



ACADEMIA DE LAS CIENCIAS
Y LAS ARTES MILITARES

Comunicaciones académicas

De la necesidad virtud: la nueva manera de diseñar aleaciones

José Manuel Torralba Castelló

Academia de las Ciencias y las Artes Militares
Sección de Prospectiva de la Tecnología Militar

26 de mayo de 2025

Los elementos prohibidos

Desde hace años, la Unión Europea (UE) establece una lista de Materias Primas Críticas (MRC), que es una relación de materias primas, en su mayoría minerales, que se consideran estratégicas para la economía de la UE y que presentan un alto riesgo de suministro. Recientemente se ha establecido un reglamento (del Parlamento Europeo y del Consejo) por el que se establece un marco para garantizar un suministro seguro y sostenible de materias primas fundamentales. Ya no se habla de materias primas críticas (concepto vinculado a la escasez, reservas o precio, aunque todo está relacionado) o estratégicas (aquellas que, siendo fundamentales para la industria o la defensa nacional, no existen en el país, y aun disponiendo de estos, no es posible extraerlos de modo rentable, o su producción no satisface la demanda interna, debiéndose obtener del exterior), sino de materias primas fundamentales, aunando ambos conceptos en uno.

Según el reglamento,

Existe un conjunto de materias primas no agrícolas ni energéticas que se consideran fundamentales debido a su gran importancia económica y a su elevado riesgo para el suministro, a menudo por tener su origen en un reducido número de terceros países. La demanda de muchas de estas materias primas fundamentales es susceptible de aumentar exponencialmente en las próximas décadas, dado su papel clave en la realización de las transiciones ecológica y digital, y en vista de su uso para aplicaciones en los ámbitos de la defensa y aeroespacial. Al mismo tiempo, el riesgo de alteraciones en el suministro está aumentando en un contexto en el que crecen las tensiones geopolíticas y de competencia por los recursos. Además, si no se gestiona adecuadamente, el aumento de la demanda de materias primas fundamentales podría tener efectos medioambientales y sociales negativos.

Esta frase, escrita el 11 de abril de 2024, por desgracia cobra hoy especial relevancia a la vista de las sacudidas en política internacional a las que estamos empezando a acostumbrarnos. La realidad es que Europa cada día está en una posición más delicada para sostener nuestro futuro de bienestar. Nos hemos embarcado en numerosos propósitos para salvar al planeta, pero sin darnos cuenta de que no tenemos ya el liderazgo empresarial, de innovación, de I+D que nos permita competir, y lo que es peor, no tenemos las materias primas con las que poder hacer los cambios.

En la última lista de minerales/metales fundamentales de la UE (2024) se incluyen, entre otros: bauxita/alúmina/aluminio, bismuto, boro, cobalto, cobre, galio, germanio, litio, magnesio, manganeso, grafito, níquel, metales del grupo del platino, tierras raras para imanes permanentes (Nd, Pr, Tb, Dy, Gd, Sm y Ce), silicio metálico, titanio y wolframio. No voy a entrar en detalles de dónde se encuentran concentradas las mayores reservas de la mayoría de estos materiales (China, Rusia, África –con una minería controlada por China–, y en algunos casos EE. UU. o Sudamérica). En Europa tenemos alguna reserva interesante de metales como el Li, por ejemplo, pero también tenemos una sociedad eco-intransigente que se opone a cualquier tipo de minería que permita explotar esas reservas. En Europa tenemos un gran problema con este tema.

Todas las tecnologías asociadas con energía producida por alternativas a la energía fósil (geotérmica, hidrotermal, nuclear, bioenergía, energías basadas en el hidrógeno, solar, eólica, baterías,) consumen ingentes cantidades de metales. Especialmente acero, cobre, aluminio y níquel. Las baterías para vehículos eléctricos, además, consumen silicio, cobalto, grafito, manganeso y tierras raras, también en grandes cantidades. La mayoría materiales fundamentales. Las necesidades de grafito que necesitamos para los coches eléctricos que debemos fabricar para el año 2030, son de 610 millones de toneladas. Y las reservas mundiales son de 300 millones. Y el grafito está en la parte más alta de la lista de

materiales fundamentales. Necesitaremos 420 millones de toneladas de níquel, y tenemos 90. También necesitaremos 90 y 75 millones de toneladas de cobalto y litio, y tenemos 10 y 20, respectivamente. Es decir, a día de hoy, independientemente de su origen, no tenemos metales suficientes para las baterías que hay que fabricar en los próximos años para la electrificación del parque de vehículos. De cobre, otro de los protagonistas de este drama, necesitamos 480 millones, y tenemos 830, pero al ritmo de consumo que tenemos (se espera consumir 700 millones de toneladas en los próximos veinte años, igual que en toda la historia de la humanidad), pronto también tendremos un gran problema.

