

DESARROLLO DE UNA BASE DE DATOS DE ALEACIONES DE ALTA ENTROPÍA PARA SU APLICACIÓN EN SISTEMAS TES

Inés Utrero¹, Camila Barreneche¹, Lorena Betancor¹, Sergi Dosta¹

¹ Departamento de Ciencia de Materiales y Química Física, Universitat de Barcelona, inesutrero@gmail.com; c.barreneche@ub.edu; lorenabetancor@ub.edu; sdosta@ub.edu

Resumen

El presente trabajo desarrolla una base de datos de aleaciones de alta entropía (HEAs) aplicadas a sistemas de almacenamiento de energía térmica (TES) en plantas termosolares. El objetivo principal es mejorar la durabilidad de los tanques de sales fundidas frente a procesos de corrosión y desgaste. Para ello, se recopilaban más de 700 aleaciones a través de la base de datos Scopus y se emplearon herramientas como el software Ansys Granta Constructor y Selector. En el caso de estudio, se identificaron dos aleaciones, TiC-CoCrFeNi y CoCrFeNiNb, que ofrecen un equilibrio óptimo entre resistencia a la corrosión y al desgaste. Los resultados obtenidos respaldan el avance tecnológico en sistemas TES y contribuyen al cumplimiento de los Objetivos de Desarrollo Sostenible.

Palabras clave: aleaciones de alta entropía, almacenamiento de energía térmica, corrosión, desgaste, termosolares, sostenibilidad.

1. INTRODUCCIÓN.

El cambio climático y la dependencia de combustibles fósiles impulsan al uso de energías renovables.

Una de las energías más eficientes y limpias, es la energía solar térmica, capaz de generar electricidad aprovechando un recurso inagotable como es el sol. Este tipo de plantas suele incorporar sistemas de almacenamiento térmico (TES) para asegurar un suministro energético continuo, incluso cuando no hay radiación solar directa. De esta forma, es primordial garantizar la durabilidad, eficiencia y rendimiento de dichos sistemas.

Sin embargo, los tanques de sales fundidas presentan problemas de corrosión y desgaste. Son fabricados normalmente de acero inoxidable, se enfrentan a condiciones extremas en contacto con sales fundidas, lo que reduce su vida útil por corrosión y desgaste [1]. Ante esta situación, este trabajo se basa en el desarrollo de una base de datos de aleaciones de alta entropía (HEAs) que garantice la durabilidad de los tanques de almacenamiento térmico (TES) en plantas termosolares seleccionando el material más adecuado que minimice los procesos de corrosión [2] y desgaste de sus componentes debido al entorno donde se encuentren [3].

Las aleaciones de alta entropía (HEAs) son combinaciones de elementos con proporciones casi o equiatómicas[4], las cuales mejoran las propiedades mecánicas, térmicas y químicas en comparación a las aleaciones tradicionales. Este tipo de materiales tienen

buen resistencia frente a las altas temperaturas y a la corrosión, siendo una opción óptima para mejorar la vida útil de los sistemas TES y así mejorar la eficiencia energética de las plantas termosolares.

1.1 Energía solar térmica.

Las plantas solares de concentración (CSP) o plantas termosolares se basan en el principio de concentrar la radiación solar directa en un único punto.

Para maximizar su efectividad y aumentar la eficiencia de este tipo de plantas se introdujeron los sistemas de almacenamiento térmico (TES) o también conocidos como tanques de sales fundidas. Permite almacenar energía para garantizar el consumo durante las horas en las que el sol no irradia energía.

1.2 Aleaciones de alta entropía HEAs.

Las aleaciones de alta entropía (HEAs) se caracterizan por estar formadas por cuatro o más elementos principales, que, a diferencia de las aleaciones tradicionales, presentan una composición equiatómica o casi equiatómica; lo cual quiere decir que no tienen un elemento predominante y por ello sus propiedades mecánicas, térmicas y químicas son mejoradas.

