



UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA Y  
DISEÑO INDUSTRIAL

Grado en Ingeniería Electrónica y Automática Industrial

## TRABAJO FIN DE GRADO

# MODELADO Y SIMULACIÓN DE ESPACIADORES NANOMÉTRICOS PARA SU APLICACIÓN EN DISPOSITIVOS TPVs DE CAMPO CERCANO

Martin Augusto Reigadas Teran

*Tutor:* Pablo García-Linares Fontes

Departamento de Ingeniería Eléctrica, Electrónica, Automática y  
Física Aplicada

*Cotutora:* Esther López Estrada

Instituto de Energía Solar

Madrid, Septiembre, 2022



**Título:** Modelado y simulación de espaciadores nanométricos para su aplicación en dispositivos TPVs de campo cercano

**Autor:** Martin Augusto Reigadas Teran

**Tutor:** Pablo García-Linares Fontes

**Cotutora:** Esther López Estrada

## EL TRIBUNAL

Presidente:

Vocal:

Secretario:

Realizado el acto de defensa y lectura del Trabajo Fin de Grado el día ... de ..... de ... en ....., en la Escuela Técnica Superior de Ingeniería y Diseño Industrial de la Universidad Politécnica de Madrid, acuerda otorgarle la CALIFICACIÓN de:

VOCAL

SECRETARIO

PRESIDENTE



# Agradecimientos

Agradezco a mi tutor Pablo por darme la oportunidad de realizar un trabajo dentro de las líneas de investigación de la termo-fotovoltaica y contribuir a esta misma, permitirme explorar por mi cuenta y experimentar como la investigación llega a ser.

A mi cotutora Esther por brindarme tanto apoyo durante la realización del trabajo, explicándome conceptos en mayor detalle y permitirme ir más allá con el trabajo. También agradezco a Alejandro Datas por brindarme apoyo para no salirme de los objetivos de este trabajo.

Gracias a los tres por permitirme participar en la elaboración del póster presentado en la treceava conferencia mundial en la generación de electricidad termo-fotovoltaica (TPV-13) de Abril del 2022, compartida con la dieciochoava conferencia internacional de sistemas fotovoltaicos de concentración (CPV-18).

A mi padre por siempre apoyarme durante la carrera, y a mi hermana Andrea por brindarme apoyo cuando más lo necesitaba y por siempre estar ahí encargándose de muchas cosas.

A mis amigos, Aiwen, ZhanYao y Tesa con los cuales he pasado estos duros cuatro años juntos estudiando, trasnochando realizando los trabajos de las asignaturas, viviendo nuevas experiencias y aprendiendo bastante cosas más allá de la ingeniería.

A Yvonne por empujarme a salir de mi zona de confort, hacer lo que hay que hacer cuando se debía y aprender a como seguir con la vida.

A Noelia por estar ahí gran parte del tiempo de realización de este trabajo, apoyándome en cada fase y recordándome de tomar descansos.

A la Asociación del Cubo por permitirme conocer a gente tan bonita como Rafael, que siempre ha brindado su apoyo y llegando a ser de gran ayuda para la realización de este trabajo. Al CREA por permitirme conocer a más gente que le encanta la electrónica y pasar unas buenos ratos con los proyectos.



# Resumen

La termo-fotovoltaica (TPV) es un campo de interés por sus aplicaciones en sistemas de recuperación de calor y su uso en sistemas de almacenamiento de energía en forma de calor latente, consiguiéndose aumentar la potencia de salida al disminuir la distancia de separación entre el emisor y la célula a unos cientos de nanómetros por el aumento de la transmisión de calor por radiación, siendo las potencias superiores a las de un cuerpo negro según la ley de Planck, este efecto se le conoce como “efecto de campo cercano”. Estos sistemas TPV que aprovechan el efecto de la radiación de campo cercano se les conocen como nTPV y su mayor problema es el mantenimiento constante de la distancia de separación, por lo que se utilizan nano-espaciadores que producen pérdidas por conducción.

En este trabajo se simulan la transmisión de calor por conducción y por radiación de campo cercano para varios sistemas nTPVs de emisores de silicio, acero inoxidable y carburo de silicio a 800°C con un nano-espaciador de dióxido de silicio y unas células principalmente de germanio a 25°C, con y sin resistencias de contacto entre el emisor y los nano-espaciadores para un rango de alturas de nano-espaciadores de 100nm a 1000nm. Se obtienen las densidades de nano-espaciadores en un centímetro cuadrado de nTPV para las relaciones de las potencias mayores a un orden de magnitud de cada caso de cada sistema para determinar su viabilidad.

También se estudia la viabilidad de un sistema nTPV con célula fotovoltaica de silicio y emisor de silicio para diferentes grados de porosidad del dióxido de silicio en el nano-espaciador y para el caso de la nTPV con resistencia de contacto entre emisor y nano-espaciadores.

Por último, se calculan las densidades de nano-espaciadores en un centímetro cuadrado de emisor y célula para soportar la carga del emisor y una presión de una atmósfera. Se simulan las transmisión de calor por conducción para los casos de nTPVs de nano-espaciadores de silicio y células de germanio para los diferentes materiales de emisor ya mencionados, con y sin resistencia de contacto, obteniendo la importancia de la elección de los materiales para los nano-espaciadores.

**Palabras clave:** Termo-fotovoltaica, radiación de campo cercano, recuperación de calor.



# Abstract

Thermophotovoltaics (TPV) is a field of interest due to its applications in heat recovery systems and its use in energy storage systems in the form of latent heat, achieving an increase in output power by reducing the separation distance between the emitter and the cell at a few hundred nanometres due to the increase in heat transmission by radiation, being the powers higher than those of a black body according to Planck's law, this effect is known as "near field effect". These TPV systems that take advantage of the near field radiation effect are known as nTPV and their biggest problem is the constant maintenance of the separation distance, which is why nano-spacers are used that produce conduction losses.

In this work, the heat transmission by conduction and near-field radiation is simulated for several nTPVs systems with emitters made of silicon, stainless steel and silicon carbide at 800°C with a silicon dioxide nano-spacer and cells mainly made of germanium at 25°C, with and without contact resistances between the emitter and the nano-spacers for a range of the nano-spacers heights from 100nm to 1000nm. Nano-spacer densities in one square centimetre of nTPV are obtained for power ratios greater than one order of magnitude for each case of each system to determine their feasibility.

The feasibility of an nTPV system with silicon photovoltaic cell and silicon emitter is also studied for different degrees of porosity of silicon dioxide of the nano-spacer and the case of an nTPV with contact resistance between emitter and nano-spacers.

Finally, the densities of nano-spacers in a square centimetre of emitter and cell to support the load of the emitter and the pressure of one atmosphere are calculated. Heat transmission by conduction is simulated for the cases of nTPVs of silicon nano-spacers and germanium cells for the same emitter materials already mentioned, with and without contact resistance, obtaining the importance of the selection of the materials for the nano-spacers.

**Keywords:** Thermophotovoltaic, near-field radiation, heat recovery.



# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>v</b>
<b>Resumen</b>	<b>vii</b>
<b>Abstract</b>	<b>ix</b>
<b>Índice</b>	<b>xiii</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación del proyecto . . . . .	1
1.2. Objetivos . . . . .	4
1.3. Estructura del documento . . . . .	5
<b>2. Estado del arte</b>	<b>7</b>
2.1. Termo-fotovoltaica . . . . .	7
2.2. Transmisión de calor . . . . .	10
2.2.1. Convección . . . . .	10
2.2.2. Conducción . . . . .	11
2.2.3. Radiación . . . . .	11
<b>3. Materiales y Herramientas</b>	<b>15</b>
3.1. Materiales . . . . .	15
3.1.1. Nano-espaciadores . . . . .	15
3.1.2. Célula fotovoltaica . . . . .	15
3.1.3. Emisor TPV . . . . .	16
3.2. Herramientas . . . . .	17
3.2.1. Granta EduPack 2021 R2 . . . . .	18
3.2.2. Refractive Index . . . . .	18
3.2.3. Autodesk Inventor Professional 2021 . . . . .	18
3.2.4. Autodesk CFD . . . . .	19
3.2.5. MATLAB . . . . .	19
3.2.6. Calculadora de campo cercano . . . . .	20
<b>4. Métodos</b>	<b>23</b>
4.1. Criterios de geometría y escala . . . . .	23
4.2. Cálculos de las propiedades de los materiales para las simulaciones . .	23
4.2.1. Área . . . . .	24
4.2.2. Volumen . . . . .	24
4.2.3. Densidad . . . . .	24

4.2.4. Conductividad Térmica . . . . .	24
4.2.5. Calor Específico . . . . .	25
4.2.6. Resistencia de contacto . . . . .	25
4.3. Procedimientos de las simulaciones y extracción de resultados . . . . .	27
4.3.1. Para la radiación de campo cercano . . . . .	27
4.3.2. Para la conducción térmica . . . . .	27
<b>5. Resultados y discusión</b>	<b>31</b>
5.1. Validación de las simulaciones de CFD . . . . .	31
5.2. Resultados de las simulaciones para una nTPV de Si-SiO <sub>2</sub> -Si . . . . .	32
5.2.1. Efectos de la resistencia de contacto sobre la conducción . . . . .	32
5.2.2. Efecto de la porosidad sobre la conducción . . . . .	33
5.2.3. Radiación de campo cercano . . . . .	34
5.3. Resultados de las simulaciones para una nTPV de Si-SiO <sub>2</sub> -Ge . . . . .	37
5.3.1. Simulaciones de CFD . . . . .	37
5.3.2. Radiación de campo cercano . . . . .	38
5.3.3. Densidad de nano-espaciadores . . . . .	39
5.4. Resultados de las simulaciones para una nTPV de SS-SiO <sub>2</sub> -Ge . . . . .	42
5.4.1. Simulaciones de CFD . . . . .	42
5.4.2. Radiación de campo cercano . . . . .	44
5.4.3. Densidad de nano-espaciadores . . . . .	45
5.5. Resultados de las simulaciones para una nTPV de SiC-SiO <sub>2</sub> -Ge . . . . .	48
5.5.1. Simulaciones de CFD . . . . .	48
5.5.2. Radiación de campo cercano . . . . .	49
5.5.3. Densidad de nano-espaciadores . . . . .	50
5.6. Densidad de nano-espaciadores para soportar la carga . . . . .	52
5.7. Resultados de las simulaciones para unas nTPVs de nano-espaciadores de Si . . . . .	53
<b>6. Conclusiones</b>	<b>55</b>
6.1. Conclusiones del trabajo . . . . .	55
6.2. Desarrollos futuros . . . . .	56
<b>A. Procedimientos simulaciones radiación</b>	<b>59</b>
A.1. Procedimientos genéricos . . . . .	59
A.2. Distancia fija y un par de materiales . . . . .	60
A.3. Rango de distancias y un par de materiales . . . . .	60
A.4. Distancia fija y varios materiales . . . . .	61
A.5. Rango de materiales y varios materiales . . . . .	62
A.6. Integración de la potencia en un rango espectral . . . . .	62
A.7. Guardado de los datos . . . . .	63
<b>B. Procedimiento del modelado 3D</b>	<b>65</b>
<b>C. Procedimiento simulación conducción</b>	<b>67</b>
<b>D. Lista de siglas</b>	<b>71</b>
<b>E. Tabla de Símbolos</b>	<b>72</b>





# Índice de figuras

1.1.	Relación entre demanda total de energía primaria anual . . . . .	1
1.2.	Desglose del consumo de energía primaria en España 20 . . . . .	2
1.3.	Planta de valorización energética del Centro Las Lomas del Parque Tecnológico de Valdemingómez, donde se aprovecha los gases a alta temperatura para producir vapor de agua en la caldera para mover unas turbinas conectadas a generadores para producir electricidad. <i>Fuente: Ayuntamiento de Madrid</i> . . . . .	3
2.1.	Flujo de conversión de la energía térmica en energía eléctrica . . . . .	7
2.2.	Relación entre densidad de potencia y eficiencia entre dispositivos nTPVs y nTiPVs . . . . .	9
2.3.	Esquemático de la representación geométrica para el flujo entre dos cuerpos separados por vacío . . . . .	13
2.4.	Flujos de radiación monocromática por variación de grosor de emisor y variación de distancia . . . . .	14
3.1.	Potencias por unidad de área para una célula de Ge y diferentes materiales de emisor para un rango de longitudes de onda desde aproximadamente $0.2 \mu m$ hasta $1.8 \mu m$ (0.7 eV) con distancias de separación de 100nm y 1000nm según las ecuaciones (2.4) y (2.5) . . . . .	16
3.2.	Pestaña <i>Potencia Radiada</i> de la calculadora de campo cercano . . . . .	20
3.3.	(a) Ventana para la selección del rango de las distancias de separación entre el emisor y el receptor. (b) Ventana para la selección de los materiales para el emisor y el receptor. . . . .	21
3.4.	Pestaña de la Potencia . . . . .	21
3.5.	Pestaña de los datos de n y k de los materiales disponibles . . . . .	22
4.1.	Vistas del sistema TPV. (b) Vista del sistema TPV de cerca desde un borde. (c) Vista del nano-espaciador colocado sobre el centro de una cara de la célula. . . . .	28
5.1.	Efectos de la resistencia de contacto sobre el flujo de calor por conducción . . . . .	32
5.2.	Resultados gráficos de la simulación de CFD de la transmisión de calor por conducción a través de un nano-espaciador de 1000nm de altura sin $R_c$ (a) y con $R_c$ (b). . . . .	33
5.3.	Efectos de la porosidad del nano-espaciador sobre el flujo de calor por conducción . . . . .	34

5.4. Potencia de radiación espectral para dos placas gruesas planas de <i>Si</i> en todo el rango espectral frente a diferentes distancias de separación de las placas ( <i>d</i> ) en metros. <i>Fuente de la imagen: Calculadora de campo cercano, descrita en la sección 3.2.6</i>	35
5.5. Potencias por unidad de área transmitida por radiación por efecto de campo cercano para el rango espectral de energía mayor a 1.1 eV (a) y para todo el rango espectral (b) frente a las diferentes distancias de separación.	35
5.6. Densidad de los nano-espaciadores para diferentes relaciones de las potencias de radiación en el rango espectral de energía mayor a 1.1 eV respecto a las de conducción para cada densidad de nano-espaciadores de un sistema nTPV de $1\text{cm}^2$ y célula de <i>Si</i> sin $R_c$ (a) y con $R_c$ (b) frente a las diferentes alturas de los nano-espaciadores. La barra de colores al lateral de cada gráfica representa todas las relaciones entre ambas potencias para diferentes densidades de nano-espaciadores en el rango que se muestra en los extremos de cada barra. También se muestran los contornos con su valor para destacar las distintas relaciones existentes de una manera sencilla.	36
5.7. Potencias transmitidas por conducción para un sistema nTPV de <i>Si</i> – $\text{SiO}_2$ – <i>Ge</i> de un nano-espaciador con emisor a $800^\circ\text{C}$ y célula a $25^\circ\text{C}$ sin $R_c$ (a) y con $R_c$ (b) frente a las diferentes alturas del nano-espaciador.	37
5.8. Potencias de radiación espectral por campo cercano para un sistema nTPV <i>Si</i> – $\text{SiO}_2$ – <i>Ge</i> frente a las longitudes de onda para varias distancias de separación entre placas(a) y para dos materiales de célula, <i>Si</i> y <i>Ge</i> (b).	38
5.9. Potencias por unidad de área para la radiación de campo cercano para el sistema <i>Si</i> – $\text{SiO}_2$ – <i>Ge</i> frente a las diferentes alturas del nano-espaciador	38
5.10. Densidad de los nano-espaciadores para diferentes relaciones de las potencias de radiación en el rango espectral de energía mayor a 0.7 eV respecto a las de conducción para cada densidad de nano-espaciadores de un sistema nTPV de $1\text{cm}^2$ y célula de <i>Ge</i> sin $R_c$ (a) y con $R_c$ (b) frente a las diferentes alturas de los nano-espaciadores. La barra de colores al lateral de cada gráfica representa todas las relaciones entre ambas potencias para diferentes densidades de nano-espaciadores en el rango que se muestra en los extremos de cada barra. También se muestran los contornos con su valor para destacar las distintas relaciones existentes de una manera sencilla.	39
5.11. Densidad de los nano-espaciadores para diferentes relaciones de las potencias de radiación en todo el rango espectral respecto a las de conducción para cada densidad de nano-espaciadores de un sistema nTPV de $1\text{cm}^2$ y célula de <i>Ge</i> sin $R_c$ (a) y con $R_c$ (b) frente a las diferentes alturas de los nano-espaciadores. La barra de colores al lateral de cada gráfica representa todas las relaciones entre ambas potencias para diferentes densidades de nano-espaciadores en el rango que se muestra en los extremos de cada barra. También se muestran los contornos con su valor para destacar las distintas relaciones existentes de una manera sencilla.	40
5.12. Potencias transmitidas por conducción para una nTPV <i>SS</i> – $\text{SiO}_2$ – <i>Ge</i> sin $R_c$ (a) y con $R_c$ empírica de $4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2\text{K/W}$ (b) frente a las alturas de un nano-espaciador.	42