La cocina de aprovechamiento

Y aquí es cuando entra en juego la «cocina de aprovechamiento». Para fabricar prácticamente todas las aleaciones llamadas de altas prestaciones (aceros de muy alta resistencia, superaleaciones, aleaciones biomédicas, superligeras o con memoria de forma...) necesitamos de todos estos elementos críticos, y resulta que no los tenemos o nos cuesta mucho tenerlos. Pues hay que pensar con la mentalidad de la cocina de aprovechamiento. Si no tenemos buenos ingredientes para hacer nuestra receta, busquémoslos en los restos de otras recetas. Es lo que se hace siempre que hay escasez, y ahora vivimos tiempos de escasez. Y tenemos ingentes cantidades de «restos» disponibles en la chatarra y la basura electrónica. Hay muchos de estos metales críticos que no se reciclan suficientemente desde la chatarra (menos de un 50%), y este problema es más exagerado en la basura electrónica, que no se recicla más allá de un 17%. Y la causa es que la manera que tenemos hasta ahora de diseñar y fabricar aleaciones, es la misma que la del chef de alta cocina preparando una receta: se seleccionan los ingredientes necesarios y se combinan de una manera secuencial y precisa. Y en esa receta, todo lo que se salga de la lista, no sirve, porque nos da mal sabor según el criterio del fino paladar del chef. Lo mismo ocurre si queremos fabricar un perfume a partir de la mezcla de tres o cuatro aromas distintos. Siempre, para fabricar ese perfume, se habrían tenido en cuenta la influencia que sobre la fragancia habrían tenido algunas materias primas, que son las que dan carácter al perfume (por ejemplo, la flor del almendro o la cascara de una naranja); y siempre la base de un buen perfume es una o dos de esas fragancias, con pequeños aditivos de alguna otras. Y desde luego, en esa mezcla está totalmente prohibido añadir algunas sustancias que puedan malograr el perfecto olor final.

Si el chef quisiera utilizar restos de comida o el perfumista restos de otros perfumes, utilizando criterios ortodoxos para desarrollar una receta, le costaría mucho extraer de esos restos los ingredientes que necesita. Pero, ¿y si le diéramos al chef o al maestro perfumista herramientas para mezclar restos de diversas recetas para que, combinados apropiadamente, el resultado tuviera un sabor riquísimo o un olor

embriagador? Pues eso es lo que podemos hacer para el diseño de aleaciones utilizando el concepto de la alta entropía. Podemos mezclar convenientemente chatarras o aleaciones que provienen de diversos tipos de residuos para conseguir las mejores propiedades.

El concepto de alta entropía

Cuando aparecen las aleaciones de alta entropía en el siglo XXI, se demuestra que mezclando «muchos elementos», casi de cualquier manera (en absoluto siguiendo los cánones de la metalurgia, donde hay que evitar algunos elementos que pueden perjudicar el resultado final), y gracias a la alta entropía de la mezcla, se consiguen microestructuras apropiadas para garantizar propiedades excepcionales.

Con este nuevo enfoque cambia el paradigma clásico al utilizar muchos elementos aleantes para lograr una alta entropía configuracional. Se elimina el concepto de «elementos previamente restringidos» y minimizamos el empleo directo de elementos críticos, que históricamente se utilizaban para lograr propiedades específicas. Este nuevo concepto abre muchas posibilidades para el reciclaje y la reutilización de desechos en la producción de materiales avanzados. Aprovechando la alta entropía, es posible crear mezclas a partir de chatarras o concentrados de metales de la basura electrónica que cumplan con los criterios necesarios para desarrollar microestructuras viables para un alto rendimiento. Las ventajas de este enfoque incluyen:

- 1) La ausencia de elementos prohibidos (como el cobre en la mayoría de los aceros), ya que todos los elementos pueden contribuir al aumento de la entropía configuracional;
- 2) la capacidad de evitar metales críticos como materias primas directas, aprovechando chatarra de aleaciones comerciales;
- 3) el potencial para utilizar directamente aleaciones multicomponentes de residuos mineros y chatarra electrónica.