Existen cuatro efectos que caracterizan las propiedades de estos elementos:

- El efecto de alta entropía.
- El efecto de difusión lenta
- El efecto de distorsión de la red
- El efecto cóctel de propiedades.

Debido a estas propiedades, los HEAs son buenos candidatos como recubrimientos para tanques TES que operan a alta temperatura en medios corrosivos.

2. OBJETIVOS.

El objetivo principal del trabajo es desarrollar una base de datos de aleaciones de alta entropía (HEA), e identificar y seleccionar el material más adecuado para implementarlo como recubrimiento en los tanques de sales de una termosolar. Además, se busca aplicar un caso de estudio de selección de materiales para identificar las aleaciones más adecuadas frente a corrosión y desgaste.

2.1 Objetivos de desarrollo sostenible.

Las energías renovables son conocidas por los aspectos positivos que generan en el entorno ambiental; sin embargo, estas energías presentan impactos ambientales negativos ya que generan residuos que pueden causar daños en el medio ambiente y en el hábitat de diferentes especies; impactos que afectan al entorno. En el caso de las termosolares, provocan deslumbramientos en las aves que les ocasionan desorientación y a su vez fallecimiento e impactos.

Este proyecto tiene como objetivo mejorar la eficiencia y durabilidad de los tanques de almacenamiento de energía de las termosolares (TES) que concuerda con varios Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) [5], contribuyendo con el desarrollo de tecnologías que favorecen la eficiencia energética y la sostenibilidad ya que este tipo de elemento genera impactos ambientales, tanto en su fabricación, como en su uso y al final de su vida útil.

Se puede destacar:

- ODS 7: *Energía asequible y no contaminante.*
- ODS 9: *Industria, Innovación e Infraestructuras.*
- ODS 12: *Producción y Consumo Responsable.*
- ODS 13: *Acción por el clima*

3. CASO DE ESTUDIO.

3.1 Planteamiento del problema.

Uno de los principales problemas es la alta corrosividad del entorno, debido al uso de sales fundidas a altas temperaturas. A medida que hay un aumento de temperatura estas sales pueden reducirse a óxidos que incrementan la corrosión del medio y hay riesgo de tener una corrosión acelerada.



Figura 1. ODS correspondientes a la selección de aleaciones de alta entropía (HEAs) como recubrimiento para mejorar la durabilidad de los sistemas de almacenamiento (TES).

3.2 Metodología.

La metodología se basó en tres fases principales:

3.2.1. Selección de la información.

La metodología se basó en recopilar información sobre HEAs mediante Scopus, obteniendo datos de más de 757 aleaciones de alta entropía con datos experimentales recientes que permiten evaluar su comportamiento frente a condiciones de alta temperatura y ambientes corrosivos [6].

3.2.2. Desarrollo de la base de datos.

Primeramente, se trabajó con Microsoft Excel, registrando todas las propiedades recopiladas, y posteriormente fueron migradas al software Ansys Granta Constructor [7]. Para facilitar su análisis, se clasificaron en seis grandes categorías: propiedades físicas, mecánicas, magnéticas, térmicas, resistencia al desgaste y resistencia a la corrosión. Este esquema permitió identificar patrones y comparar aleaciones.

Tabla 1. Clasificación de las diferentes propiedades de los HEAs

Propiedades físicas	Densidad (kg/m ³) Estructura cristalina
Propiedades mecánicas	Módulo de Young (GPa) Límite elástico (MPa) Resistencia a la tracción (MPa) Resistencia a la compresión (MPa) Elongación (%) Dureza Vickers (HV)
Propiedades magnéticas	Magnetización de Saturación (emu/g)
Propiedades térmicas	Conductividad térmica (W/m·K)
Resistencia al desgaste	Ratio de desgaste volumétrico (mm ³ /Nm) Ratio de erosión (m ³ /mm ²) Ratio de desgaste (mm ³ /m) Coeficiente de fricción (COF)
Resistencia a la corrosión	Densidad de corriente de corrosión (μA/cm ²) Potencial de corrosión (V) Ratio de corrosión (mm/año)

3.3 Selección de material.

El seleccionar un recubrimiento que mejore el contacto entre el sólido y el fluido al transporta el calor y optimice la transferencia de energía térmica, es el objetivo principal de este estudio. Cuando se combinan diferentes propiedades y parámetros del material para mejorar un objetivo concreto, el rendimiento del material se determina mediante el índice de material.