5.13. Potencias transmitidas por conducción para una nTPV $SS-SiO_2-Ge$ con $R_c$ calculadas, con una $R_c$ máxima de $5,5 \cdot 10^{-3} m^2 K/W$ (b) y una $R_c$ intermedia $2,75 \cdot 10^{-3} m^2 K/W$ (a) frente a las alturas de un nano-espaciadores . . . . .	43
5.14. Potencias por radiación integradas en el rango espectral de energía mayor a 0.7eV para un emisor de $Fe$ y un emisor de $SS$ con receptor de $Ge$ frente a las diferentes distancias de separación de las placas . . . . .	44
5.15. (a) Potencia radiada espectral por campo cercano para un emisor de $SS$ y una célula de $Ge$ . (b) Potencia radiada para un rango de longitudes de onda cuya energía es mayor a los 0.7eV ( $\sim 1,8 \mu m$ ). . . . .	45
5.16. Densidades de nano-espaciadores para todas las relaciones de las potencias de radiación respecto a las conducción para un emisor de $SS$ frente a las altura de los nano-espaciadores para un emisor y una célula de $1 cm^2$ sin $R_c$ (a) y con $R_c$ empírica (b). El espectro de colores para cada relación entre las potencias de cada gráfica está indicado en las barra de colores lateral en el rango de valores que se encuentran en los extremos de cada barra. . . . .	45
5.17. Densidades de nano-espaciadores para todas las relaciones de las potencias de radiación respecto a las conducción para un emisor de $SS$ frente a las altura de los nano-espaciadores para un emisor y una célula de $1 cm^2$ con $R_c$ calculada intermedia (a) y con $R_c$ calculada máxima (b). El espectro de colores para cada relación entre las potencias de cada gráfica está indicado en las barra de colores lateral en el rango de valores que se encuentran en los extremos de cada barra. . . . .	46
5.18. (a) Potencias transmitidas por conducción para sin y con el efecto de la $R_c$ empírica, eje izquierdo para el caso sin $R_c$ y eje derecho para el caso con $R_c$ . (b) Relación de la potencia de conducción con $R_c$ respecto a sin $R_c$ . . . . .	48
5.19. (a) Potencias integradas en el rango espectral de energía mayor a 0.7eV para un emisor de $SiC$ y un emisor de $Si$ frente a las distancias de separación entre emisor y receptor. (b) Potencia de radiación espectral para un emisor de $Si$ y $SiC$ con un receptor de $Ge$ para una distancia de separación de 100nm frente longitudes de onda. . . . .	49
5.20. Potencias de radiación espectral frente a las longitudes de onda para un sistema de $SiC - SiC$ frente a diferentes distancias de separación entre placas. . . . .	49
5.21. Densidades de nano-espaciadores ( $n^{°} esp/cm^2$ ) frente a las alturas de los nano-espaciadores para todas las relaciones de la potencia de radiación en el rango espectral de energías mayores e igual a 0.7 eV respecto a las potencias de conducción (dependientes en la densidad de nano-espaciadores) mayores a 3 para el caso sin $R_c$ (a) y mayores a 10 para el caso con $R_c$ (b). Donde las barras de colores laterales de cada gráfica representan los colores asociados a cada uno de los valores de las relaciones de las potencias, con los contornos de las relaciones más significativas representadas en las gráficas. . . . .	50

5.22. Potencias transmitidas por conducción de unas nTPVs con emisores de <i>Si</i> , <i>SS</i> y <i>SiC</i> frente a las alturas de un solo nano-espaciador en nanometros para un nano-espaciador de <i>Si</i> (a) y para un nano-espaciador de <i>SiO<sub>2</sub></i> (b). . . . .	53
5.23. Densidades de nano-espaciadores ( $n^{\circ} esp/cm^2$ ) frente a las alturas de los nano-espaciadores para todas las relaciones de la potencia de radiación en el rango espectral de energías mayores e igual a 0.7 eV respecto a las potencias de conducción con $R_c$ (dependientes en la densidad de nano-espaciadores) mayores a 10 para nTPVs de nano-espaciadores de <i>Si</i> (a) y <i>SiO<sub>2</sub></i> (b) . Donde las barras de colores laterales de cada gráfica representan los colores asociados a cada uno de los valores de las relaciones de las potencias, con los contornos de las relaciones más significativas representadas en las gráficas. . . . .	54
A.1. Seleccionador de una distancia de separación en nanometros (a) y seleccionar de los materiales de emisor (Superior plate) y receptor (Inferior plate) (b) de la calculadora de campo cercano. . . . .	60
A.2. Indicadores del estado actual del sistema. (a) Indicador del estado <b>Changed</b> o estado de cambio, se activa cuando se produce algún cambio en los datos seleccionados para simular. (b) Indicador del estado <b>Running</b> o corriendo, se activa cuando estando en el estado <b>Changed</b> se hace clic al botón <b>Calculate</b> y corre la simulación. (c) Indicador del estado <b>StdBy</b> , se activa cuando termina la simulación, avisando que está a la espera de algún cambio. . . . .	60
A.3. (a) Casilla para la selección de la opción de simular un rango de distancias. (b) Ventana para la selección del rango de distancias a simular. . . . .	61
A.4. (a) Ventana para la selección de las combinaciones de materiales a simula, siendo <b>UpFace</b> el emisor y <b>DownFace</b> la célula. (b) Casilla para la selección de la opción de simular una combinación de materiales.	62
A.5. Preferencias para el cálculo de la potencia . . . . .	63
A.6. (a) Botón de guardar los resultados obtenidos de los cálculos o la simulación, dependiendo de la pestaña que se encuentre el usuario de la calculadora de campo cercano. (b) Botón de guardar todos los resultados obtenidos de los cálculos y simulación. . . . .	63
B.1. Vistas del sistema TPV. (a) Vista de lejos del sistema completo de la TPV. (b) Vista del sistema TPV de cerca desde un borde. (c) Vista del nano-espaciador colocado sobre el centro de una cara de la célula.	66
C.1. (a) Panel de las herramientas utilizadas para aplicar materiales, condiciones de contorno, lanzar simulaciones, seleccionar el selector de superficies y volúmenes. (b) Paneles de las herramientas utilizadas para la extracción de resultados de las simulaciones de transmisión de calor por conducción. . . . .	68
C.2. (a) Mallado del nano-espaciador de 100nm, con tamaño de malla de 0.01. (b) Mallado del nano-espaciador de 100nm visto de cerca. (c) Mallado del nano-espaciador de 1000nm, con tamaño de malla de 0.1.	68

C.3. (a) Panel de control de la ventana del Solver.(b) Panel de las propiedades físicas de la ventana del Solver. . . . .	69
C.4. (a) Pestaña de selección y resultados del <b>Wall Calculator</b> .(b) Pestaña de salida del <b>Wall Calculator</b> . . . . .	69



# Índice de tablas

5.1. Tabla de resultados de las simulaciones de conducción y radiación de campo cercano para diferentes alturas del nano-espaciador. Flujos de calor del nTPV $Si - SiO_2 - Si$ para diferentes alturas del nano-espaciador, para los casos sin $R_c$ y con $R_c$ igual a $4 \cdot 10^{-6} m^2 K/W$ , y sin $R_c$ pero con las proporciones de las porosidades de unos 25 % y un 50 %. . . . .	36
5.2. Tabla de las potencias de resultado de las simulaciones de transmisión de calor por radiación de campo cercano y conducción para el sistema nTPV $Si - SiO_2 - Ge$ . . . . .	41
5.3. Tabla de recopilación de los resultados de las simulaciones de transmisión de calor por conducción y radiación de campo cercano para una nTPV de emisor de $SS$ . . . . .	47
5.4. Tabla de recopilación de los resultados de las simulaciones de transmisión de calor por conducción y radiación de campo cercano para una nTPV de emisor de $SiC$ . . . . .	51
5.5. Tabla de recopilación de los resultados de las simulaciones de transferencia de calor por conducción para las nTPVs con nano-espaciador de $Si$ y emisores de $Si$ , $SS$ y $SiC$ respecto a cada altura del nano-espaciador. . . . .	53



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Motivación del proyecto

En los últimos años el consumo de energía primaria en España ha aumentado significativamente de unos 88455 ktep( $\sim 1,03E12 \text{ kWh}$ ) en 1990 a unos 126107 ktep( $\sim 1,43E12 \text{ kWh}$ ) en 2019, que equivale a un aumento del 42 % respecto a su valor en 1990, llegando a ser su valor máximo unos 146891 ktep( $\sim 1,71E12 \text{ kWh}$ ) en 2007 [1].

De 2008 a 2014, como consecuencia de la crisis económica el consumo energético disminuyó hasta unos 117824 ktep ( $\sim 1,37E12 \text{ kWh}$ ) en 2014, recuperándose a partir del 2015, como se puede observar en la figura 1.1.

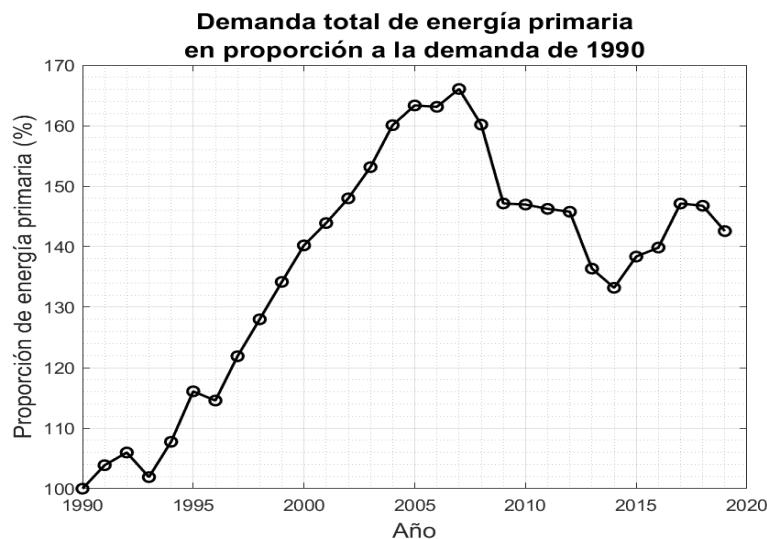


Figura 1.1: Representación gráfica de la relación entre la demanda total de energía primaria anual de 1990 hasta 2019 en España. *Fuente obtención de datos: Ministerio para la transición ecológica y el reto demográfico de España.*

Dicha energía se puede dividir en diferentes categorías según el sector que la consume o la fuente de la misma. En el 2019, un 44.5 % de la energía primaria fue consumida de productos petrolíferos y apenas un 14.5 % de renovables (figura 1.2a), y un 23.6 % de la energía final fue consumida por el sector de la industria (figura

1.2b), representando casi una cuarta parte del consumo total de la energía final en España. Desafortunadamente en todos los procesos energéticos, ya sean de producción, transporte o consumo, una parte de la energía siempre es desaprovechada en forma de calor (conocido como calor residual). Por ejemplo, en 2015 la industria en España consumió aproximadamente 220 TWh de energía, desperdi ciéndose unos 22 TWh según los cálculos de las estimaciones realizadas en [2].

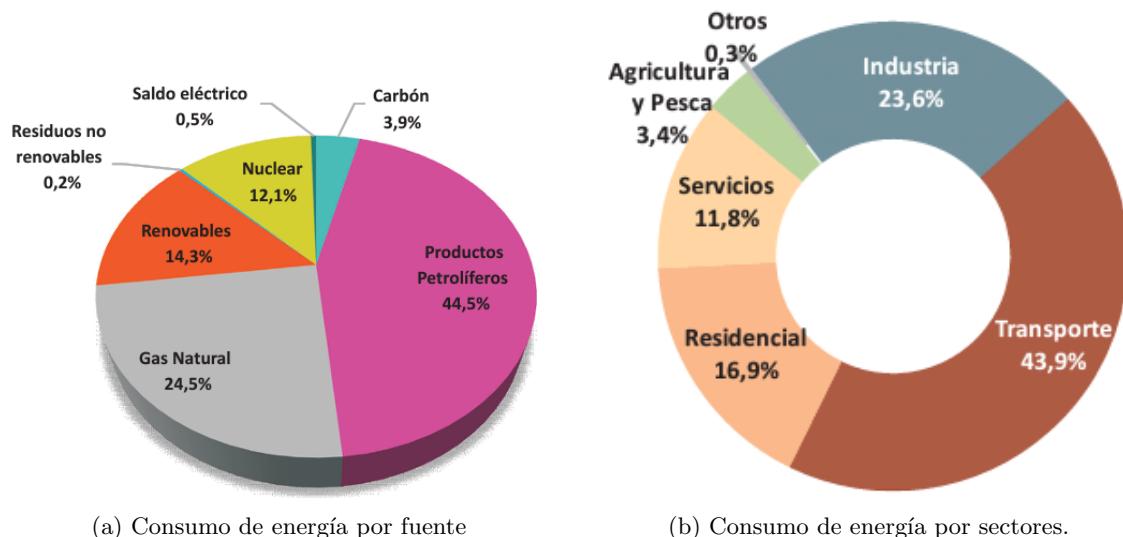


Figura 1.2: Desglose del consumo de energía primaria en España 2019 por fuente de energía(a). Consumo de energía final por sectores en el año 2019 en España(b). *Fuente: Ministerio para la transición ecológica y el reto demográfico de España.*

Para recuperar esta energía perdida se han desarrollado instalaciones de recuperación de calor residual, no solo para disminuir los costes sino también para disminuir las emisiones de contaminantes, cumpliendo así parte de los objetivos de desarrollo sostenible. El calor residual se puede aprovechar para obtener electricidad o para calentar un fluido para mejorar la eficiencia del mismo u otro proceso, disminuyendo el consumo de combustible o energía.

El aprovechamiento del calor residual para el calentamiento de otro fluido se utiliza en la industria. Algunos ejemplos de esto son: los economizadores que se usan en calderas para pre-calentar los fluidos, mejorando el rendimiento térmico, y en el sector residencial se aprovecha el calor obtenido del sistema de enfriamiento de algunos sistemas fotovoltaicos para obtener agua caliente.

La obtención de electricidad mediante el aprovechamiento del calor residual puede ser por vía de trabajo mecánico o por conversión directa. Por vía de trabajo mecánico se produce mediante ciclos termodinámicos, principalmente el ciclo de Rankine, el cual mediante un intercambiador de calor se genera vapor de agua que luego hace mover unas turbinas que están conectadas a un generador. La conversión directa se basa en la utilización de dispositivos termoeléctricos (TEG), termoiónicos (TIC) y termo-fotovoltaicos (TPV).

La conversión térmica por vías mecánicas es la más conocida y es altamente

utilizada, por ejemplo, las centrales nucleares, los sistemas de ciclos combinados, los sistemas de tratamientos de residuos que necesitan ser incinerados (figura 1.3), entre otros. También se puede aprovechar el calor residual de la generación eléctrica, como es el caso de los cogeneradores.

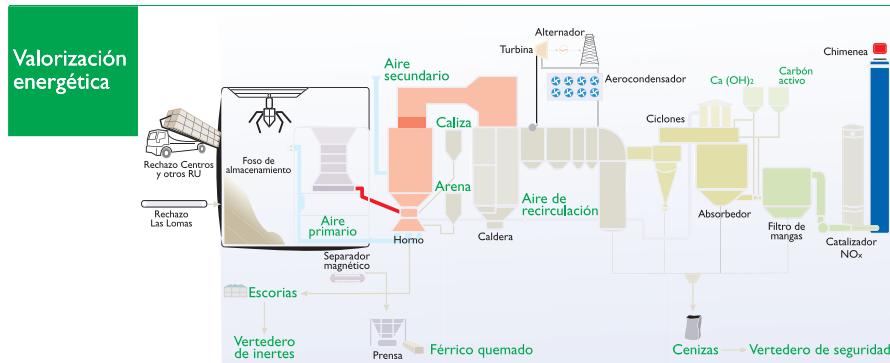


Figura 1.3: Planta de valorización energética del Centro Las Lomas del Parque Tecnológico de Valdemingómez, donde se aprovecha los gases a alta temperatura para producir vapor de agua en la caldera para mover unas turbinas conectadas a generadores para producir electricidad. *Fuente: Ayuntamiento de Madrid*

Las principales desventajas que presentan estos sistemas son: el uso de partes móviles que tienen que estar en constante mantenimiento por desgaste, el uso de fluidos que complica el control del sistema y que suelen requerir un tamaño mínimo a partir del cual pasan a ser rentables, con lo cual se reduce el número de aplicaciones donde pueden ser utilizados. Sin embargo, los dispositivos de estado sólido (TEG, TIC y TPV) son escalables, pudiendo encontrar más aplicaciones donde ser utilizados (a nivel residencial, en aplicaciones espaciales, automoción, etc.).

Los TEG son dispositivos que convierten la energía térmica en electricidad y viceversa, que están compuestos por dos materiales con coeficientes Seebeck opuestos unidos en sus extremos [3]. Al aplicarse una diferencia de temperatura entre ambas uniones se genera una diferencia de potencial, conocido esto como efecto Seebeck. Los materiales que se utilizan para estos dispositivos tienen unas conductividades térmicas bajas, para disminuir las pérdidas por conducción de calor. Para aumentar la potencia de los TEG se aumenta la diferencia de los coeficientes Seebeck porque cuanto mayor sea esta diferencia, mayor será la tensión y la potencia de salida, como se pueden observar en las ecuaciones de [3].

La eficiencia de los TEG es alrededor del 5% [4], aunque hasta el momento la eficiencia ha llegado a un máximo de aproximadamente un 15% [5], lo cual sigue siendo demasiado baja. Aún con bajas eficiencias los TEG se utilizan para aplicaciones espaciales, recuperación de calor en el transporte, entre otros.

Otro sistema de obtención de electricidad de una fuente de calor es la generación termoiónica, que mediante la emisión termoiónica se produce un flujo de electrones entre el emisor metálico a alta temperatura y un receptor a menor temperatura, separados por el vacío. Al aumentar la temperatura del emisor, los electrones libres se excitan hasta tal punto que la energía es lo suficientemente grande como para

que se desprendan del material, la densidad de corriente está determinada por la ley de Richardson, donde  $J = A \cdot T^2 \cdot e^{-\frac{W}{k \cdot T}}$ , siendo  $J$  la densidad de corriente,  $A$  la constante de Richardson,  $W$  la función de trabajo del metal,  $k$  la constante de Boltzman y  $T$  la temperatura en Kelvin.

Un generador que se puede combinar con el TIC, es un generador TPV que transforman en electricidad la radiación electromagnética producida por el emisor a alta temperatura para ser capturada por el receptor, que es una célula fotovoltaica (PV). Los emisores de las TPV no tienen que estar a unas temperaturas tan altas como los TIC, ya que no necesita que se desprendan los electrones. Ambos dispositivos presentan el mismo problema de pérdidas de electrones o fotones por los bordes del convertidor y para disminuir esto se disminuye la separación entre el emisor y el receptor. Cuando las distancias se vuelven nanométricas aumenta la transferencias de fotones por la transferencia de radiación evanescente y/o electrones por la eliminación del efecto de carga de espacio, generando una mayor potencia eléctrica porque la potencia radiada aumenta con respecto a la proporcionada por la ley de Planck, conocido como “efecto de campo cercano”.