Pero, ¿cómo vamos a poder conseguir el plato de alta cocina perfecto a partir de restos de comida (que van cambiando) o el perfume perfecto a partir de retales que podemos combinar de infinitas maneras (con infinitas combinaciones de porcentajes de mezcla)? Si tengo cinco familias de chatarras o cinco combinaciones de aleaciones que provienen del reciclado de la basura electrónica, las posibilidades de mezcla son infinitas. Pero, afortunadamente, hoy tenemos el robot de cocina perfecto, que te analiza los restos y te calcula en qué proporción los tienes que mezclar: la inteligencia artificial. Hoy sabemos cómo hacer para que una plataforma digital, a partir de datos de diversas fuentes, se entrene para decidir

cuál es la combinación ideal de chatarras para que el material resultante pueda competir con la mejor aleación de altas prestaciones. Hoy podemos cocinar ese plato perfecto de cocina de recuperación o fabricar ese perfume de ensueño a partir de mezclas imposibles.

Podemos disminuir nuestra dependencia de los metales fundamentales explotando al máximo las posibilidades de reciclar y también las posibilidades de recuperarlos de todo tipo de residuos, como la basura electrónica, a través de la llamada minería urbana. Pero tanto en la chatarra como en la llamada minería urbana se arrastran elementos químicos no deseados en las composiciones de aleaciones comerciales, y hacerlos desaparecer de la ecuación implica consumos energéticos elevados que imposibilitan o limitan el reciclado o la explotación de esa basura. Para aprovechar todos los elementos a la vez y minimizar las pérdidas de estos recursos, debemos recurrir a maneras de diseñar los metales totalmente alternativas, basándonos en dos principios clave:

- 1) Diseñar por microestructura en lugar de por composición.
- 2) Utilizar conceptos alternativos (en lugar de los tradicionales directamente vinculados a los efectos previstos de elementos específicos) como elementos dinámicos en la microestructura deseada.

Estos conceptos pueden incluir la entropía configuracional de mezcla entre otros muchos. El objetivo es minimizar la dependencia de materias primas específicas, haciendo más sostenible el desarrollo de aleaciones. Aplicando estos criterios como parámetros de diseño, se puede validar, además, la inclusión de cualquier elemento en la formulación final de la aleación, evitando la exclusión de elementos típicamente considerados indeseables en los residuos electrónicos y la chatarra.

Imaginemos que queremos fabricar un perfume a partir de la mezcla de tres o cuatro aromas distintos. Siempre, para fabricar ese perfume, se habían tenido en cuenta la influencia que sobre la fragancia habían tenido algunas materias primas, que son las que dan carácter al perfume (por ejemplo, la flor del almendro o la cascara de una naranja); y siempre la base de un buen perfume es una o dos de esas fragancias, con pequeños aditivos de alguna otras. Y desde luego, en esa mezcla está totalmente prohibido añadir algunas sustancias que puedan malograr el perfecto olor final. Hasta hace poco las aleaciones se fabricaban de la misma manera: uno o dos componentes principales (por ejemplo, el hierro y el níquel), con pequeñas adiciones de un tercer/cuarto componente (por ejemplo, Mo y Ti) permitían hacer un buen acero inoxidable. Pero la presencia de algunos elementos podía destruir esa mezcla «maestra» de aleantes. Pero un buen día se descubre que mezclando muchos elementos, donde ninguno tiene predominancia, se puede conseguir un producto final tan eficiente, y de una manera totalmente disruptiva,

como aquel acero inoxidable. Esa buena conjunción de propiedades se consigue gracias a una alta entropía de mezcla, que minimiza la formación de fases indeseadas, y que para conseguirla (la alta entropía) son importantes y necesarios todos los elementos de la mezcla. Se acaba con la manera clásica de «una o dos fragancias» con algún que otro aditivo. Todo suma y la complejidad es la causa de poder minimizar las consecuencias negativas de esa mezcla tan compleja. Es como si en el perfume unos malos posibles olores quedan apantallados por el efecto conjunto de la mezcla. Y esto es perfecto para la mezcla de chatarras o residuos complejos de basura electrónica, donde todo aporta y nada sobra.