Se establecieron umbrales limitantes para la densidad de corriente de corrosión ($I_{\text{corr}} \leq 10 \mu\text{A}/\text{cm}^2$), el potencial de corrosión ($E_{\text{corr}} \geq -0.4 \text{ V}$) y la tasa de desgaste volumétrico ($\leq 1 \times 10^{-4} \text{ mm}^3/\text{Nm}$) [7].

Con estos datos se elaboró un índice de material que combina las dos propiedades más críticas —resistencia a la corrosión y resistencia al desgaste—, de modo que se pudiera identificar el equilibrio más favorable.

$$M = \frac{1}{a \cdot R_{\text{corrosión}} + b \cdot R_{\text{desgaste}}}$$

Fig 2. Índice de material

Además, se tuvo en cuenta las distintas técnicas de aplicación de recubrimientos como High Velocity Oxy-Fuel (HVOF), Atmospheric Plasma Spray (APS) o Spark Plasma Sintering (SPS)[8].

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

El resultado principal de este trabajo es la creación de una base de datos que permitió filtrar las aleaciones de alta entropía más prometedoras. A partir de ella se aplicó un índice de material (Fig 2).

Cuando se crea un conflicto en la elección del objetivo; la mejor opción es buscar el material que se acerque a optimizar mejor ambas propiedades. La elección más viable es la que cumpla con todas las restricciones, aunque no optimice ninguno de los objetivos.

Por ese motivo, se representó por un lado la densidad de corrosión de las diferentes aleaciones de alta entropía, tal como se muestra en la Figura 1.

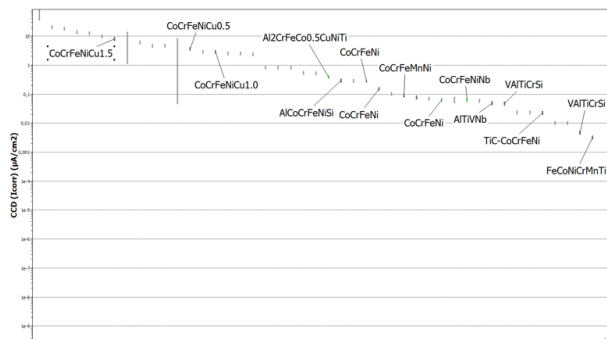


Figura 1. Densidad de corrosión I_{corr} de aleaciones de alta entropía HEAS

Y en el segundo caso se mostró la distribución de las aleaciones de alta entropía según su tasa de desgaste (Figura 2).

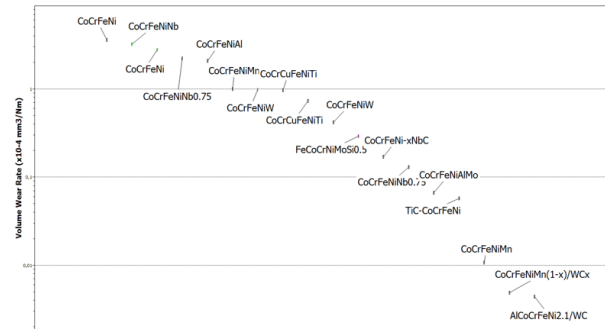


Figura 2. Tasa de desgaste volumétrico para aleaciones de alta entropía HEAS

Finalmente se representó el valor del índice de material seleccionado que garantiza buena resistencia a la corrosión y al desgaste. Los materiales con mayor valor de índice de material (M) muestra un mayor equilibrio frente a los mecanismos de degradación, a su vez penaliza los materiales que son deficientes según los datos recopilado en una de las propiedades seleccionadas; aunque sean excelentes en la otra.