La eficiencia de las células TPV han aumentado con el tiempo hasta llegar aproximadamente a un 40 % con una célula de dos uniones con materiales de ancho de banda (BG) entre 1 y 1.4 eV, utilizando un reflector trasero que devuelve la radiación de menor energía al BG directa al emisor, pero solo llegando a obtener una densidad de potencia de  $2.39 \text{ W cm}^{-2}$  [6]. Se pueden obtener potencias eléctricas mayores mediante el uso del efecto de campo cercano.

Los dispositivos que aprovechan los efectos de campo cercano presentan la dificultad de mantener de manera constante las distancias de separación nanométricas a lo largo de grandes superficies (relativo a la distancia de separación). Los dispositivos de campo cercano estudiados hasta la fecha presentan áreas muy pequeñas  $< 0.3 \text{ mm}^2$  [7]. Para poder fabricar dispositivos TPV que aprovechan los efectos de campo cercano con un área considerable de  $\sim 1 \text{ cm}^2$ , se requiere el uso nano-espaciadores. Por ejemplo, en [8] usan espaciadores de dióxido de silicio ( $SiO_2$ ) y se observó que al disminuir la distancia de separación la corriente de cortocircuito aumenta.

## 1.2. Objetivos

El objetivo de este estudio es diseñar y simular pilares de dimensiones nanométricas para el aprovechamiento del efecto de campo cercano en un convertidor TPV, así como determinar la viabilidad de este sistema.

- Modelar un nano-espaciador dentro de los rangos permitidos de los parámetros de los programas de simulación y modelado 3D.
- Ensamblar los sistemas TPV para diferentes alturas del nano-espaciador para las simulaciones.
- Simular la transferencia de calor por conducción a través de un nano-espaciador de  $SiO_2$  de un sistema TPV para diferentes alturas del nano-espaciador, dife-

rentes materiales de emisor y diferentes resistencias de contacto entre emisor y el nano-espaciador.

- Simular la transferencia de calor radiada entre el emisor y la célula para diferentes materiales del emisor y para varias distancias de separación, teniendo en cuenta los efectos de campo cercano en la radiación.
- Determinar entre los casos estudiados cuales pueden dar lugar a sistemas de TPV de campo cercano viables.

### 1.3. Estructura del documento

A continuación y para facilitar la lectura del documento, se detalla el contenido de cada capítulo.

- En el **capítulo 1** se realiza una introducción del trabajo con la respectiva motivación y objetivos.
- En el **capítulo 2** se desarrolla el estado de arte, definiendo los apartados más importantes y resaltando las investigaciones con mayor relevancia.
- En el **capítulo 3** se exponen las herramientas y materiales utilizados, así como los criterios de selección.
- En el **capítulo 4** se mencionan los métodos seguidos y los cálculos realizados para el desarrollo del trabajo.
- En el **capítulo 5** se exponen los resultados obtenidos de las simulaciones.
- En el **capítulo 6** se desarrolla la conclusión y se realiza planteamientos para futuros trabajos.



# Capítulo 2

## Estado del arte

En este capítulo se exponen los principales temas de interés para la realización de este trabajo, las investigaciones realizadas sobre la TPV y NF-TPV (termofotovoltaica de campo cercano) y el marco teórico sobre las diferentes maneras que se transmite el calor.

### 2.1. Termo-fotovoltaica

Un generador termo-fotovoltaico(TPV) se basa en la conversión de energía calorífica en energía eléctrica mediante el efecto fotovoltaico a través una célula termofotovoltaica sin requerir ninguna parte móvil, conocido este tipo de sistemas de generación como motores pasivos de calor, como se representa de una manera sencilla en la figura 2.1.

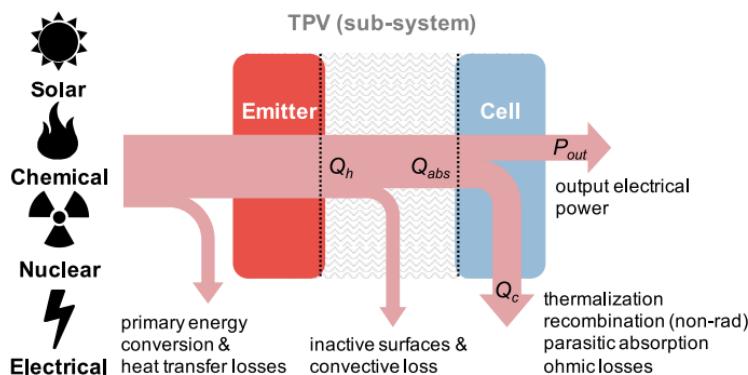


Figura 2.1: Flujo de conversión de la energía térmica en energía eléctrica. *Figura obtenida de la referencia [9]*

El emisor se encuentra a una alta temperatura lo cual produce que se transmite el calor en forma de radiación, que al llegar a la célula es reflejada, transmitida o absorbida. La porción de radiación absorbida excita a los electrones produciendo un par electrón-hueco si solo la energía del fotón absorbido es mayor que la energía del ancho de banda ( $E_g$ ) de la célula. Al conectar los terminales de la célula a una carga se produce una corriente que alimenta a la carga proporcional a la intensidad lumínica, aquellos fotones con energía menor a la  $E_g$  son suprimidos o reflejados para disminuir el flujo de calor [9].

La termofotovoltaica ha sido un campo de interés para aplicaciones militares, espaciales, generación de electricidad y recuperación de calor residual. Para la milicia de los Estados Unidos de América se han conducido varias investigaciones para la búsqueda de un generador eléctrico silencioso y portátil [10], cumpliéndose en 2004 40 años de investigación sin conseguirse potencias por encima de 500W [11]. En aplicaciones espaciales es de interés por presentar beneficios en rendimiento para misiones cercanas al Sol y misiones en el espacio profundo porque los componentes más sensibles se encuentran resguardados de la dura radiación, siendo posible también el guardar energía en gravedad cero [12]. Para la recuperación de calor residual existe un gran interés porque la conversión de energía térmica a eléctrica es menor del 40 % en las plantas de generación de energía de combustibles fósiles convencionales, produciéndose una gran cantidad de pérdidas en forma de calor [13].

Todas estas áreas de interés han provocado un aumento de las investigaciones en los sistemas TPV. Por ejemplo, la aplicación de capas finas en el emisor para aumentar la potencia radiada [14], la aplicación de filtros para la disminución de la cantidad de radiación no útil que llega a la célula [15], la aplicación de capas traseras reflectantes (BSR) para la recuperación de fotones [16], la combinación con un TIC para aumentar la densidad de potencia y la eficiencia total del sistema generador [16,17], y la disminución del espacio entre emisor y célula para aprovechar los efectos de la radiación de campo cercano [16, 18, 19].

Las investigaciones no se han limitado a estudiar células TPV de una o varias uniones p-n, sino también la utilización de células TPV interbandas en cascada (ICTPV) de BG comprendidas entre 0.2 y 0.5 eV que resulta en una eficiente colección de portadores foto-generados, donde la eficiencia máxima ( $\eta_{max}$ ) y la tensión de circuito abierto ( $V_{OC}$ ) es proporcional a el número de bandas hasta unos 0.691 V de  $V_{OC}$  y uno 6.2 %  $\eta_{max}$  [20].

Aún quedan por estudiar muchos materiales y disposiciones del emisor y de la célula, algo de alta importancia es el estudio de filtros y BSR porque aumentan la eficiencia y evitan que se acabe calentando innecesariamente la célula. Las BSR, principalmente hechas de oro, reducen las pérdidas por absorción de la radiación de energía menor a la BG porque reflejan la radiación que penetra la célula y la devuelve al emisor [21].

Habitualmente estas capas reflectantes se usan en las TPV y TIC, como por ejemplo se usan en [16, 18, 22]. Los filtros se utilizan para evitar la transmisión de radiación no deseada a la célula, consiguiéndose un aumento de la eficiencia del 45 % al 75 %. Los filtros pueden ser de una o múltiples capas, siendo afectada la eficiencia del conjunto según la rugosidad de las interfaces entre cada uno, obteniéndose mejores eficiencias al utilizar una menor cantidad de capas [15].

La razón por la cual se combinan los TIC y las TPV es para aprovechar tanto los electrones como los fotones radiados, aumentando la densidad de potencia de salida y mejorando el rendimiento de una TPV. Si se disminuye la separación entre el emisor común y la célula por debajo de la micra se pasa a tener efectos de

campo cercano, aumentando la potencia producida. En [16] se realiza un estudio teórico de una TPV de campo cercano mejorado con termoiónico (nTiPV) con un emisor de grafito 1000 K y una célula PV de *InAs*, que mejora el rendimiento y la densidad de potencia de una nTPV (TPV que aprovecha el efecto de campo cercano) de un  $\sim 7\%$  de eficiencia y un  $\sim 1W/cm^{-2}$  de densidad de potencia a eficiencias superiores del 15 % y densidad de potencia superiores a  $10Wm^{-2}$  (figura 2.2), por el uso de una célula sin mallado, disminuyendo la resistencia en serie y las pérdidas por sombras, utilizando un BSR para reflectar los fotones de baja energía.

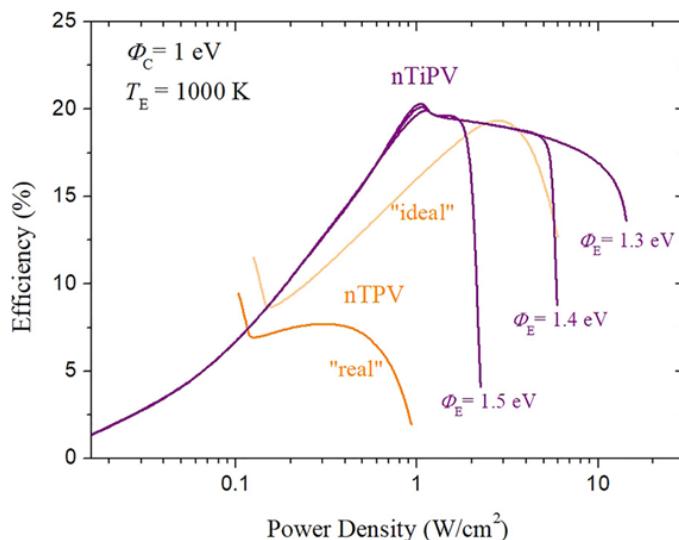


Figura 2.2: Relación entre densidad de potencia y eficiencia entre dispositivos nTPVs y nTiPVs.  
Figura obtenida de la referencia [16]

Los dispositivos TPV que aprovechan el efecto de campo cercano se denominan como dispositivos NFTPV, NF-TPV o nTPV, los cuales son capaces de generar mayores potencias de salida que las TPV por tener una mayor potencia de calor transmitida por radiación. Siendo un objetivo importante el aumento de la eficiencia, para así igualar a la actual de un 40 % [22]. En [18] se modeló la eficiencia de un NF-TPV basado en una célula de *InAs* a 300 K con emisor a 700 K y una distancia de separación de 200 nm, alcanzándose unas eficiencias del 17 % y notándose que a menores temperaturas y mayores distancias se obtiene una menor potencia de salida.

En [23] se evaluó teóricamente diferentes combinaciones de cerámicas para el emisor de una nTPV a  $2000^{\circ}\text{C}$  y célula a  $400^{\circ}\text{C}$ , observando los flujos espectrales de calor, la potencia total y el rendimiento, siendo la máxima potencia por metro cuadrado para el emisor de  $B_4C$  con unos  $7,45 \cdot 10^4 Wm^{-2}$  pero solo con una eficiencia del 11.74 %, a diferencia del BeO con una potencia de  $3,19 \cdot 10^4 Wm^{-2}$  y un rendimiento del 24.69 %. Y se observa como el rendimiento disminuye al disminuir la separación entre emisor y célula para luego volver a aumentar.

Dado que los costes de fabricación para el testeo pueden llegar a ser caros, se utilizan modelos matemáticos para simular, siendo uno muy útil el presentado en [24] que proporciona varias ecuaciones para calcular la potencia radiada para varios grosorres de emisor y receptor de una sola capa cada uno, siendo el de mayor

utilidad el de capa gruesa que proporciona de una manera sencilla el cálculo de la potencia en un rango de longitudes de onda conociendo la permitividad eléctrica compleja de los materiales.

Una ventaja que presenta los NF-TPV es el aumento de la potencia radiada para todas las longitudes de onda. Además, dependiendo de la combinación de los materiales utilizados, pueden aparecer frecuencias de resonancia ( $\omega_{res}$ ) que producen un aumento significativo del flujo radiado a dicha frecuencia, pudiéndose aumentar la eficiencia de la NF-TPV si se consigue que la  $\omega_{res}$  coincida con la BG del semiconductor. Un ejemplo de esto se da en [14], donde simulan un sistema nTPV utilizando una lámina fina de carburo de silicio ( $SiC$ ) y otra gruesa, obteniendo que al aumentar el grosor de la capa disminuye la potencia en la  $\omega_{res}$  pero aumenta para el resto de frecuencias, siendo a partir de los 100 nm de grosor la misma potencia radiativa que la lámina gruesa.

Para mantener las distancias de separación tan cortas en una nTPV es necesario un mecanismo, siendo lo más sencillo el uso de pilares de algún material cerámico, por sus propiedades térmicas. Un ejemplo de esto se presenta en [25], donde se estudia la transferencia de calor entre dos placas de Si separadas 200 nm por vacío y utilizando espaciadores de  $SiO_2$  de 1  $\mu m$  de diámetro para mantener la distancia de separación. Obteniéndose que el coeficiente de transferencia de calor por radiación ( $h_{rad}$ ) aumenta con la disminución de la separación entre emisor y célula, y la potencia radiada aumenta con la variación de la temperatura.

También hay que tomar en cuenta que el coeficiente de transferencia de calor por conducción efectivo que se obtiene cuando se utilizan nano-espaciadores, depende principalmente de la resistencia térmica de contacto que se establezcan entre cada interfaz. En [19] se estudia la radiación por campo cercano entre dos placas de cuarzo con pilares piramidales truncados de  $SiO_2$  que están depositados sobre el substrato inferior, descubriendo que la resistencia de contacto ( $R_c$ ) es mucho mayor que la geométrica del pilar. Por lo tanto, la  $R_c$  es de gran importancia para disminuir las pérdidas por conducción y así aumentar la eficiencia del sistema.

## 2.2. Transmisión de calor

Para una nTPV el calor se propaga del emisor a la célula de tres formas distintas, por convección a través de un fluido, por radiación y por conducción a través de los nano-espaciadores.

### 2.2.1. Convección

La transmisión de calor por convección se produce por la conducción de la energía cuando el fluido entra en contacto con el sólido y luego el transporte de la energía mediante el movimiento del fluido, pudiendo ser natural o forzada. La diferencia entre la convección natural y la forzada es la fuente de movimiento del fluido, en la convección forzada el movimiento del fluido es producido por una fuente externa, como un ventilador o una bomba, en la convección natural el fluido se mueve por las diferencias en densidades por la variación de la temperatura de

partes del fluido.

No se detalla más sobre este fenómeno de transporte de calor porque no se va a tener en cuenta a lo largo de este trabajo. Ya que supondremos que el sistema a estudiar se encuentra en una cámara al vacío donde hay ausencia de fluido, en este caso, aire.

### 2.2.2. Conducción

La transmisión de calor por conducción se dá a través de uno o varios cuerpos, producido por la diferencia de temperatura entre las caras opuestas del conjunto o cuando dos o más objetos a diferentes temperaturas entran en contacto. De manera genérica la conducción térmica se modela como  $P_{cond} = \Delta T/R$ , siendo  $R$  la resistencia térmica del sistema. Para un solo material, la resistencia térmica se modela como  $R = l/(A \cdot h)$ , donde  $l$  es la longitud del material,  $A$  es la superficie y  $h$  es la conductividad térmica del material. Para varios materiales colocados en serie, es decir, el flujo de calor que los atraviesa es el mismo para todos, la resistencia de conducción se define como la sumatoria de todas las resistencias de cada material ( $R = \sum R_i$ ).

La superficie de contacto entre cada material se le conoce como interfaz, la cual en la realidad no es perfecta y provoca una caída de temperatura la cual se modela como una resistencia térmica llamada resistencia de contacto ( $R_c$ ). La resistencia de contacto depende de muchos parámetros como la rugosidad de cada superficie, la presión, la temperatura, las conductividades térmicas de los materiales involucrados, los tipos de materiales, entre otros, esto provoca que sea muy difícil de obtener un modelo de la misma para una simulación.

En [26] se comparan la diferencia entre un modelo teórico y los resultados experimentales de la conductancia térmica de contacto respecto a la presión entre dos placas gruesas de varios materiales. Observándose que para dos aceros inoxidables 304 esta diferencia disminuye con el aumento de la presión, siendo la diferencia entre el modelo analítico y los resultados experimentales significativamente menor a partir de los 1 GPa de presión.

### 2.2.3. Radiación

La radiación es la transmisión de energía térmica en forma de ondas electromagnéticas o fotones a través del vacío o un medio material proporcional a la temperatura del cuerpo del emisor. Cuando las ondas electromagnéticas inciden sobre la superficie de un material parte de ella es absorbida, otra parte reflejada y el resto se transmite internamente en el material, variando las proporciones de dichas cantidades según el material y la longitud de onda de la radiación. Existe dos flujos de radiación conocidos, el flujo de propagación o campo lejano y el flujo evanescente o campo cercano que excede los valores predichos por la Ley de Planck del cuerpo negro.