Hacia un nuevo paradigma en el diseño de materiales

La aparición de las aleaciones de alta entropía (HEAs, por sus siglas en inglés), también conocidas como aleaciones de elementos múltiples principales (MPEAs), ha transformado el diseño y desarrollo de aleaciones. El desarrollo de las HEAs también ha impulsado un cambio fundamental en la ciencia de los materiales, especialmente en la búsqueda de una metalurgia sostenible. La sostenibilidad en las HEAs se aborda desde dos perspectivas: directa e indirecta. La sostenibilidad directa se logra a través de estrategias como el uso de materias primas de bajo carbono y alta eficiencia energética, la optimización de composiciones de aleación equimolares, y el fomento del reciclaje en las etapas secundarias y terciarias. Por otro lado, la sostenibilidad indirecta se refiere a la capacidad de las HEAs para mejorar la eficiencia y la vida útil de los productos, compensando su alta huella de producción.

A pesar de los avances, persisten algunos desafíos. Dos preocupaciones principales son la alta demanda de materias primas, que a menudo incluyen elementos críticos y estratégicos, y la disponibilidad limitada de aleaciones listas para procesar. Ambos desafíos pueden abordarse desde el enfoque de que lo que hace especial a estas aleaciones, que es la alta entropía de mezcla, y no el porcentaje en el que están mezcladas. Con este enfoque, todos los elementos son valiosos y todos pueden contribuir a las propiedades especiales de la aleación. Es por ello que empieza a ser más pertinente hablar de aleaciones con alta entropía que aleaciones de alta entropía. Este enfoque ha revolucionado el diseño de aleaciones y abre nuevas oportunidades.

Se acaba de publicar un artículo en *Current Opinion in Solid State and Material Science*

(<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359028625000087#b0400>)

donde se propone un cambio radical en el diseño de aleaciones para superar estas restricciones. Al diseñar microestructuras basadas en la alta entropía configuracional de la mezcla, eliminamos las restricciones sobre los elementos

aleantes. Tanto los elementos mayoritarios como los minoritarios pueden utilizarse libremente, lo que permite que cualquier elemento aleante contribuya positivamente al diseño sin restricciones composicionales. Este enfoque va más allá de las aleaciones de alta entropía y se orienta más hacia el diseño de aleaciones con alta entropía, como los aceros de alta entropía, superaleaciones de alta entropía o intermetálicos de alta entropía.

Mejorar las propiedades de las aleaciones mediante la adición de más elementos aleantes ha sido un enfoque común en la metalurgia. Sin embargo, cuando se alcanzan los límites de rendimiento, la metalurgia física interviene mediante tratamientos térmicos y termo-mecánicos, junto con métodos alternativos de fabricación. Como resultado, las aleaciones de alto rendimiento comparten varias características, como una composición compleja y precisa, métodos de fabricación restrictivos y tratamientos intrincados. Cualquier desviación en la composición o las condiciones de procesamiento puede provocar fallos. Esto también implica que las materias primas provienen de un grupo selecto de metales, muchos de los cuales son críticos.

Con este nuevo enfoque cambia el paradigma clásico al utilizar muchos elementos aleantes para lograr una alta entropía configuracional. Elimina elementos previamente restringidos y minimiza el uso de elementos críticos, que históricamente se utilizaban para lograr propiedades específicas. En lugar de esto, el enfoque se centra en maximizar la entropía y optimizar otros parámetros de diseño alternativo como la coherencia entre fases, la energía de apilamiento o la energía que se genera entre bordes de distintas fases.