Por ello, con los datos recopilados se mostró que teóricamente el TiC-CoCrFeNi y CoCrFeNiNb son las opciones más equilibradas [9] para entornos de altas temperaturas y ambientes corrosivos.

En ambos casos, el índice de material alcanzó valores elevados, confirmando un buen equilibrio entre resistencia a la corrosión y al desgaste. La primera, al incluir titanio y carbono, consigue formar capas protectoras densas y estables, mientras que la segunda, gracias a la incorporación de niobio, presenta una notable mejora en la estabilidad de la película pasiva, aunque con la necesidad de controlar la cantidad de este elemento [8].

Estos resultados son relevantes porque demuestran que la aplicación de HEAs en TES no solo tiene una base científica sólida, sino que también supone una mejora directa frente a los aceros inoxidable, que hoy en día son la opción más utilizada. Además, extender la vida útil de los tanques no solo reduce los costes de sustitución, sino que disminuye el impacto ambiental asociado al consumo de materiales y la generación de residuos.

No obstante, el trabajo también muestra la necesidad de continuar ampliando la base de datos con nuevos estudios experimentales, en particular aquellos que evalúen las HEAs en condiciones de operación reales de plantas termosolares [9].

5. CONCLUSIONES.

Este proyecto se basa en la creación de una base de datos estructurada de más de 700 aleaciones de alta entropía con propiedades mecánicas, térmicas y químicas relevantes.

Mediante el uso de software de selección Ansys Granta Constructor y Selector se ha podido construir una base de datos técnica y aplicar filtros restrictivos que ha facilitado la selección del HEAs más adecuado para aplicarlos como recubrimientos en los sistemas de almacenamiento de energía (TES).

Se ha aplicado un caso de estudio de selección de materiales para sistemas TES, identificando como más viables las aleaciones TiC-CoCrFeNi y CoCrFeNiNb, las cuales garantizan una mayor durabilidad de los sistemas de almacenamiento de energía (TES).

Demostrar que el uso de HEAs como recubrimiento mejora la durabilidad y eficiencia de los sistemas TES, contribuyendo a varios Objetivos de Desarrollo Sostenible.[10]

Estos resultados pueden ser la base para futuras investigaciones centradas en la aplicación real de HEAs en entornos termosolares, donde la durabilidad del material sea un factor crítico.

6. REFERENCIAS.

- [1] S. Dosta, L. Betancor, and C. Barreneche, "Overview of surface engineering technology to improve the energy efficiency in concentrated solar power (CSP) plants," Oct. 15, 2024, *Elsevier B.V.* doi:10.1016/j.solmat.2024.113090.
- [2] Liu J. et al., Influence of alloying elements on corrosion resistance of HEAs, *J Alloys Compd.*, 2024.
- [3] Fujieda T. et al., Mechanical and corrosion properties of CoCrFeNiTi HEAs, *Addit. Manuf.*, 2019.
- [4] Ujah C.O. et al., Corrosion characteristics of HEAs by spark plasma sintering, *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, 2024.
- [5] Muñoz Velasco P., Tema 4: Energía Solar Térmica, UNIR, 2025.
- [6] Zhang Y. et al., Microstructures and properties of high-entropy alloys, *Prog Mater Sci*, 2014.
- [7] Barreneche C. et al., Database on phase change materials for TES, *Energy Procedia*, 2014.
- [8] Zhang F. et al., Developments in CoCrFeNi-based HEAs coatings, *J Alloys Compd.*, 2025.
- [9] Hua W. et al., Progress in seasonal TES based on supercooled phase change materials, *Energy Storage*, 2023.

[10] Naciones Unidas, La Agenda 2030 y los Objetivos de Desarrollo Sostenible, 2030.