### Radiación propagación o campo lejano

La radiación de campo lejano cumple la ley de Planck sobre la emitancia monocromática de un cuerpo negro ( $E_{\lambda}^{bb}(T)$ ) (ecuación 2.1), cuya integral cumple con la Ley de Stefan Boltzmann (ecuación 2.2) y el valor máximo cumple con la Ley de Wien,  $\lambda_{max} \cdot T = 2,896 \cdot 10^3 \mu m \cdot K$ , donde la temperatura (T) está en grados Kelvin,  $c_1$  es  $3,743 \cdot 10^8 \frac{W \mu m^4}{m^2}$  y  $c_2$  es  $1,4387 \cdot 10^4 \mu m K$ .

$$E_{\lambda}^{bb}(T) = \frac{c_1 \cdot \lambda^{-5}}{e^{\frac{c_2}{\lambda \cdot T}} - 1} \quad (2.1)$$

$$E^{bb}(T) = \sigma \cdot T^4 \iff \sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4} \quad (2.2)$$

Pero las ecuaciones anteriores solo aplica para la radiación total emitida pero no la transferida entre dos superficies, siendo el caso más sencillo el de dos superficies planas, paralelas entre sí y de área infinita o mucho mayor que la distancia que las separa, donde la transferencia de calor entre ambas superficies consideradas como cuerpos grises se puede modelar como:

$$\frac{\Phi}{S} = \frac{\sigma (T_1^4 - T_2^4)}{1/\epsilon_1 + 1/\epsilon_2 - 1} \quad (2.3)$$

Donde  $\epsilon_i$  es la emisividad monocromática, es decir, el cociente de la emisividad del cuerpo respecto a la del cuerpo negro, cuyo valor es constante por ser considerados las superficies como cuerpos grises.

En este trabajo la radiación de propagación se resuelve de otra manera, que es el caso más sencillo de [24], donde el emisor y el receptor son cuerpos planos y gruesos (figura 2.3) y la ecuación que modela el flujo de calor por frecuencia de un emisor (nº1) a un receptor (nº3) separados por el vacío (nº2) es:

$$q_{w,abs}^{prop} = \frac{\Theta(\omega, T_1)}{4\pi^2} \times \int_0^{k_v} k_{\rho} dk_{\rho} \sum_{\gamma=TE,TM} \frac{(1 - |r_{21}^{\gamma}|^2)(1 - |r_{23}^{\gamma}|^2)}{|1 - r_{21}^{\gamma} r_{23}^{\gamma} e^{2ik_{z2}d_c}|^2} \quad (2.4)$$

Donde  $\Theta(\omega, T_i)$  es la energía media de un oscilador de Planck para una frecuencia y temperatura dada,  $r_{i,j}^{\gamma}$  es el coeficiente de reflexión de Fresnel de la interfaz entre el cuerpo i y el cuerpo j en estado polarizado  $\gamma$ , TE son las ondas eléctricas transversales y TM son las ondas magnéticas transversales, i es la constante compleja  $\sqrt{-1}$ ,  $d_c$  es la separación entre las capas y  $k_{\rho}$  es el vector de onda de la onda primaria [27].

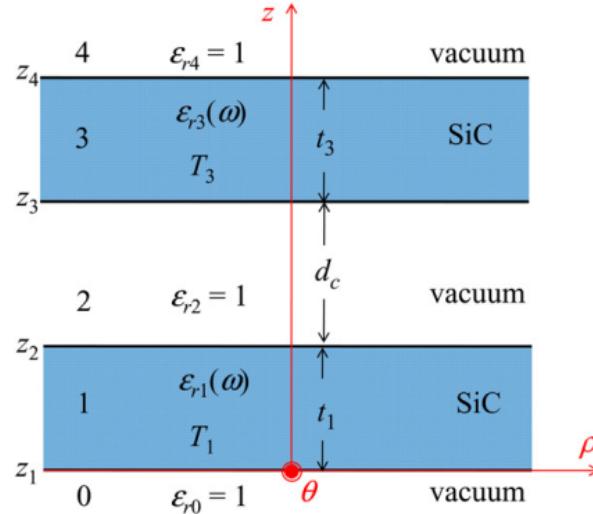


Figura 2.3: Esquemático de la representación geométrica para el flujo entre dos cuerpos separados por vacío. Fuente: [24]

La ecuación 2.4 es para dos placas gruesas separadas por un vacío y rodeadas por vacío, se obtiene de las ecuaciones presentadas en [27], donde se presenta las ecuaciones para la radiación de campo cercano de sistemas multicapa y un método numérico para solucionar las ecuaciones.

#### Radiación evanescente o campo cercano

La radiación evanescente a diferencia de la radiación de propagación, solo se transmite a distancias muy pequeñas porque decae exponencialmente con el aumento de la distancia de separación entre la fuente y el receptor. Esta potencia radiada puede llegar a superar a la potencia de un cuerpo negro por la ley de Planck.

Un modelo analítico es obtenido en [27] para un sistema unidimensional de varias capas de diferentes grosos, temperaturas y materiales. Y también se introduce un algoritmo genérico para la implementación de las ecuaciones para simular.

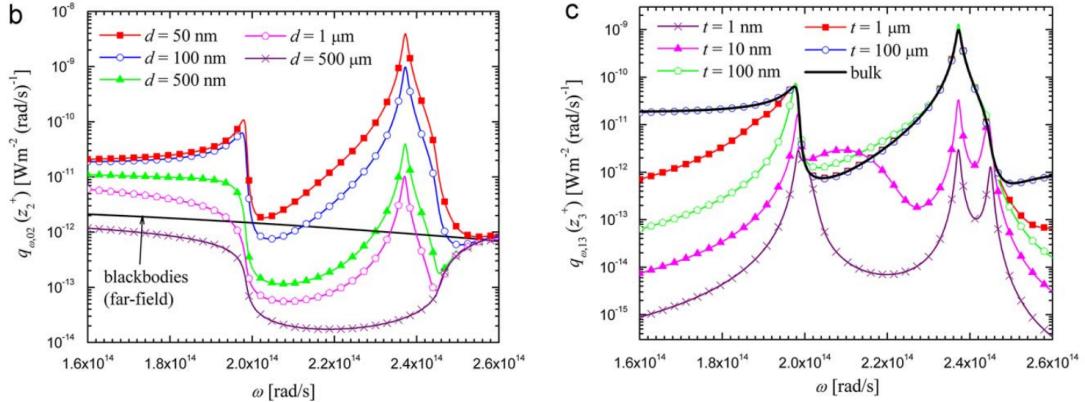
En este trabajo se estudia un caso más sencillo, donde solo son dos capas gruesas separadas por vacío una distancia  $d_c$  [24], cuya ecuación que modela la potencia radiada por frecuencia de un emisor ( $n^o 1$ ) a un receptor ( $n^o 3$ ) separados por el vacío ( $n^o 2$ ) es:

$$q_{\omega,abs}^{evan} = \frac{\Theta(\omega, T_1)}{\pi^2} \times \int_{k_v}^{\infty} k_\rho dk_\rho e^{-2k''_{z2}d_c} \sum_{\gamma=TE,TM} \frac{Im(r_{21}^\gamma) Im(r_{23}^\gamma)}{|1 - r_{21}^\gamma r_{23}^\gamma e^{2ik_{z2}d_c}|^2} \quad (2.5)$$

Siendo  $Im(r_{i,j}^\gamma)$  el término imaginario del coeficiente Fresnel de la interfaz entre el cuerpo  $i$  y el cuerpo  $j$  en estado polarizado  $\gamma$ . La componente  $e^{-2k''_{z2}d_c}$  representa de manera explícita la caída exponencial del flujo con la distancia de separación.

Una mejor representación del efecto de la radiación evanescente se puede observar en la figura 2.4a, donde a partir de cierta distancia de separación se supera

el flujo de un cuerpo negro. Y se observa en la figura 2.4b como a partir de las  $100 \mu\text{m}$  de grosor del emisor se puede considerar como una placa gruesa [27].



(a) Flujo de radiación monocromática variando la distancia de separación d  
(b) Flujo de radiación monocromática variando el grosor (t) del emisor

Figura 2.4: (a) Flujo de la radiación monocromática entre dos capas gruesas de cBN a 300 K y 0 K separadas por vacío a una distancia  $d$ , y comparados con las predicciones de dos cuerpos negros en el régimen del campo lejano. (b) Flujo de la radiación monocromática entre un emisor de grosor ( $t$ ) variable a 300 K y un receptor grueso a 0 K, ambos de cBN y separados por una distancia de 100 nm en el vacío. Ambas figuras han sido obtenidas de la referencia [27]

También se puede observar en las figuras 2.4 a y b el efecto de la  $\omega_{res}$  sobre la radiación espectral, aumentando considerablemente la potencia radiada a dicha frecuencia de  $\sim 2,373 \cdot 10^{14} \text{ rad/s}$ . Se puede observar como al disminuir el grosor del emisor se obtienen dos picos en vez de uno, pudiéndose considerarse casi monocromática alrededor de la  $\omega_{res}$ .

## Capítulo 3

# Materiales y Herramientas

En este capítulo se exponen los materiales utilizados para cada componente del sistema, las herramientas utilizadas para el modelado 3D del nano-espaciador, simulación de la transmisión de calor por conducción y simulación de transmisión de calor por radiación por campo cercano, y los motivos de uso de dichos materiales y herramientas.

### 3.1. Materiales

Para una nTPV es imprescindible una selección adecuada de los materiales de cada componente, para así conseguir la mayor cantidad de eficiencia y potencia eléctrica. A continuación se listan y desarrollan los materiales de cada uno de los componentes de la nTPV utilizados en este trabajo, y los criterios seguidos para la elección de cada uno. Siendo estos componentes que integran la nTPV un emisor, una célula TPV y los nano-espaciadores.

#### 3.1.1. Nano-espaciadores

Los nano-espaciadores tienen que tener una resistencia térmica de conducción alta, para poder disminuir las pérdidas por conducción. También tienen que ser resistentes a la compresión que se ven sometidos por el peso de los componentes y la expansión térmica. Por último, tienen que permitir el paso de la luz con energía mayor a la BG de la célula a utilizar, para así aumentar el flujo de radiación útil a la célula.

Para este trabajo suponemos que los nano-espaciadores son de dióxido de silicio ( $SiO_2$ ) [28], un material que ha sido utilizado en varias ocasiones en sistemas de campo cercano de TPV o TIC por ser un material cerámico con una baja conductividad térmica y alta resistencia a la fuerza de compresión. La conductividad térmica es menor a 10 W/m°C en el rango de temperatura de trabajo, entre 25 a 800°C.

#### 3.1.2. Célula fotovoltaica

Las células para una TPV tienen que poder absorber la mayor cantidad de radiación infrarroja, por ser donde se encuentra la mayor cantidad de potencia de

radiación de estos sistemas con emisores a altas temperaturas.

Para este trabajo suponemos inicialmente que las células son de silicio (*Si*) para llevar a cabo unos cálculos preliminares, se utiliza *Si* por ser un material ampliamente conocido y utilizado en la fabricación de células fotovoltaicas. En el resto de simulaciones se utiliza germanio (*Ge*), que es capaz de absorber una mayor cantidad de radiación por tener una BG de 0.66eV a 300K, a diferencia del *Si* que es unos 1.11 eV a 300 K. El tener una menor BG es importante en la TPV porque permite absorber parte de la radiación infrarroja.

Otro motivo por el cual se utiliza el *Ge* es porque es el material de las células TPV a disposición en el Instituto de Energía Solar (IES), que es el centro de investigación donde se desarrolla este TFG.

### 3.1.3. Emisor TPV

El material del emisor está limitado principalmente al campo de aplicación de la TPV y a la potencia de radiación en el rangopectral útil. Para este trabajo se consideran varios materiales según sus potencias de radiación en el rangopectral de energía mayor a 0.7 eV para unas distancias de separación de 100 nm y 1000 nm, como se puede observar en la figura 3.1.

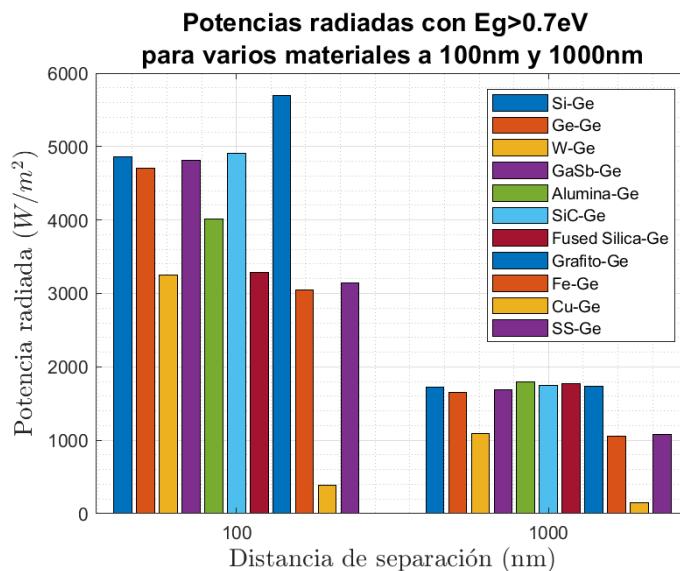


Figura 3.1: Potencias por unidad de área para una célula de Ge y diferentes materiales de emisor para un rango de longitudes de onda desde aproximadamente  $0.2 \mu m$  hasta  $1.8 \mu m$  (0.7 eV) con distancias de separación de 100nm y 1000nm según las ecuaciones de [24] calculadas a partir de las ecuaciones (2.4) y (2.5).

Entre todos los materiales de emisor que se pueden observar en la figura 3.1, se seleccionan para este trabajo se seleccionan los siguientes tres materiales:

- ***Si***: es un material que es abundante y que se encuentra entre los materiales de emisor con mayor potencia de radiación. Se utilizará para realizar las pruebas de simulación iniciales, para así tener un punto de partida.

- **Acero inoxidable 304 (SS)**: aunque no genere mucha potencia de radiación, es un material muy utilizado en la industria, incluyendo al transporte. Siendo de gran interés para sistemas de recuperación de calor que utilizan TPV.
- ***SiC***: presenta una potencia radiada similar a la del *Si*, pero tiene un punto de fusión mayor que el del *Si*. Se utiliza principalmente porque presenta mayores potencias frente a la frecuencia cuando el receptor es de *SiC*, por el efecto de la  $\omega_{res}$ , como se observa en las simulaciones de [14].

A su vez se analizaron otros materiales adicionales que finalmente fueron descartados por ser muy caros, proporcionar una baja potencia radiada, etc. Algunos de estos materiales son los siguientes:

- **Antimonio de Galio (GaSb)**: es un semiconductor con punto de fusión de 710°C, que es menor a los 800°C que se encuentra el emisor, por lo cual no se puede utilizar porque empezará a pasar a estado líquido antes de llegar a la temperatura deseada.
- **Grafito**: es un material relativamente barato con un alto punto de fusión y una alta potencia de radiación, como se puede observar en la figura 3.1, pero presenta el problema que es muy blando respecto al *SiO<sub>2</sub>*, teniendo como dureza máxima unos 50 HV (dureza Vickers) en comparación a los 500 HV del *SiO<sub>2</sub>*. Por lo tanto, cuando se aplique presión a los dispositivos, el nano-espaciador penetrarán el emisor, produciendo que disminuya la distancia de separación y aumente la posibilidad de contacto entre el emisor y la célula.
- **Tungsteno (W)**: es un material con coste medio, siendo como máximo unos 56.4€/kg. Su dureza Vickers es de unos 350 HV que es adecuada por no ser tan inferior a la del *SiO<sub>2</sub>*, su conductividad térmica es más alta que la del nano-espaciador, pero la potencia radiativa en campo cercano es baja, más cercana a la del acero.
- **Alumina (*Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*)**: es un material que presenta la sexta potencia radiada más grande para 100 nm de separación, pero presenta el inconveniente de que es muy caro, aproximadamente 16000€/kg o más, disminuyendo considerablemente la viabilidad del sistema.

## 3.2. Herramientas

Las herramientas o programas utilizados durante el desarrollo del trabajo son variados y por diferentes motivos, a continuación se da una breve descripción y se explican los motivos de la utilización de cada programa.

Para la obtención de las propiedades ópticas y térmicas de los materiales se utilizan Granta EduPack 2021 R2<sup>1</sup>, la página web Refractive Index<sup>2</sup> y el resto de datos de los materiales que no se encuentren en dichas herramientas se obtienen de artículos de investigación. Para el modelado 3D se utiliza Autodesk Inventor 2021<sup>3</sup>, para las simulaciones de la transmisión de calor por conducción se utiliza Autodesk

<sup>1</sup><https://www.ansys.com/products/materials/granta-edupack>

<sup>2</sup><https://refractiveindex.info/>

<sup>3</sup><https://www.autodesk.es/products/inventor/overview?term=1-YEAR&tab=subscription>

CFD 2021<sup>4</sup>, para la transmisión de calor por radiación se utiliza un script de Matlab que resuelve las ecuaciones (2.4) y (2.5) a partir de las propiedades ópticas ( $n$ - $k$  datos) de los materiales implementado en la calculadora de campo cercano, y para el análisis de datos se utiliza MATLAB<sup>5</sup>.

Unas herramientas a destacar son TexStudio y TexnicCenter utilizadas para la redacción de este trabajo por la facilidad que presenta el escribir ecuaciones, actualizaciones de figuras y la menor necesidad de recursos que Word. También hay que destacar el uso de Git para el control de versiones del documento.

### 3.2.1. Granta EduPack 2021 R2

Programa desarrollado por la empresa Ansys que contiene varias bases de datos que recopila información sobre distintos materiales, teniendo un fácil acceso a la información básica de los mismos a través de una interfaz gráfica (GUI) y estando organizadas de manera específica para cada base de datos. Este programa está disponible en la versión de Windows 10 del escritorio remoto de la UPM.

La base de datos utilizada es la *Level 3* de las avanzadas porque recopila los datos de todos los materiales necesarios. En la mayoría de los casos incluye la variación de algunas propiedades respecto a la temperatura, siendo principalmente necesaria la conductividad térmica del material respecto a la temperatura.

Dado la gran cantidad de datos a disposición y la facilidad de obtención de los datos de los materiales, especialmente los datos que están disponibles con la variación de la temperatura, se utiliza este programa.

### 3.2.2. Refractive Index

En esta página web están recopilados de artículos científicos los índices de refracción ( $n$ ) y coeficientes de extinción ( $k$ ) de diferentes materiales en diferentes rangos de longitudes de onda, teniendo a disposición hipervínculos a los artículos de donde se extrajo los datos y la opción de descargar dichos datos.