Este nuevo concepto abre muchas posibilidades para el reciclaje y la reutilización de desechos en la producción de materiales avanzados. Aprovechando la alta entropía, es posible crear mezclas a partir de aleaciones comerciales estandarizadas que cumplan con los criterios necesarios para desarrollar microestructuras viables para un alto rendimiento. Las ventajas de este enfoque incluyen:

- 1) La ausencia de elementos prohibidos (como el cobre en la mayoría de los aceros), ya que todos los elementos pueden contribuir al aumento de la entropía configuracional;
- 2) la capacidad de evitar metales críticos como materias primas directas, aprovechando chatarra de aleaciones comerciales;
- 3) el potencial para utilizar directamente aleaciones multicomponentes de residuos mineros y chatarra electrónica.

Además, este enfoque promueve un aumento en el reciclaje de chatarra, reduce el consumo de energía y materias primas, y mejora el reciclaje de residuos electrónicos, que actualmente es mínimo

Aplicar esta filosofía a los residuos electrónicos (*e-waste*) podría mejorar significativamente la eficiencia del reciclaje y facilitar el desarrollo de aleaciones de alto rendimiento sin depender de metales críticos.

Cambiando el paradigma clásico de la Ciencia e Ingeniería de Materiales (MSE)

- 1) Como ya se ha comentado, el concepto central de esta nueva filosofía de diseño de aleaciones se basa en dos principios clave:
- 2) Diseñar por microestructura en lugar de por composición.

Utilizar conceptos alternativos (en lugar de los tradicionalmente vinculados a los efectos predichos de elementos específicos) como elementos dinámicos en la microestructura deseada.

El objetivo es minimizar la dependencia de materias primas específicas, haciendo que el desarrollo de aleaciones sea más sostenible. Aplicando estos criterios como parámetros de diseño, cualquier elemento incluido en la formulación final de la aleación puede ser validado, evitando la exclusión de elementos normalmente considerados indeseables en residuos electrónicos y metales de chatarra.

Un desafío de este enfoque es el vasto número de posibles variantes de aleación cuando se utilizan aleaciones complejas hechas de desechos o chatarra, o al combinar una amplia variedad de elementos metálicos. Esto requiere el uso de herramientas computacionales avanzadas, que deben integrarse con sistemas de aprendizaje basado en datos, como el aprendizaje automático. Afortunadamente, este enfoque ya está bien establecido en la ciencia de materiales, donde el modelado (incluido el modelado termodinámico) combinado con algoritmos de inteligencia artificial y aprendizaje automático son prácticas comunes.

Otro desafío es la necesidad de datos precisos para respaldar los sistemas de diseño basados en aprendizaje. Esto se puede abordar mediante dos enfoques paralelos:

- 1) Establecer un sistema robusto de gestión de datos, que incluya la adquisición sistemática de datos externos de fuentes abiertas (una práctica promovida por la Unión Europea).

- 2) Generar grandes conjuntos de datos mediante técnicas de fabricación y caracterización de alto rendimiento.

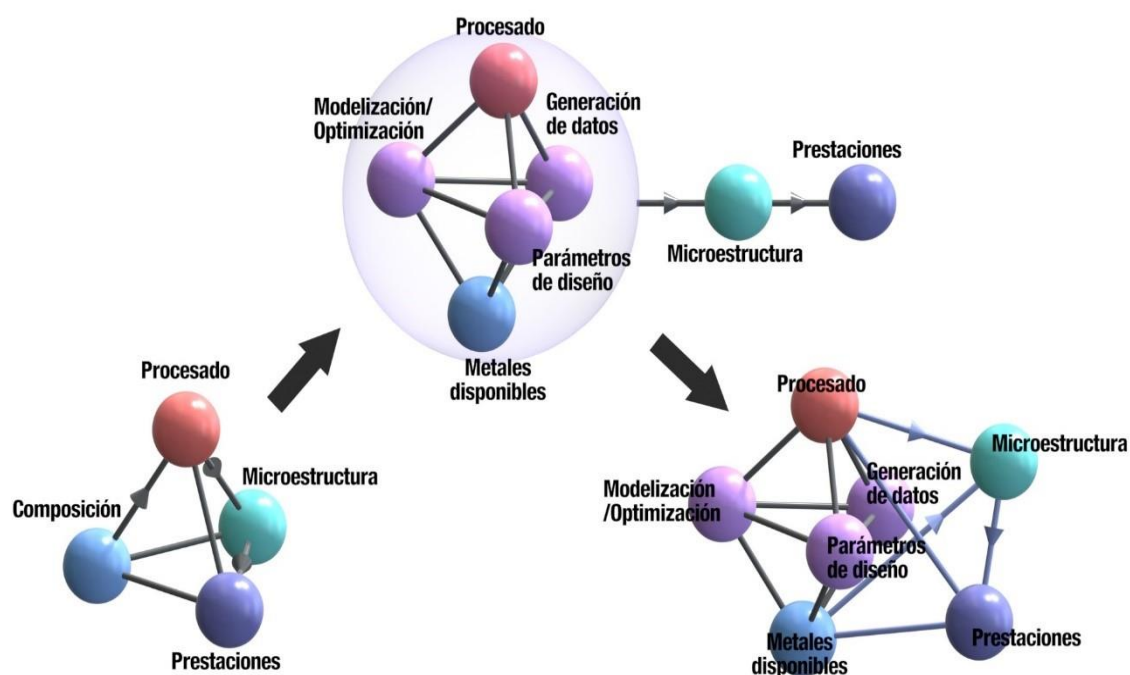
Estos enfoques son complementarios y alineados con la llamada “investigación y desarrollo autónomo en materiales”.

