrio metálico o **metal amorfo** [1]. Este nuevo material, en contraposición a las aleaciones tradicionales no disponía de estructura cristalina, sino que los átomos estaban distribuidos de una manera completamente desordenada en la microestructura de la aleación. Debido al abanico de nuevas propiedades que ofrecían los vidrios metálicos, treinta años después se desarrolló el primer **vidrio metálico** comercial para su uso en la industria aeroespacial. Aun así, las altas velocidades de enfriamiento requeridas para la consecución de microestructuras amorfas lastra mucho la aplicación de este tipo de aleaciones en ciertos sectores. El segundo hito que cambió la metalurgia física para siempre se dio en el año 2004, cuando aparece la primera publicación sobre **Aleaciones de Alta Entropía**, en inglés *High Entropy Alloys* [2] (HEAs). Los materiales descritos en estas publicaciones revolucionaron el campo de la metalurgia física, ya que, en contra de todo pronóstico, al alear cinco o más elementos metálicos en cantidades equimolares se estabilizaron soluciones sólidas desordenadas derivadas de estructuras simples (body centered cubic BCC y face centered cubic FCC), en vez de compuestos intermetálicos complejos. Esto abrió un nuevo campo en la ingeniería de materiales, ya que el número de Aleaciones de Alta Entropía por investigar puede decirse que es casi infinito, pues se han estimado alrededor de 10^{78} posibles aleaciones. Teniendo en cuenta este amplio abanico de opciones, no es de extrañar que las HEAs hayan sido denominadas como el "*Renacimiento de la Metalurgia Física*", potenciales candidatas a constituir los nuevos materiales de nuestros futuros aviones, automóviles, estructuras...

Las especiales propiedades de las HEAs se atribuyen principalmente a cuatro efectos relacionados con la alta proporción en la que están presentes los diferentes constituyentes de la aleación:

1. **Alta entropía de mezcla:** Es el efecto más importante y el que les da el nombre de Aleaciones de Alta Entropía. En contra de lo que se podía esperar, alear una mayor cantidad de componentes provoca un aumento del desorden atómico de la estructura cuando se encuentran cerca del punto de fusión y en consecuencia, menos fases de las esperadas debido al aumento de la solubilidad de los componentes y a la disminución de la formación de compuestos intermetálicos, que son estructuras generalmente frágiles.

2. **Difusión lenta:** En una red cristalina integrada por varios elementos diferentes, los átomos encontrarán una energía potencial muy diferente al difundirse. Podría muy bien darse entonces el caso en el que la energía potencial en esa nueva posición sea mucho más alta y que el átomo volviera a su lugar original. Esta difusión lenta justifica que muchas HEAs tengan excelentes propiedades a alta temperatura.

3. **Distorsión de la red cristalina**: La amplia distorsión de la red cristalina proviene de los distintos tamaños del radio atómico de los componentes. Debido a la composición, en las HEAs este fenómeno es mucho más acusado que en otro tipo de aleaciones. Dentro de las propiedades que se obtienen de una estructura con una amplia distorsión de red cabe mencionar el aumento de la dureza, la reducción de las conductividades térmicas y eléctricas y una menor dependencia de estos parámetros de la temperatura.

4. **Efecto cóctel:** Este efecto cóctel genera muchas posibilidades de materiales con propiedades diferentes. Fue descrito por primera vez como "*una mezcla sinérgica donde el resultado final es impredecible y los resultados obtenidos son mejores que los resultados obtenidos por separado*".

Estos efectos son los que provocan que en las Aleaciones de Alta Entropía exista un "*cierto desorden dentro de un orden*". Las microestructuras de las HEAs se sitúan entre las estructuras cristalinas de las aleaciones tradicionales y los vidrios metálicos, ya que constan de red cristalina, pero los elementos se distribuyen aleatoriamente en ella. De forma esquemática se puede entender mejor observando la figura a continuación.