### 3.2.3. Autodesk Inventor Professional 2021

Es un software de Diseño 3D Asistido por Ordenador (CAD 3D) que ofrece herramientas para el diseño de piezas, ensamblajes, mecanismos, documentación y simulación de los sistemas. También permite el utilizar herramientas de entorno añadidas para simulaciones más complejas, el fácil acoplamiento para el uso de otros programas de Autodesk y el uso de parámetros en el diseño y modelado de las piezas. Se utiliza el programa para el modelado 3D de los nano-espaciadores, el emisor, la célula y el sistema TPV completo. Los motivos de utilización del programa son:

---

<sup>4</sup><https://www.autodesk.com/products/cfd/overview>

<sup>5</sup><https://matlab.mathworks.com/>

- Licencia estudiantil facilitada por la Universidad Politécnica de Madrid (UPM).
- Menor consumo de recursos que otros programas de modelado 3D.
- No necesita una conexión constante a internet para su uso.
- Acoplamiento con Autodesk CFD, permitiendo el lanzar modelos de Inventor a CFD.

Una desventaja de este programa es la limitación que presenta en las unidades mínimas de trabajo (*mm*), no pudiendo realizar modelos en escala nanométrica por lo que se utilizan distancias geométricas mayores, teniendo que adaptar los valores de las propiedades térmicas de los materiales para tener ese cambio de escala en cuenta.

### 3.2.4. Autodesk CFD

Es un software desarrollado por Autodesk que se usa para crear simulaciones computacional de la dinámica de fluidos para la predicción del comportamiento complejo de fluidos (líquidos y gases), el programa también simula la transmisión de calor por conducción en sólidos, convección en fluidos y de radiación.

Se utiliza el programa para las simulaciones de transmisión de calor por conducción en vez de el entorno Nastran de Inventor por las siguientes razones:

- Utilización de escalas pequeñas de los parámetros de los materiales.
- Fácil control del mallado.
- Control de los pasos de la simulación, la frecuencia de guardado de datos y el número de iteraciones.
- Fácil obtención de los datos de los flujos de calor y las temperaturas del espacio en formato CSV.

### 3.2.5. MATLAB

MATLAB es un programa o plataforma de programación de *MathWorks* que permite desarrollar cálculos numéricos, desarrollar algoritmos, analizar datos y crear modelos matemáticos de sistemas para cálculo o simulaciones utilizando su propio lenguaje de programación. A su vez, MATLAB proporciona una tienda de paquetes donde los usuarios puede subir aplicaciones desarrolladas en MATLAB que permiten aprovechar aún más los recursos del sistema y facilitar el trabajo, ya sea analizar datos, obtener modelos matemáticos, entre otros.

Se utiliza MATLAB para el análisis de los resultados obtenidos de las simulaciones de transmisión de calor por conducción y radiación, para realizar gráficas, para realizar cálculos y para desarrollar la aplicación de la calculadora de campo cercano. El principal motivo de usar MATLAB es para calcular la transmisión de calor en condiciones de campo cercano.

### 3.2.6. Calculadora de campo cercano

Para las simulaciones de transmisión de calor por radiación de campo cercano entre dos placas paralelas de área infinita se utiliza un código escrito en MATLAB que ya estaba implementado y que cumple con las ecuaciones de campo cercano para dos placas planas gruesas (ecuaciones (2.4) y (2.5)). A partir de dicho código se desarrolla una aplicación en el App Designer de MATLAB que facilita el proceso, porque mejora la interfaz de usuario y disminuye los tiempos de simulación al realizar los cálculos con hilos (Parallel Processing Toolbox), permitiendo así realizar combinaciones de materiales y distancias de manera sencilla.

Los motivos que impulsaron el desarrollar de la aplicación son el simplificar el proceso de simular la radiación por campo cercano para diferentes combinaciones de materiales y distancia de separación, y la obtención de la potencia total para el rango de longitudes de onda deseadas para todas las combinaciones.

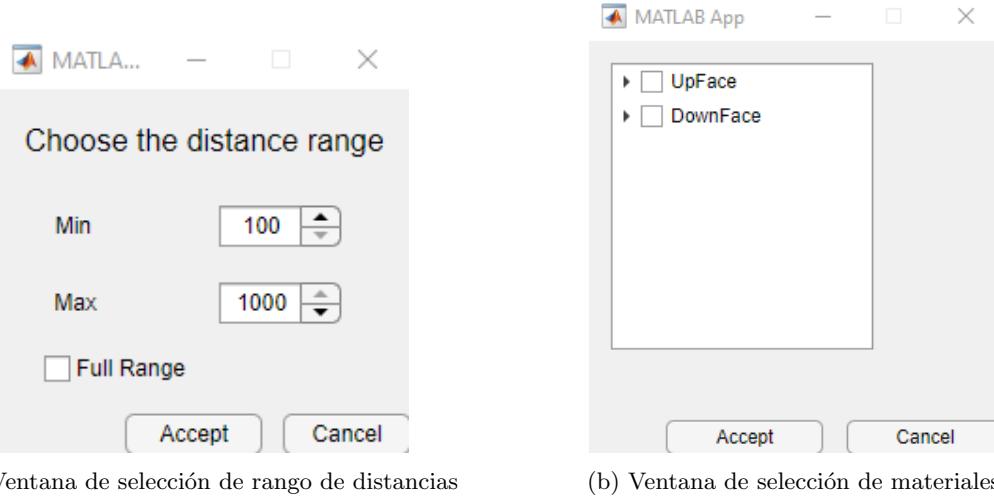
La aplicación se divide en tres pestañas *Potencia Radiada*, *Potencia* y *Materiales*. En cuanto se abre la aplicación se presenta abierta la pestaña de *Potencia Radiada* (figura 3.2), donde se seleccionan los materiales del emisor y el receptor, las distancias de separación de los cuerpos y la temperatura del emisor en grados Kelvin, ya que la del receptor es fija a 300K. También muestra la gráfica de los resultados obtenidos de la simulación para cualquier combinación excepto cuando se eligen varios materiales en un rango de distancias porque todavía no está implementado para este caso de dos rangos.



Figura 3.2: Pestaña *Potencia Radiada* de la calculadora de campo cercano

Para la selección del rango de los materiales se abre una nueva ventana de una GUI donde se utiliza dos árboles de casillas de selección para los materiales del emisor y el receptor del sistema de transmisión de calor por radiación de campo cercano (figura 3.3b). Para la selección del rango de distancias se abre una nueva ventana de una GUI donde se selecciona en múltiplos de 100 el valor máximo y el

valor mínimo del rango de distancias a simular, las distancias máxima y mínima son 1000nm y 100nm respectivamente (figura 3.3a). Antes de realizar los cálculos se realiza una interpolación lineal de los valores de  $n$  y  $k$  de los materiales para que coincidan los puntos para cada longitud de onda.



(a) Ventana de selección de rango de distancias

(b) Ventana de selección de materiales

Figura 3.3: (a) Ventana para la selección del rango de las distancias de separación entre el emisor y el receptor. (b) Ventana para la selección de los materiales para el emisor y el receptor.

La pestaña de *Potencia* (figura 3.4) contiene una calculadora para pasar de electrón-voltios a longitud de onda y viceversa, unos campos para controlar el rangopectral en longitudes de onda para realizar la integral de la potencia radiada y una gráfica para mostrar los resultados obtenidos de integrar. La integral se realiza por el método del trapezoide. Los resultados obtenidos de la potencia integrada (figura 3.4), los de la radiación espectral o ambos se pueden guardar en un archivo excel.

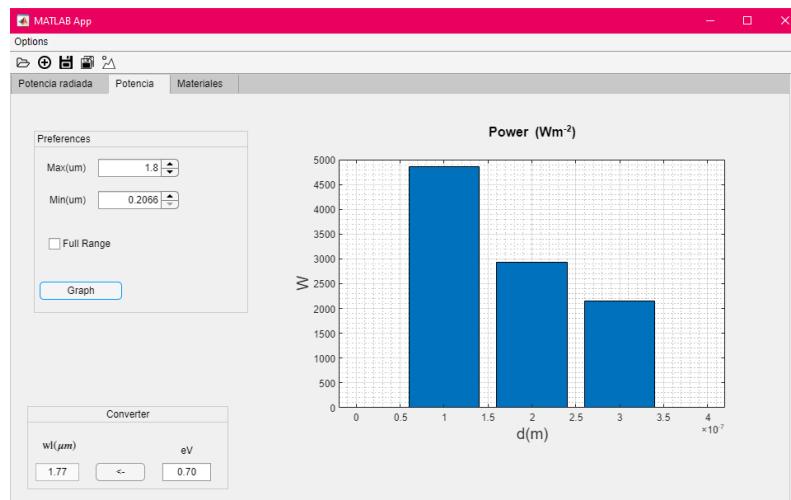


Figura 3.4: Pestaña de la Potencia

La pestaña de *Materiales* se usa para observar en una tabla o gráfica, según la pestaña interna seleccionada, los valores de  $n$  y  $k$  del material seleccionado en la

lista de la izquierda, como se puede observar en la figura 3.5.

WaveLength(um)	n	k
0.2100	1.1410	1.3050
0.2200	1.1250	1.3470
0.2300	1.1100	1.4080
0.2400	1.1040	1.4800
0.2500	1.1090	1.5530
0.2600	1.1170	1.6210
0.2700	1.1270	1.6900
0.2800	1.1340	1.7570
0.2900	1.1420	1.8290
0.3000	1.1550	1.9020
0.3100	1.1640	1.9760
0.3200	1.1790	2.0610
0.3300	1.2070	2.1410
0.3400	1.2340	2.2170
0.3500	1.2620	2.2950
0.3600	1.2960	2.3750
0.3700	1.3390	2.4540
0.3800	1.3900	2.5260
0.3900	1.4420	2.5880

Figura 3.5: Pestaña de los datos de n y k de los materiales disponibles

Para obtener una mejor fidelidad de los resultados de la simulaciones se limita el rango de los datos dentro de las longitudes de onda que comparten todos los materiales del conjunto que se va a simular.

# **Capítulo 4**

## **Métodos**

En este capítulo se detallan los criterios seguidos para la elección de la geometría de los espaciadores y su escala, los cálculos realizados para adaptar las propiedades de los materiales a las limitaciones de escala de los programas de simulación, los procedimientos seguidos para realizar las simulaciones y el procedimiento seguido para la extracción de los datos de la simulación de CFD.

### **4.1. Criterios de geometría y escala**

Los criterios de geometría y escala se basan principalmente en el proceso de fabricación de los nano-espaciadores por fotolitografía, que es la técnica que se utilizará en el desarrollo de los primeros experimentos que intentarán corroborar los resultados obtenidos en este trabajo de simulación, esto en una siguiente etapa de la investigación.

La base del nano-espaciador es cuadrada por ser la geometría más sencilla de fabricar mediante procesos fotolitográficos y para realizar cálculos, por ser sus ecuaciones de área y volumen las más sencilla de los polígonos regulares cerrados. El lado de la base del nano-espaciador son de  $3 \mu m$  por ser el límite de resolución de la mayoría de equipos de fotolitografía, es decir, es la mínima distancia que se puede definir mediante fotolitografía.

Se utiliza 100 nm como la distancia mínima para definir la altura mínima de los nano-espaciadores, correspondiente a 1 mm de la escala del modelo 3D en Inventor. Por lo tanto, el factor de escala que se aplica a las unidades de longitud es  $10^4$ , que se toma en cuenta a la hora de definir las propiedades térmicas que involucren unidades de longitud, como es la conductividad térmica ( $W/m^2$ ).

### **4.2. Cálculos de las propiedades de los materiales para las simulaciones**

Para obtener los nuevos parámetros de distancias, áreas y volúmenes del modelo 3D del nano-espaciador se procede a obtener las relaciones de escala entre el modelo y la realidad. También se obtienen las relaciones de las propiedades más significativas de los materiales de la realidad y las simulaciones de transmisión de

calor por conducción, siendo la principal propiedad la conductividad térmica. Otras propiedades que se toman en cuenta son la densidad y el calor específico, teniendo que destacar la resistencia de contacto por unidad de área entre el nano-espaciador y el emisor.

Para diferenciar las dimensiones reales de las dimensiones utilizadas en el modelo 3D se utilizará el apostrofe después de la variable correspondiente, por ejemplo, para la longitud real se usa  $L$  y para la longitud en el modelo 3D se usa  $L'$ .

La relación de longitudes entre el modelo 3D y la realidad es:

$$L'/L = 1\text{mm}/100\text{nm} = 10^4 \quad (4.1)$$

#### 4.2.1. Área

La sección de los nano-espaciadores es un cuadrado cuya fórmula de área es  $A = L^2$ , donde  $A$  es el área y  $L$  el lado del cuadrado, siendo la relación de las áreas la siguiente:

$$\frac{A'}{A} = \left(\frac{L'}{L}\right)^2 = 10^8 \quad (4.2)$$

#### 4.2.2. Volumen

El volumen de un prisma de base cuadrada se expresa como  $V = A \cdot L$ , donde  $L$  es la altura del prisma.

$$\frac{V'}{V} = \frac{A' \cdot L'}{A \cdot L} = \frac{A'}{A} \cdot \frac{L'}{L} \Rightarrow \frac{V'}{V} = 10^{12} \quad (4.3)$$

El volumen de cada nano-espaciador en el modelo será  $10^{12}$  veces el volumen original.

#### 4.2.3. Densidad

La masa de cada elemento es igual entre el modelo( $M'$ ) y la realidad( $M$ ), por lo tanto la densidad varía.

$$\frac{\rho'}{\rho} = \frac{M'/V'}{M/V} = \frac{M'}{M} \cdot \frac{V}{V'} \Rightarrow \frac{\rho'}{\rho} = 10^{-12} \quad (4.4)$$

La densidad de cada elemento en el modelo será  $10^{-12}$  veces la densidad de la realidad.

#### 4.2.4. Conductividad Térmica

La resistencia térmica de los materiales del modelo de simulación se mantiene igual a la de la realidad, por lo tanto, la conductividad térmica de los materiales en el modelo son distintas a la realidad. Sabiendo que la fórmula de la resistencia térmica de conducción es  $R = 1/k \cdot L/A$ , donde  $k$  es la conductividad térmica,  $L$  la longitud y  $A$  es la sección, se puede obtener la relación de las conductividades térmicas del modelo de simulación respecto a la realidad.

$$\frac{R}{R'} = \frac{1/k}{1/k'} \cdot \frac{L/A}{L'/A'} = \frac{k'}{k} \cdot \frac{L}{L'} \cdot \frac{A'}{A} = 1$$

$$\frac{k'}{k} = \frac{L'}{L} \cdot \frac{A}{A'} = \frac{10^4}{10^8} \implies \frac{k'}{k} = 10^{-4} \quad (4.5)$$

Para el caso del nano-espaciador de  $SiO_2$  que puede presentar diferentes porosidades para el material, se multiplica la conductividad térmica por la conductividad térmica normalizada para dicha porosidad [6].

#### 4.2.5. Calor Específico

El calor específico de los materiales del modelo de simulación es el mismo que el de la realidad porque el calor específico se define como la cantidad de calor necesaria que hay que suministrar a una unidad de masa para elevar su temperatura en una unidad, como la masa del modelo de simulación es igual a la de la realidad, la cantidad de energía necesaria para elevar una unidad de temperatura va a ser igual al del modelo de simulación respecto a la realidad, por lo tanto, el calor específico se mantiene igual al de la realidad.

#### 4.2.6. Resistencia de contacto

La resistencia de contacto ( $R_c$ ) es difícil de modelar matemáticamente en una ecuación ya que depende de muchas variables, como la temperatura, presión, entre otros. La resistencia térmica producida por la resistencia de contacto es  $R_{th} = R_c/A$ , donde  $A$  es la superficie de contacto, por lo tanto se ve afectado por la diferencia de escala entre el modelo de simulación y la realidad.

$$\begin{aligned} \frac{R'_{th}}{R_{th}} &= \frac{R'_c}{R_c} \cdot \frac{A}{A'} = 1 \\ \frac{R'_{th}}{R_{th}} &= \frac{R'_c}{R_c} \cdot \frac{A}{A'} = 1 \implies \frac{R'_c}{R_c} = \frac{A'}{A} = 10^8 \end{aligned} \quad (4.6)$$

De la literatura, solo se encontró en [26] expresiones analíticas para calcular la conductancia de contacto ( $h_c$ ) entre dos superficies, las cuales han sido validadas para el caso concreto de dos superficies de SS. Pudiéndose obtener la  $R'_c$  aplicando la inversa a la  $h_c$  del modelo ( $h'_c$ ).

Estas expresiones analíticas solo se aplicarán al modelo de simulación de la nTPV de emisor de SS, es decir, nTPV de  $SS - SiO_2 - Ge$ , que para la obtención de la  $h'_c$ , y por ende la  $R'_c$ , se relacionan la  $h'_c$  con la  $h_c$  del caso concreto de SS [26]. Para obtener esta relación, simplificamos las ecuaciones suponiendo que el nano-espaciador de  $SiO_2$  es liso, por ende, su pendiente media de la rugosidad ( $m_i$ ) y su rugosidad ( $\sigma_i$ ) son nulas.