Al considerar estos conceptos, hay cuatro factores críticos al abordar el diseño de nuevas aleaciones:

- 1) ¿Qué materias primas están disponibles? Esto implica evaluar todos los metales en el mercado (incluidos los metales críticos o estratégicos) y el potencial de utilizar aleaciones de chatarra y residuos.
- 2) ¿Qué modelos y métodos de optimización se emplearán (incluida la inteligencia artificial)?
- 3) ¿Qué datos se utilizarán para respaldar el proceso de optimización (y se puede generar más datos mediante fabricación y caracterización de alto rendimiento)?
- 4) ¿Qué parámetros de diseño guiarán la microestructura buscada?

Estos cuatro factores están directamente relacionados con la microestructura que se debe lograr y, por lo tanto, con el rendimiento del material. También están estrechamente conectados con las técnicas de procesamiento necesarias para desarrollar los materiales. En este nuevo paradigma, debemos considerar la revolución que está ocurriendo en las tecnologías de fabricación aditiva, que contribuirán al equilibrio sostenible gracias a su eficiencia en el uso de materias primas, la reducción de peso mediante un diseño optimizado y la disminución de las emisiones de CO₂.

Para pasar de enfocarse en la «composición apropiada» a la «microestructura apropiada», es necesario modificar el paradigma clásico de la Ciencia e Ingeniería de Materiales (MSE). El tetraedro tradicional que correlaciona composición química, propiedades, fabricación y rendimiento debe ser revisado. El vértice de «composición» debe ser reemplazado por un subtetraedro con cuatro vértices: materias primas disponibles, parámetros de diseño, modelado/optimización y generación de datos. Este nuevo subtetraedro está vinculado al procesamiento, que debe optimizarse en alineación con estos nuevos «intersticiales» en el tetraedro, como se muestra en la Figura. Este cambio de paradigma permitirá el uso de fuentes de materiales alternativas y más sostenibles, centrándose no solo en la composición, sino también en parámetros innovadores de diseño y procesamiento que generen microestructuras de vanguardia.



Hacia una metalurgia sostenible

La transición de las HEAs a las AHEs refleja la evolución de la ciencia de materiales, impulsada por avances tecnológicos y un enfoque integral en el diseño de aleaciones modernas de forma más sostenible. Hoy no podemos dar la espalda a la sostenibilidad, y la metalurgia es un actor fundamental en todos los procesos vinculados con la transición energética. Algo se está moviendo en el mundo cuando el centro de Metalurgia más importante del mundo un Instituto de la organización Max-Planck, se ha transformado en «Max-Planck para el desarrollo de Materiales Sostenibles», liderado por su director, el profesor Dierk Raabe, firmemente comprometido en la creación de una nueva disciplina: la «Metalurgia Sostenible».

Nota: Las ideas y opiniones contenidas en este documento son de responsabilidad del autor, sin que reflejen, necesariamente, el pensamiento de la Academia de las Ciencias y las Artes Militares.

© Academia de las Ciencias y las Artes Militares - 2025