En la Fig. 1 (A) se muestra una estructura cristalina de una aleación de dos componentes, donde el elemento de menor tamaño ocupa los huecos intersticiales en la red cristalina del elemento principal. En la Fig.1 (B), se observa la disposición atómica de una aleación de alta entropía de cinco elementos. Esta microestructura consta de una red cristalina simple, en la que los átomos se distribuyen aleatoriamente. La diferencia de radio atómico provoca que

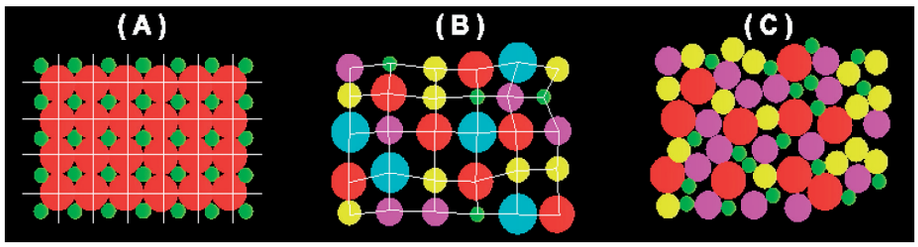

Figura 1. Representación conceptual de microestructura de: (A) solución sólida intersticial, (B) solución solida desordenada de 5 elementos y (C) estructura amorfa de 4 elementos metálicos

exista una distorsión de red, como se puede apreciar en la imagen. En la Fig. 1 (C), que corresponde a un vidrio metálico de cuatro elementos, no se observa ninguna estructura cristalina, ya que los elementos están situados de manera completamente aleatoria.

A pesar de que las HEAs hayan sido descubiertas hace 14 años, el impacto que han tenido en el mundo académico es considerable, como lo atestigua el incremento exponencial de las investigaciones sobre estos materiales. En lo que a su aplicación industrial se refiere, las HEAs destacan ante todo por la capacidad de ofrecer unas excelentes propiedades mecánicas con una densidad inferior a las aleaciones comerciales [3]. De esta manera, las HEAs pueden tener un gran impacto en sectores donde el aligeramiento de las estructuras sea clave, p.e. para el ahorro de combustible.

Por otro lado, se espera de las Aleaciones de Alta Entropía buenos resultados de comportamiento en condiciones de trabajo a alta temperatura, ya que son capaces de competir con aleaciones comerciales de base níquel o, incluso, con cerámicas técnicas. No se puede olvidar tampoco que han sido reportadas hasta la fecha excelentes propiedades tribológicas, frente a la corrosión, magnéticas...

Siguiendo esta línea de trabajo, el Departamento de Fundición y Siderurgia de TECNALIA trabaja en el diseño, estudio de la microestructura y la fabricación de nuevos Vidrios Metálicos y Aleaciones de Alta Entropía [4] con potencial aplicación industrial. Asimismo, en el área de Fundición se está desarrollando una Tesis Doctoral sobre aplicaciones de las HEAs de baja densidad en el ámbito de las piezas moldeadas.

Por tanto, teniendo en cuenta la previsible gran cantidad de nuevas HEAs por desarrollar y las excelentes propiedades mecánicas y físicas demostradas durante su corta existencia ¿será la entropía la clave para desarrollar los nuevos materiales del futuro?.

REFERENCIAS

[1] Klement JW, Willens RH, Duwez P. Non-crystalline structure in solidified Gold-Silicon alloys. Nature.
[2] Yeh JW, Chen SK, Lin SJ. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes. Adv. Eng. Mater.
[3] Gao MC, Liaw PK, Yeh JW, Zhang Y. High-entropy alloys: Fundamentals and applications. Springer.
[4] Sanchez JM, Vicario I, Albizuri J, Guraya T, Koval N. Compound Formation and Microstructure of As-Cast High Entropy Aluminums. Metals.

DYNA
Ingeniería e Industria

Suscríbete a Revista Dyna

Revista técnico científica de ingeniería multidisciplinar desde 1926

Los mejores artículos en español para investigadores y profesionales de la ingeniería.
Mantente actualizado y conoce el estado del arte en ingeniería.

PROMOCIÓN PARA ESTUDIANTES:

La suscripción a DYNA impresa incluye la suscripción digital a DYNA y a otras 3 revistas especializadas:

- DYNA Energía y Sostenibilidad (DYNAES)
- DYNA Management (DYNAMN)
- DYNA Nuevas Tecnologías (DYNANT)

Suscripción Impresa + 4 revistas digitales ..... 39,00 €/año

Para acogerse a esta promoción escribanos a dyna@revistadyna.com

http://www.revistadyna.com/suscripcion-estudiante-espana-impresa