La  $h_c$  se obtiene según un modelo matemático presentado en [26] y según la ecuación de Cooper reducida por Yovanovich (ecuación (4.7)).

$$\frac{h_c \sigma}{k_s m} = 1,25 \left( \frac{P}{H_c} \right)^{0,95} \quad (4.7)$$

Donde  $\sigma$  es la combinación RMS de la rugosidad de ambas superficies de los materiales, que está definida en la ecuación (4.8b),  $m$  es la combinación RMS de la

media absoluta de la pendiente de la rugosidad, definida en la ecuación (4.8a),  $k_s$  es la media armónica de la conductividad térmica, cuya ecuación está definida en la ecuación (4.8c),  $H_c$  es la micro-dureza Vickers del material más duro y  $P$  es la presión aplicada.

$$m = \sqrt{m_1^2 + m_2^2} \quad (4.8a) \quad \sigma = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2} \quad (4.8b) \quad k_s = 2 \cdot \frac{k_1 \cdot k_2}{k_1 + k_2} \quad (4.8c)$$

La presión de contacto adimensional, es decir, la relación entre la  $P$  y la  $H_c$  de la ecuación (4.7), se obtiene a partir del modelo propuesto por Song y Yovanovich, recopilados en [26], según la ecuación (4.9) donde  $c_1$  es 10.6 GPa y  $c_2$  es -0.40.

$$\frac{P}{H_c} = \left[ \frac{P}{c_1 (1,62\sigma/m)^{c_2}} \right]^{\frac{1}{2+0,071c_2}} \quad (4.9)$$

Como se puede observar en las ecuaciones 4.7 y 4.9, el valor de  $\sigma$  y  $m$  se presentan siempre relacionados como  $\sigma/m$ , y se cumple que  $\sigma/m = \sigma'/m'$  porque al suponer que el caso de dos aceros tienen idénticas  $m_i$  y  $\sigma_i$ , la relación  $\sigma/m$  queda como  $\sigma_i/m_i$ , que resulta ser la misma relación para el caso de SS- $SiO_2$ .

$$\frac{\sigma}{m} = \frac{\sqrt{\sigma_{SS}^2 + \sigma_{SS}^2}}{\sqrt{m_{SS}^2 + m_{SS}^2}} = \frac{\sigma_{SS}\sqrt{2}}{m_{SS}\sqrt{2}} = \frac{\sigma_{SS}}{m_{SS}}$$

$$\frac{\sigma'}{m'} = \frac{\sqrt{\sigma_{SS}^2 + 0^2}}{\sqrt{m_{SS}^2 + 0^2}} = \frac{\sigma_{SS}}{m_{SS}}$$

Por lo tanto, considerando que  $c_1$  y  $c_2$  no varían con el cambio de material, la relación de  $h'_c$  respecto a  $h_c$  se obtiene relacionando la ecuación (4.7) del modelo a simular con la realidad.

$$Cte = 1,25 \frac{m}{\sigma} \cdot \left( \frac{P}{H_c} \right)^{0,95} \implies h_c = k_s \cdot Cte$$

Donde  $Cte$  es una constante que es igual para el caso de los aceros, como para el caso SS- $SiO_2$ . El valor de  $k_s$  para el caso de los aceros es  $k_{SS}$ , siendo  $k_{SS}$  la conductividad térmica del SS.

$$\frac{h'_c}{h_c} = \frac{k'_s}{k_s} \cdot \frac{Cte}{\left( \frac{P}{H_c} \right)^{0,95}} = \frac{2 \cdot \frac{k_{SS} \cdot k_{SiO_2}}{k_{SS} + k_{SiO_2}}}{k_{SS}} \quad (4.10)$$

$$\frac{h'_c}{h_c} = 2 \cdot \frac{k_{SiO_2}}{k_{SS} + k_{SiO_2}}$$

Para este trabajo los datos utilizados de las conductividades térmicas de los materiales para la relación de las conductancias de contacto son a temperatura ambiente, el valor de  $k_{SiO_2}$  es  $1,5 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$  y el valor de  $k_{SS}$  es de  $15 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$ , quedando la relación de conductancias de contacto como  $h'_c/h_c = 0,1818$ .

### 4.3. Procedimientos de las simulaciones y extracción de resultados

A continuación se describen los procedimientos seguidos en este trabajo para la realización de la simulación de la transmisión de calor por radiación de campo cercano, la simulación de la transmisión de calor por conducción y la extracción de los datos de las simulaciones.

#### 4.3.1. Para la radiación de campo cercano

Las simulaciones de transmisión de calor por radiación de campo cercano se realizan para una combinación de varios materiales de emisor y célula en un rango de distancias de 100 nm a 1000 nm. Para la realización de las simulaciones y la obtención de la potencia se siguen los pasos detallados en el apéndice A. A continuación se expone un procedimiento simplificado para la realización de una simulación.

1. Abrir la aplicación de la Calculadora de campo cercano.
2. Seleccionar los materiales para el emisor y el receptor que se desean simular.
3. Seleccionar el rango de distancias de separación deseado.
4. Asegurar que la temperatura del emisor sea la deseada.
5. Ejecutar la simulación y esperar a que termine.
6. Seleccionar el rango espectral de integración de las potencias frente a la longitud de onda.
7. Integrar y graficar los resultados de la integración.
8. Guardar los resultados de la potencia integrada.

#### 4.3.2. Para la conducción térmica

Las simulaciones de transmisión de calor por conducción se realizaron todas en CFD, existiendo unos 10 casos para cada combinación de materiales y resistencias de contacto, para cada uno de ellos se sigue un mismo conjunto de pasos.

Primero hay que crear el modelo 3D de cada componente del sistema TPV a simular, siendo cada uno de ellos es un prisma de sección cuadrada. El nano-espaciador tiene de base un cuadrado de lado  $3 \mu\text{m}$  y de altura variable  $h$ , el emisor y la célula tiene el mismo modelo 3D, con base cuadrada de 1 mm de lado con 0.2 mm de altura. Para el cálculo de las longitudes del modelo 3D se utiliza la ecuación (4.1).

#### Procedimiento modelado 3D

El procedimiento seguido para la obtención de los modelos 3D en Inventor y la creación del modelo de simulación inicial para cada altura del nano-espaciador está detallado paso a paso en el apéndice B. A continuación se expone un procedimiento genérico para la creación de los modelos 3D.

1. Crear las bases cuadradas con la longitud de lado respectiva, 10 m para emisor o célula y 3 cm para el nano-espaciador en la escala del modelo 3D en Inventor.
2. Extrudir el prisma la longitud correspondiente, 2 m para los emisor/célula y 1 mm para el nano-espaciador.
3. Crear un ensamblaje de emisor-espaciador-célula, estando la base del nano-espaciador en el centro de las bases de los otros dos componentes, como se observa en las figuras 4.1 a y b.

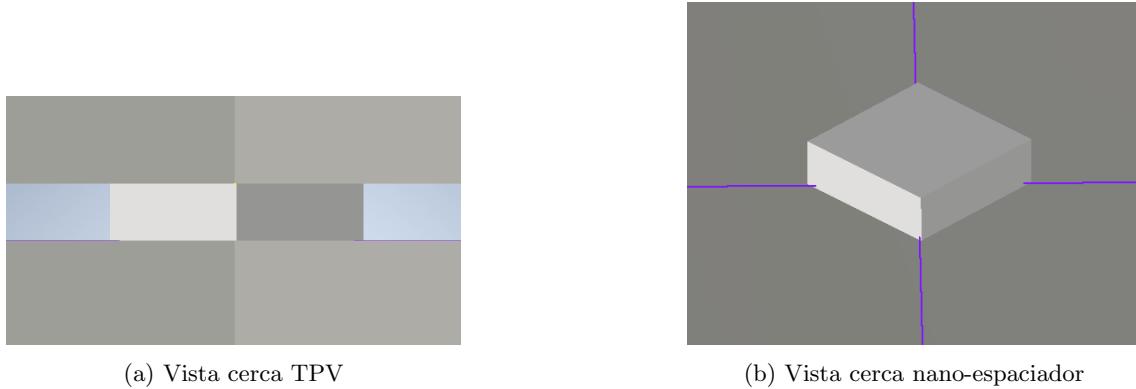


Figura 4.1: Vistas del sistema TPV. (b) Vista del sistema TPV de cerca desde un borde. (c) Vista del nano-espaciador colocado sobre el centro de una cara de la célula.

4. Usar la herramienta **Active Model Assessment Tool**, que se encuentra en la pestaña de simulaciones, para generar el modelo de simulación de CFD.
5. Guardar el modelo de CFD y volver al ensamblado de Inventor.
6. Incrementar la altura del modelo del nano-espaciador un milímetro dentro del ensamblaje en Inventor, sin sobrepasar el máximo de 10 mm.
7. Repetir todo 10 veces desde el paso 4, teniendo como última iteración el modelo de la TPV con nano-espaciador de 10 mm, equivalente a  $1 \mu\text{m}$  de la realidad.

#### Procedimiento simulación CFD

El procedimiento a seguir para cada modelo de la simulación de transmisión de calor por conducción en CFD está detallado en el apéndice C. A continuación se expone un procedimiento sencillo sobre la realización de las simulaciones en CFD.

1. Abrir el modelo o estudio correspondiente de simulación en CFD.
2. Aplicar los materiales adecuados para cada componente con la propiedad de entorno puesta en *variable*.
3. Aplicar en caso que aplique la resistencia de contacto sobre la superficie superior del nano-espaciador.
4. Aplicar las condiciones de contorno a los componentes del sistema, es decir, las temperaturas al emisor y a la célula.

#### *4.3. PROCEDIMIENTOS DE LAS SIMULACIONES Y EXTRACCIÓN DE RESULTADOS 29*

5. Aplicar un mallado apropiado para cada componente del sistema, teniendo el nano-espaciador una gran cantidad de nodos.
6. Simular la transmisión de calor en el modo estacionario hasta llegar al régimen estacionario.
7. Extraer o guardar los resultados de las potencias de conducción en un CSV.
8. Repetir estos pasos para cada modelo con distintas alturas de nano-espaciadores.



## Capítulo 5

# Resultados y discusión

En este capítulo se presentan las relaciones entre la cantidad de potencia transmitida por radiación (que es una potencia aprovechable para generar electricidad) y la cantidad de potencia transmitida por conducción (la cual no se puede aprovechar) para diferentes combinaciones de materiales de emisor y célula.

Para determinar estas relaciones se simula la transmisión de calor por conducción a través de un nano-espaciador, para luego extraer la cantidad de calor por conducción que se obtendría para un dispositivo de  $1 \text{ cm}^2$  con distintas distribuciones de nano-espaciadores ( $n^{\circ} \text{ espaciadores}/\text{cm}^2$ , y se simula la transmisión de calor por radiación de campo cercano en un dispositivo de  $1 \text{ cm}^2$ . Las simulaciones se realizan con el emisor a una temperatura constante de  $800^\circ\text{C}$  y la célula a  $25^\circ\text{C}$ .

- Primero se valida la simulación de CFD.
- Se presentan los resultados de las simulaciones de transmisión de calor por conducción y por radiación de campo cercano para diferentes combinaciones de materiales de emisor y célula, y la relación entre ambas simulaciones.
- Se estudia el número mínimo de espaciadores necesarios para soportar la carga de los emisores.
- Por último, se presentan los resultados de usar un nano-espaciador de *Si* en vez de *SiO<sub>2</sub>* para emisores de *Si* y *SS*.

### 5.1. Validación de las simulaciones de CFD

Las simulaciones de CFD son validadas al comprobarse que con ellas se obtienen los mismos resultados que el modelo analítico (ecuación (5.1)) cuando se imponen las mismas simplificaciones de dicho modelo, es decir, cuando se impone una conductividad térmica constante y altura del nano-espaciador de 1000 nm.

$$Q = k \cdot \Delta T \quad (5.1)$$

Para simplificar suponemos que la conductividad térmica ( $k$ ) de los materiales es constante con la variación de la temperatura y usamos su valor para una temperatura de  $25^\circ\text{C}$ , la  $k$  del *Si* es  $182.98 \text{ W/m}^\circ\text{C}$  y la del *SiO<sub>2</sub>* es  $1.30 \text{ W/m}^\circ\text{C}$ . De la simulación se extrae el flujo de calor del sistema y la temperatura media

máxima y mínima de las superficies de contacto del nano-espaciador con los otros componentes del sistema.

La temperatura media máxima del nano-espaciador es  $792.601^\circ\text{C}$ , la temperatura media mínima del nano-espaciador es  $32.39^\circ\text{C}$  y el flujo de calor es  $8897.93 \mu\text{W}$ . Con los resultados de las temperaturas medias del nano-espaciador se obtiene un flujo de calor teórico de  $8899.05 \mu\text{W}$  (obtenido mediante la ecuación (5.1), siendo  $k$  la conductancia térmica  $k = \sigma \cdot A/L$ ), obteniéndose un error relativo aproximado del  $12.6 \cdot 10^{-3}\%$ , por lo tanto el procedimiento es apropiado para la obtención de los resultados de las simulaciones de transmisión de calor por conducción.

## 5.2. Resultados de las simulaciones para una nTPV de Si-SiO<sub>2</sub>-Si

A continuación se estudian los efectos de la resistencia de contacto y la porosidad sobre un sistema sencillo compuesto por un emisor de *Si* de  $1 \text{ mm}$  lado y  $0.2 \text{ mm}$  de altura con la cara superior a  $800^\circ\text{C}$ , un nano-espaciador de  $3 \mu\text{m}$  de lado y una célula de *Si* de las mismas dimensiones que el emisor con la cara inferior a  $25^\circ\text{C}$ . El emisor y la célula son de  $1 \text{ mm}$  de lado porque para  $10 \text{ mm}$  de lado el factor de escala hace que sea más difícil de realizar el proceso de modelado 3D y el de simulación de transmisión de calor por conducción.

### 5.2.1. Efectos de la resistencia de contacto sobre la conducción

La resistencia de contacto ( $R_c$ ) usada es de unos  $4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2\text{K/W}$  [19] que es aplicada a la superficie superior del nano-espaciador que entra en contacto con la superficie inferior del emisor, solo se considera en dicha superficie porque el nano-espaciador será depositado sobre la superficie de la célula en la fase de fabricación, con lo cual la interfaz de con la célula se considera perfecta.

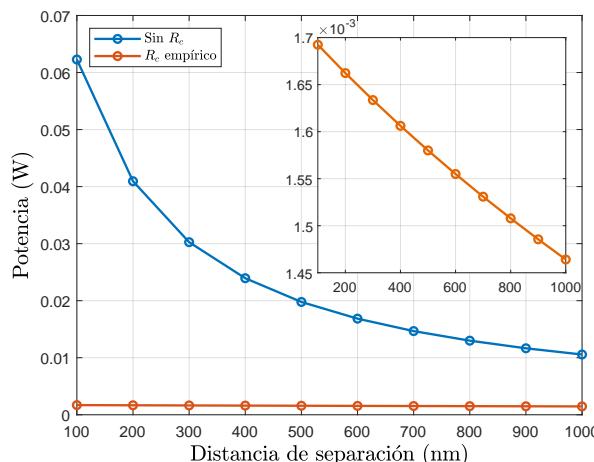


Figura 5.1: Representación gráfica del flujo de calor por conducción frente a las diferentes alturas del nano-espaciador con y sin  $R_c$ . Comparación de la potencia conducida de un nano-espaciador sin  $R_c$  y con  $R_c$  sobre un mismo eje. Y en el recuadro la potencia conducida de un nano-espaciador con  $R_c$ .

Para un área de  $9\mu\text{m}^2$  la resistencia de contacto total es aproximadamente de  $444,44 \cdot 10^3 \text{ K/W}$  comparada con los  $85,43 \cdot 10^3 \text{ K/W}$  de la mayor resistencia que presenta el nano-espaciador con 1000nm de altura a 25°C es al menos 5 veces más grande, por lo cual, como se observa en la figura 5.1 la resistencia de contacto constante domina sobre la resistencia del nano-espaciador dando así la forma aproximada de una recta (recuadro de la figura 5.1) porque la mayor caída de temperatura se dá en la superficie de contacto, evitando que aumente la temperatura del nano-espaciador variando menos su resistencia térmica (figuras 5.2a y 5.2b).

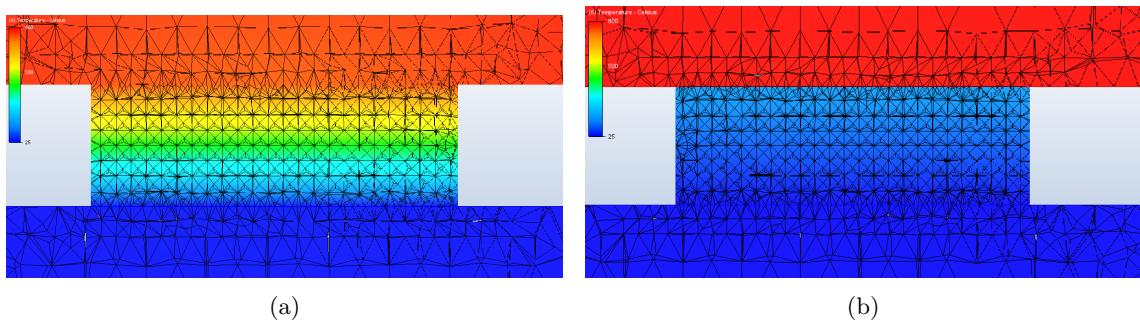


Figura 5.2: Resultados gráficos de la simulación de CFD de la transmisión de calor por conducción a través de un nano-espaciador de 1000nm de altura sin  $R_c$  (a) y con  $R_c$  (b).

La disminución de flujo de calor por conducción es significativa para todos los casos, siendo la potencia de conducción con  $R_c$  variando aproximadamente entre un 3 % y un 14 % de la potencia sin  $R_c$ , lo que implica una disminución de conducción de unos 97 % y 85 %.

Hay que tomar en cuenta que la resistencia de contacto en la realidad no es constante con la temperatura a diferencia de las simulaciones en CFD donde la  $R_c$  es constante, pero sirve para tener una primera idea de su importancia en la eliminación de la transferencia de calor por conducción.

### 5.2.2. Efecto de la porosidad sobre la conducción

Para diferentes porosidades la conductividad térmica varía, disminuyendo con el aumento del grado de porosidad [6], por este motivo la potencia de conducción disminuye para todas las alturas de nano-espaciador. La relación o conductividad térmica normalizada para una porosidad del 25 % y 50 % son respectivamente 0.64 y 0.25 veces la conductividad térmica del material según la referencia [6].

Como se puede observar en la figura 5.3b las relaciones de potencia no se cumplen completamente porque la temperatura en todo el nano-espaciador no es la misma lo que produce que la conductividad térmica a lo largo del espaciador sea distinta. Por tal motivo, al disminuir la altura del nano-espaciador aumenta la relación porque aumenta el gradiente de temperatura.

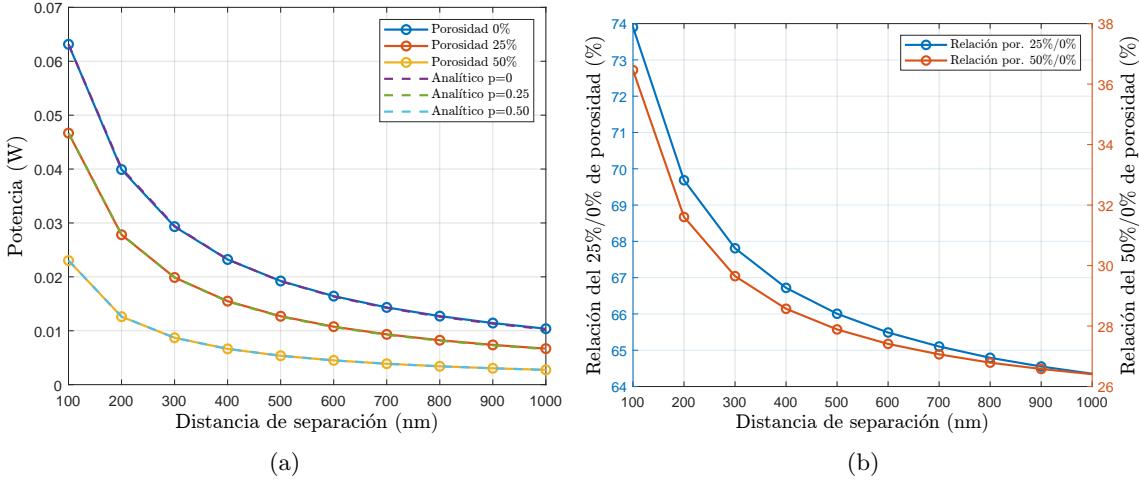


Figura 5.3: (a) Representación gráfica de las potencias de calor transmitidas por conducción a través de un nano-espaciador frente a la variación de la altura del nano-espaciador para diferentes grados de porosidad del 0 %, 25 % y 50 % del  $SiO_2$  y su modelo analítico (ec. (5.2)). (b) Representación gráfica de las relaciones de las potencias por conducción para porosidades del  $SiO_2$  de 25 % y 50 % respecto a la potencia de 0 % de porosidad frente a la variación de la altura del nano-espaciador.

Utilizando la aplicación **Curve Fitting** de MATLAB se obtiene un modelo matemático que relaciona la potencia de conducción respecto a la altura del nano-espaciador ( $d$ ) y la porosidad del material del nano-espaciador ( $\rho$ ), como se muestra en la ecuación (5.2) donde  $d$  es en nanómetros.

$$P(d, \rho) = -\frac{16,47 \cdot \rho - 11,03}{d - 106,80 \cdot \rho + 74,68} \quad (5.2)$$

### 5.2.3. Radiación de campo cercano

Para la radiación por campo cercano se utiliza la aplicación descrita en la sección 3.2.6 para dos placas gruesas de  $Si$  para varias separaciones entre ellas. La potencia radiativa (figura 5.4) aumenta con la disminución de la distancia de separación como lo indica el componente exponencial en la ecuación (2.5) de [24].

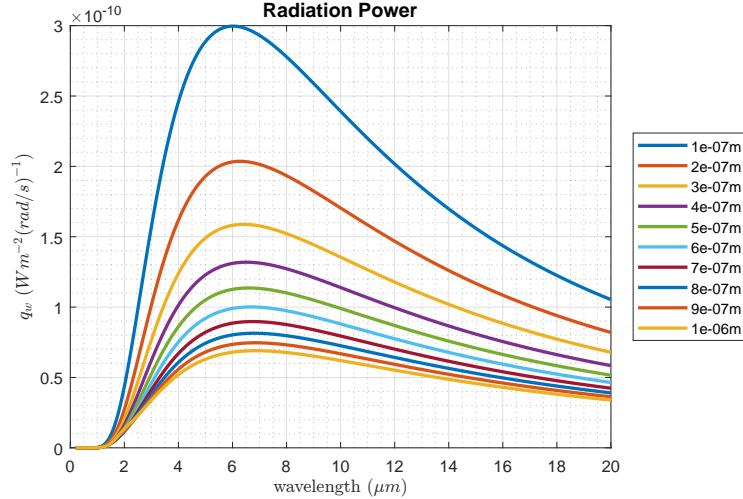


Figura 5.4: Potencia radiada espectral para dos placas gruesas planas de *Si* en todo el rango espectral frente a diferentes distancias de separación de las placas ( $d$ ) en metros. *Fuente de la imagen: Calculadora de campo cercano, descrita en la sección 3.2.6*

Integrando la potencia en el rango espectral de longitudes de onda con energías mayores a 1.1 eV, BG del *Si*, se obtiene en promedio potencias del orden de  $60 W/m^2$  (figura 5.5a) a diferencia de integrar en todo el rango espectral, hasta las  $\sim 20 \mu m$ , cuyo orden es de  $10^4 W/m^2$  (figura 5.5b), Lo cual indica que se desaprovecha una gran cantidad de energía.

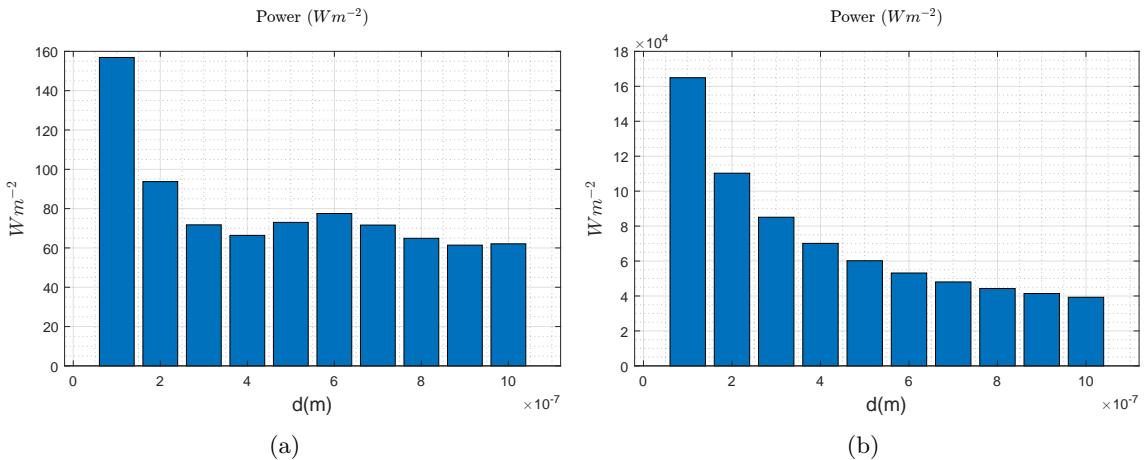


Figura 5.5: Potencias por unidad de área transmitida por radiación por efecto de campo cercano para el rango espectral de energía mayor a 1.1 eV (a) y para todo el rango espectral (b) frente a las diferentes distancias de separación.

Las potencias radiadas frente a las alturas de los nano-espaciadores obtenidas para el rango de longitudes de onda mayor a la BG del *Si* son muy pequeñas, como se observa en la figura 5.5a, produciendo que no sea viable este sistema porque las pérdidas por conducción son demasiado grandes. Esto se puede visualizar en la figura 5.6b, donde ni siquiera asumiendo la presencia de un único nano-espaciador con  $R_c$  se consigue que la potencia radiada sea al menos un orden de magnitud más alta que la potencia transferida por conducción (no se alcanza un factor 10).

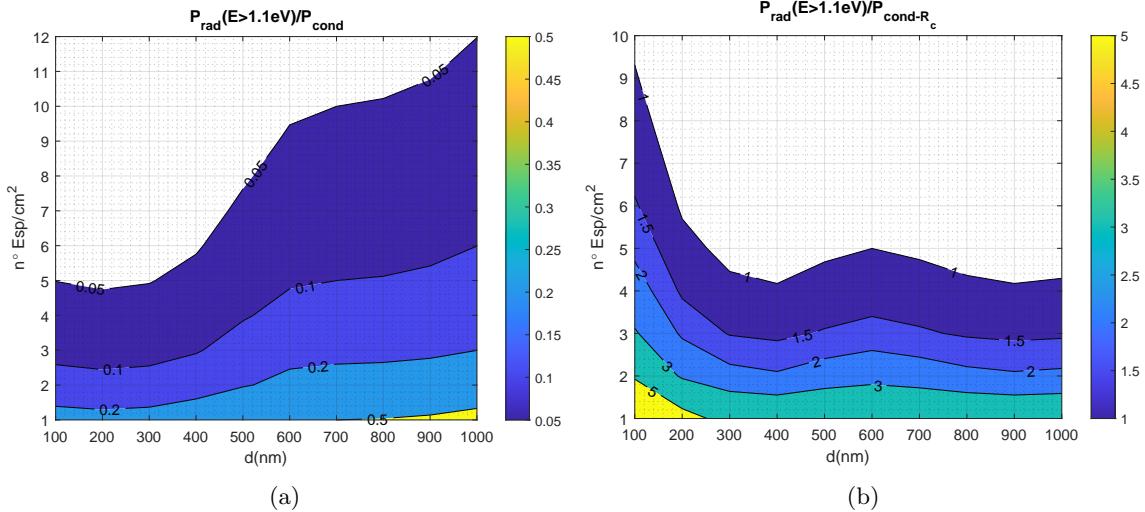


Figura 5.6: Densidad de los nano-espaciadores para diferentes relaciones de las potencias de radiación en el rango espectral de energía mayor a 1.1 eV respecto a las de conducción para cada densidad de nano-espaciadores de un sistema  $n\text{TPV}$  de  $1\text{cm}^2$  y célula de  $Si$  sin  $R_c$  (a) y con  $R_c$  (b) frente a las diferentes alturas de los nano-espaciadores. La barra de colores al lateral de cada gráfica representa todas las relaciones entre ambas potencias para diferentes densidades de nano-espaciadores en el rango que se muestra en los extremos de cada barra. También se muestran los contornos con su valor para destacar las distintas relaciones existentes de una manera sencilla.

Para tener una primera mejor idea de los valores numéricos de los resultados obtenidos de las simulaciones de transmisión de calor por conducción y radiación de campo cercano se recopilan en la tabla 5.1, estando en notación científica y con los decimales necesarios para una clara diferenciación de los resultados con el cambio de la distancia de separación entre emisor y célula.

Tabla 5.1: Tabla de resultados de las simulaciones de conducción y radiación de campo cercano para diferentes alturas del nano-espaciador. Flujos de calor del  $n\text{TPV}$   $Si-SiO_2-Si$  para diferentes alturas del nano-espaciador, para los casos sin  $R_c$  y con  $R_c$  igual a  $4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2\text{K/W}$  [19], y sin  $R_c$  pero con las proporciones de las porosidades de [6] para un 25 % y un 50 %.

	Potencias según como se transmite el calor					
	Conducción ( $\text{W/n}^{\circ}$ nano-espaciadores)				Radiación ( $\text{W/m}^2$ )	
Dist. (nm)	$P_{\text{Normal}}$	$P_{R_c-\text{Empirico}}$	$P_{\text{Porosidad25}}$	$P_{\text{Porosidad50}}$	$P_{Eg>1,1eV}$	$P_{full}$
100	6,31E-02	1,69E-03	4,67E-02	2,30E-02	156.89	1,65E+05
200	3,99E-02	1,66E-03	2,78E-02	1,26E-02	93.75	1,10E+05
300	2,93E-02	1,63E-03	1,99E-02	8,69E-03	71.75	8,51E+04
400	2,32E-02	1,60E-03	1,55E-02	6,63E-03	66.39	7,01E+04
500	1,92E-02	1,58E-03	1,27E-02	5,36E-03	73.00	6,02E+04
600	1,64E-02	1,55E-03	1,08E-02	4,50E-03	77.52	5,32E+04
700	1,43E-02	1,53E-03	9,33E-03	3,88E-03	71.63	4,80E+04
800	1,27E-02	1,50E-03	8,24E-03	3,41E-03	64.90	4,43E+04
900	1,14E-02	1,48E-03	7,38E-03	3,04E-03	61.42	4,14E+04
1000	1,04E-02	1,46E-03	6,68E-03	2,74E-03	62.09	3,93E+04

Cabe destacar que la potencia de conducción depende del número de nano-espaciadores y la potencia de radiación depende del área. Por lo tanto, para compararlas hay que multiplicar el número de nano-espaciadores por la potencia de conducción y el área en metros cuadrados a la potencia de radiación integrada.

### 5.3. Resultados de las simulaciones para una nTPV de Si-SiO<sub>2</sub>-Ge

A continuación se procede a estudiar un caso más realista del sistema nTPV descrito en la sección anterior con una célula de *Ge* en vez de una de *Si*, cuya BG es de 0.7 eV respecto a los 1.1 eV del *Si*.

#### 5.3.1. Simulaciones de CFD

Se realizan las simulaciones de transmisión de calor por conducción en CFD, obteniéndose una reducción considerable de la potencia de la nTPV con  $R_c$  (figura 5.7b) respecto a sin  $R_c$  (figura 5.7a), como en el caso de la célula de *Si* (figura 5.1).

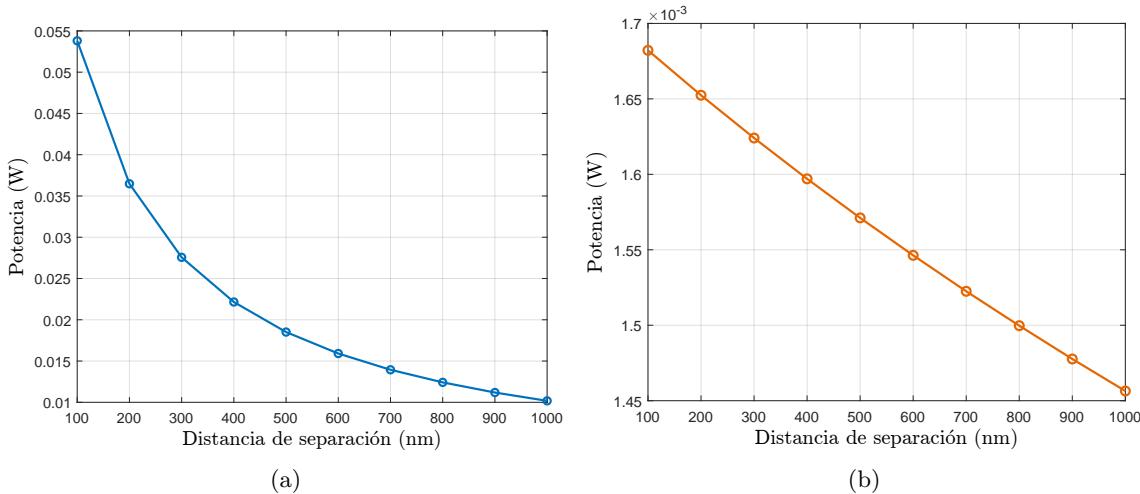


Figura 5.7: Potencias transmitidas por conducción para un sistema nTPV de *Si – SiO<sub>2</sub> – Ge* de un nano-espaciador con emisor a 800°C y célula a 25°C sin  $R_c$  (a) y con  $R_c$  (b) frente a las diferentes alturas del nano-espaciador.

La potencia de conducción disminuye de unos 53.80 mW sin  $R_c$  a unos 1.68 mW con  $R_c$  para una altura de nano-espaciador de 100nm, que representa una reducción del 96.87 %. Para unos 1000 nm de altura de nano-espaciador la potencia disminuye de unos 10.20 mW sin  $R_c$  a unos 1.46 mW con  $R_c$ , que representa una reducción del 85.69 %.

Comparando los resultados obtenidos de la simulación de transmisión de calor por conducción de la nTPV de célula de *Ge* respecto a la de *Si*, se observa una variación casi nula para cuando hay  $R_c$ . Siendo aproximadamente las potencias de conducción de la nTPV con célula de *Ge* un 99 % de las potencias de la nTPV con célula de *Si* para todas las alturas del nano-espaciador, dando a entender que la diferencia de la conductividad térmica de los materiales no produce un efecto significativo sobre la conducción cuando existe  $R_c$ . Para el caso de que la nTPV no tenga  $R_c$ , las potencias para la célula de *Ge* son entre un ~85 % y un ~98 % respecto a la de la célula de *Si*.

### 5.3.2. Radiación de campo cercano

De las simulaciones de radiación de campo cercano se obtienen también resultados muy parecidos a los obtenidos en el caso de la célula de *Si* (figura 5.8b), solo mostrándose hasta los  $\sim 14\mu m$  de longitud de onda, donde se observa como al disminuir la distancia de separación aumenta la potencia radiativa (figura 5.8a).

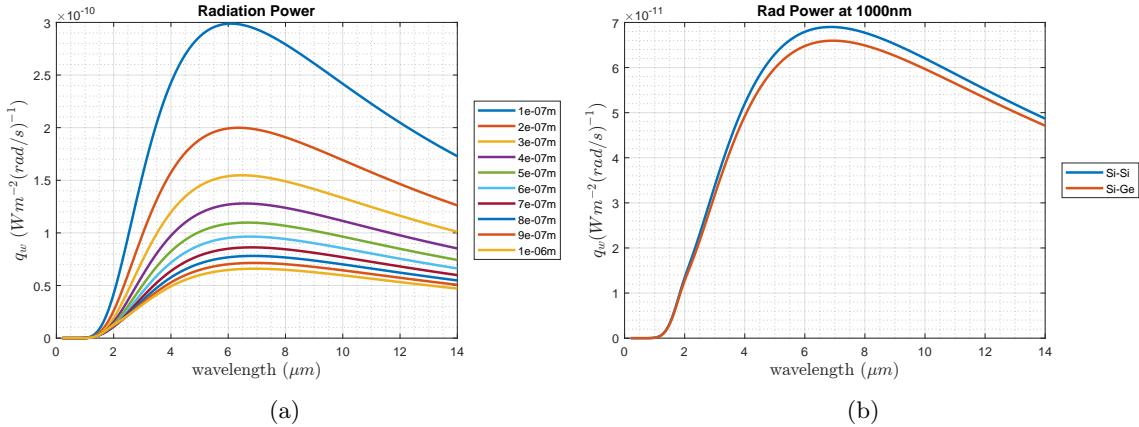


Figura 5.8: Potencias radiadas espetrales por campo cercano para un sistema nTPV *Si–SiO<sub>2</sub>–Ge* frente a las longitudes de onda para varias distancias de separación entre placas(a) y para dos materiales de célula, *Si* y *Ge* (b).

Para la obtención de las potencias de radiación se procede a realizar la integral en el rango espectral de energía mayor a los 0.7 eV, obteniéndose potencias alrededor de los  $10^3 W/m^2$  (figura 5.9a), y para todo el rango espectral de longitudes de onda se obtiene potencias alrededor de los  $10^4 W/m^2$  con un máximo de  $\sim 1.5 \times 10^5 W/m^2$  (figura 5.9b y tabla 5.2).

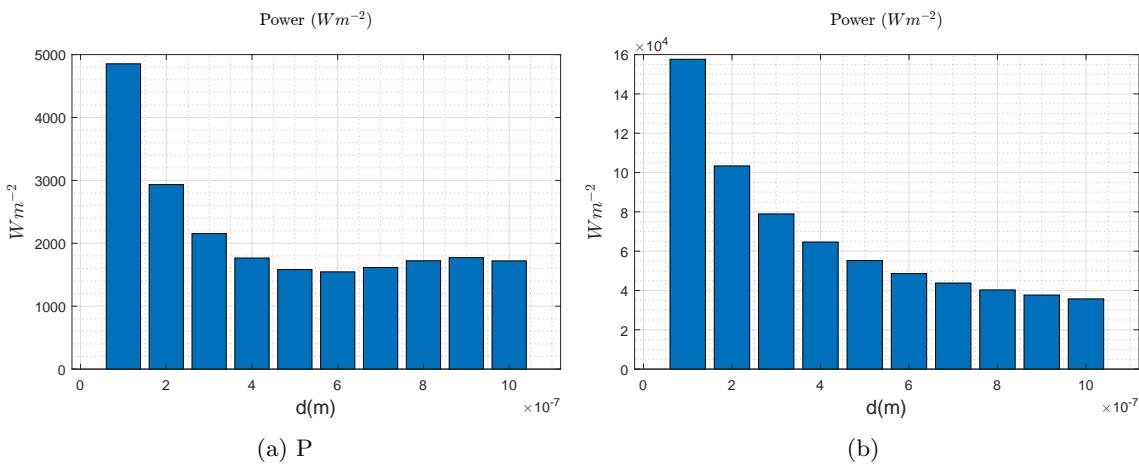


Figura 5.9: Potencias por unidad de área para la radiación de campo cercano para el sistema *Si – SiO<sub>2</sub> – Ge* frente a las diferentes alturas del nano-espaciador. (a) Potencias en el rango espectral de todas las longitudes de onda de energía mayor a 0.7 eV. (b) Potencias en todo el rango espectral, hasta las  $\sim 14\mu m$ .

Como para el caso de la nTPV de *Si – SiO<sub>2</sub> – Si* la diferencia de la potencia entre integrar hasta los 0.7 eV del rango espectral e integrar en todo el rango espectral es significativa. Al cambiar la célula de *Si* por una de menor BG de *Ge* se aumenta

la cantidad de potencia que se puede convertir en electricidad. También se observa una disminución de las potencias alrededor de los 600 nm (figura 5.9a), a diferencia de la célula de *Si* que aumenta debido al efecto Fabry-Perot (5.5a).

### 5.3.3. Densidad de nano-espaciadores

Para tener una mejor percepción de las ventajas que presenta el usar una célula de *Ge* frente a una de *Si* se calcula la densidad de nano-espaciadores frente a las alturas del nano-espaciador para las relaciones de la potencia de radiación respecto a la de conducción, observando que para las mismas alturas de nano-espaciador y densidades similares, se obtienen valores mucho mayores.

Hay que tener en cuenta que para un centímetro cuadrado de superficie de radiación la transmisión de calor por radiación se ve multiplicado por  $10^{-4}$ , por lo tanto, la potencia de radiación con  $E_g > 0,7\text{eV}$  en un centímetro cuadrado es  $\sim 10$  veces mayor que la potencia conducida sin resistencia de contacto para un nano-espaciador (figura 5.10a), pero  $\sim 100$  veces mayor que la potencia conducida con resistencia de contacto (figura 5.10b).

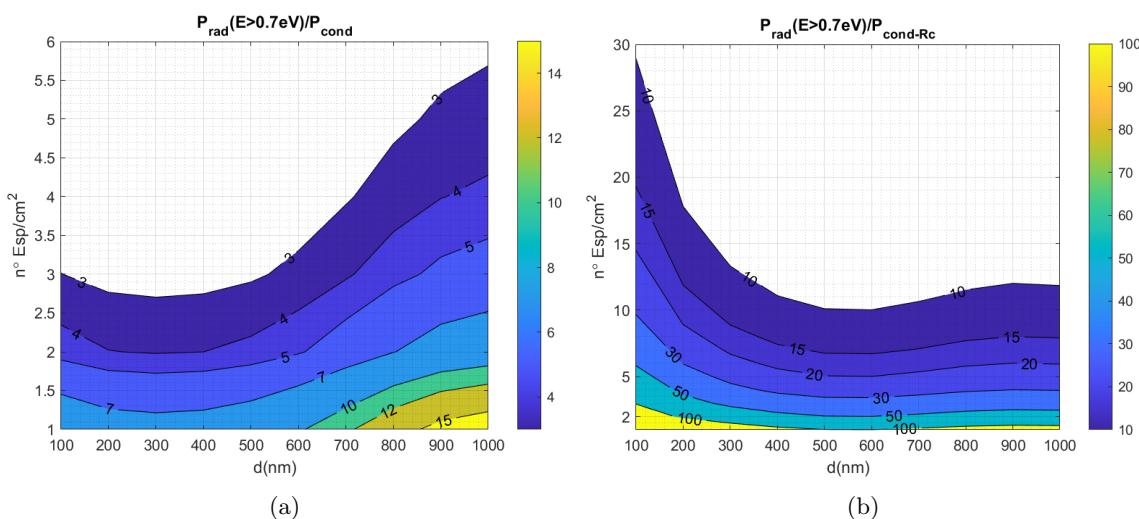


Figura 5.10: Densidad de los nano-espaciadores para diferentes relaciones de las potencias de radiación en el rango espectral de energía mayor a 0.7 eV respecto a las de conducción para cada densidad de nano-espaciadores de un sistema nTPV de  $1\text{cm}^2$  y célula de *Ge* sin  $R_c$  (a) y con  $R_c$  (b) frente a las diferentes alturas de los nano-espaciadores. La barra de colores al lateral de cada gráfica representa todas las relaciones entre ambas potencias para diferentes densidades de nano-espaciadores en el rango que se muestra en los extremos de cada barra. También se muestran los contornos con su valor para destacar las distintas relaciones existentes de una manera sencilla.

Como se observa en las figuras 5.10 a y b, la forma de la curva cambia su tendencia según se incluya o no la  $R_c$  porque sin  $R_c$  la tendencia de la curva de crecer con el aumento de la altura de los nano-espaciadores está marcada por la potencia de conducción (inversamente proporcional), y para el caso con  $R_c$  la tendencia de la curva de aumentar con la disminución de la altura de los nano-espaciadores está marcada por la potencia de radiación de campo cercano.

Los valores de las relaciones de la potencia de útil respecto a la pérdidas, es decir, la potencia de radiación dividido por la potencia de conducción, son bajos

para todas las densidades de nano-espaciadores del caso de la nTPV sin  $R_c$ , apenás consiguiendo una relación de al menos un orden de magnitud solo para una densidad de un  $1 \text{ n}^0\text{esp/cm}^2$  con altura mínima de 600 nm, como se puede observar en la figura 5.10a. Para el caso con  $R_c$  se consigue como mínimo una relación de dos ordenes de magnitud para todas las alturas de un nano-espaciador, como se puede observar en la figura 5.10b.

Estas relaciones disminuyen con el aumento de la densidad de los nano-espaciadores porque aumenta la potencia de conducción, por este motivo solo serán viables aquellas configuraciones que como mínimo tengan una relación de potencias de un orden de magnitud y una configuración mínima de cuatro nano-espaciadores, brindando apoyo y una mayor estabilidad que para un mínimo de tres nano-espaciadores.

La densidad de nano-espaciadores para una relación de potencias de un orden de magnitud es como mínimo 7 veces mayor para una nTPV con  $R_c$  (5.10b) respecto a sin  $R_c$  (5.10a), que para dicha relación de potencias su densidad de nano-espaciadores es menor a  $4 \text{ n}^0\text{esp/cm}^2$ . Para la nTPV con  $R_c$ , la densidad de nano-espaciadores es mayor que 4 para un relación de potencias de 10.

Por lo tanto, entre ambos casos el que puede ser viable es el sistema nTPV con  $R_c$  porque presenta una mayor densidad de nano-espaciadores para una misma relación de potencias, lo que permite que se distribuya la carga sobre los nano-espaciadores y sea más fácil mantener la separación entre el emisor y la célula constante sobre toda la superficie.

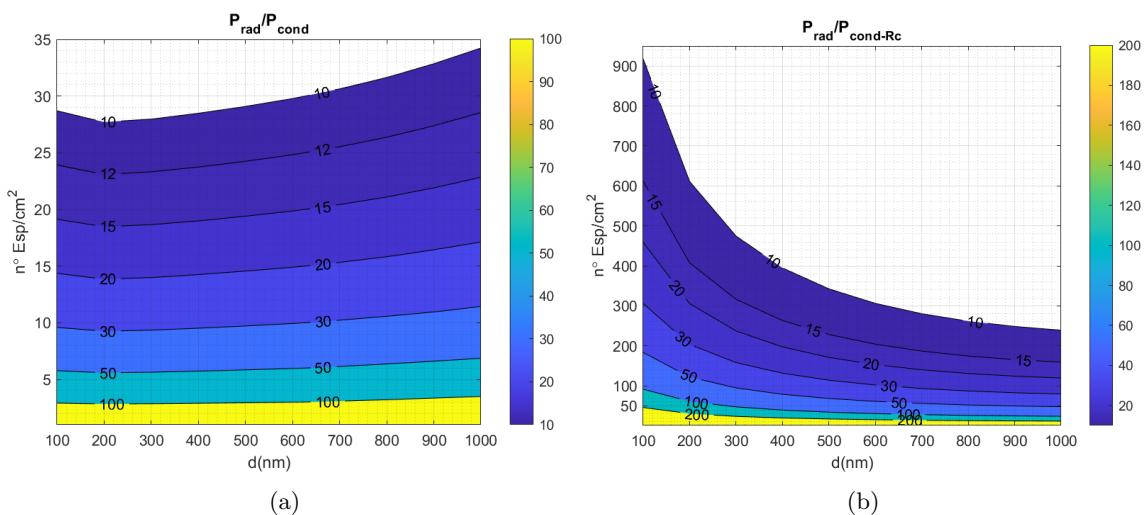


Figura 5.11: Densidad de los nano-espaciadores para diferentes relaciones de las potencias de radiación en todo el rango espectral respecto a las de conducción para cada densidad de nano-espaciadores de un sistema nTPV de  $1\text{cm}^2$  y célula de  $\text{Ge}$  sin  $R_c$  (a) y con  $R_c$  (b) frente a las diferentes alturas de los nano-espaciadores. La barra de colores al lateral de cada gráfica representa todas las relaciones entre ambas potencias para diferentes densidades de nano-espaciadores en el rango que se muestra en los extremos de cada barra. También se muestran los contornos con su valor para destacar las distintas relaciones existentes de una manera sencilla.

Por último, se representan el caso de la densidad de nano-espaciadores frente a las alturas de los nano-espaciadores para varias relaciones de las potencias de

radiación en todo el rango espectral y las potencias de conducción sin y con  $R_c$  (figuras 5.11 a y b, respectivamente), observándose las mismas tendencias que para el rango espectral de energías mayores e iguales a 0.7 eV pero con mayor densidad de nano-espaciadores por el aumento de la potencia radiada de campo cercano, por lo tanto, el aumento del rango espectral de radiación útil es bastante importante para el aumento de la potencia a convertir en electricidad.

Para facilitar la revisión de los resultados obtenidos de las simulaciones y de los cálculos realizados se recopilan en la tabla 5.2, donde se presentan en notación científica para facilitar la observación de los ordenes de magnitud de los resultados.

Tabla 5.2: Tabla de las potencias de resultado de las simulaciones de transmisión de calor por radiación de campo cercano y conducción para el sistema nTPV *Si – SiO<sub>2</sub> – Ge*.

Dist. (nm)	<b>Potencias según transmisión del calor</b>			
	Conducción (W/nº esp.)		Radiación (W/m <sup>2</sup> )	
	$P_{Normal}$	$P_{R_c-Empirico}$	$P_{Eg>0.7eV}$	$P_{full}$
100	5,38E-02	1,68E-03	4,87E+03	1,54E+05
200	3,65E-02	1,65E-03	2,94E+03	1,01E+05
300	2,76E-02	1,62E-03	2,16E+03	7,71E+04
400	2,22E-02	1,60E-03	1,77E+03	6,31E+04
500	1,85E-02	1,57E-03	1,59E+03	5,38E+04
600	1,59E-02	1,55E-03	1,55E+03	4,74E+04
700	1,39E-02	1,52E-03	1,62E+03	4,27E+04
800	1,24E-02	1,50E-03	1,73E+03	3,93E+04
900	1,12E-02	1,48E-03	1,78E+03	3,67E+04
1000	1,02E-02	1,46E-03	1,73E+03	3,49E+04

## 5.4. Resultados de las simulaciones para una nTPV de SS-SiO<sub>2</sub>-Ge

Una de las razones más importantes del estudio de las nTPV es la recuperación de calor residual, por lo cual se simula la transmisión por conducción y radiación para una nTPV de emisor de acero inoxidable (*SS*) porque es un material altamente utilizado en todos los sectores, principalmente en la industria, ya sea en calderas, tuberías u otros componentes o máquinas se encuentran a altas temperaturas.

### 5.4.1. Simulaciones de CFD

Para las simulaciones de transmisión de calor por conducción se estudian los efectos de resistencias de contacto aún mayores a la empírica estudiada hasta ahora. Las nuevas resistencias de contacto se obtienen aplicando la inversa a la  $h_c$  ( $R_c = 1/h_c$ ), la cual se obtiene mediante la relación de las  $h_c$  según la ecuación (4.10) para un emisor de *SS* y un nano-espaciador liso de *SiO<sub>2</sub>*. La  $h_c$  utilizada es 1000 W/(m<sup>2</sup>K), que corresponde a la  $h_c$  para dos aceros inoxidables a una presión de ~1 GPa para los experimentos realizados en [26], porque a dicha presión el error respecto al modelo matemático es pequeño.

A partir de dicha  $h_c$  y aplicando la ecuación (4.10) se obtiene una  $R_c$  de  $5,5 \cdot 10^{-3}$  m<sup>2</sup>K/W para una superficie de *SS* en contacto con una superficie lisa de *SiO<sub>2</sub>*. Se toma un valor intermedio entre dicha  $R_c$  y la  $R_c$  empírica de  $4 \cdot 10^{-6}$  m<sup>2</sup>K/W [19] para obtener el efecto de la variación de la  $R_c$  sobre la transmisión de conducción y la viabilidad del sistema, siendo el valor de dicha  $R_c$  intermedia unos  $2,75 \cdot 10^{-3}$  m<sup>2</sup>K/W.

Primero se simula la transmisión de calor por conducción para el caso sin  $R_c$  (figura 5.12a) y con  $R_c$  empírica de  $4 \cdot 10^{-6}$  m<sup>2</sup>K/W (figura 5.12b), para luego estudiar con  $R_c$  calculada de  $5,5 \cdot 10^{-3}$  m<sup>2</sup>K/W (figura 5.13a) y con  $R_c$  calculada intermedia de  $2,75 \cdot 10^{-3}$  m<sup>2</sup>K/W (figura 5.13b).

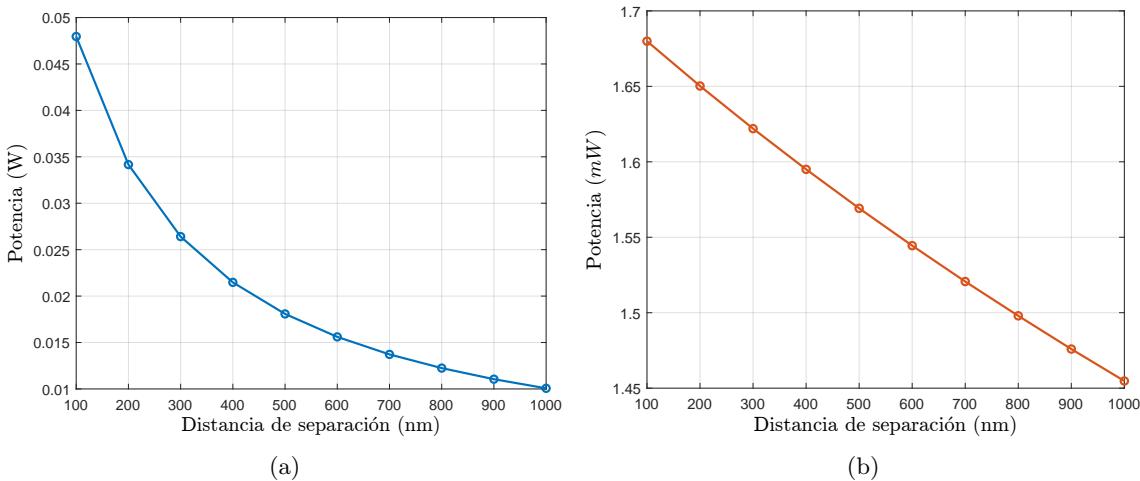


Figura 5.12: Potencias transmitidas por conducción para una nTPV *SS – SiO<sub>2</sub> – Ge* sin  $R_c$  (a) y con  $R_c$  empírica de  $4 \cdot 10^{-6}$  m<sup>2</sup>K/W (b) frente a las alturas de un nano-espaciador.

La potencia máxima sin  $R_c$  es menor que 0.05W (figura 5.12a) a diferencia de la nTPV de  $Si - SiO_2 - Ge$  que la potencia máxima es menor a unos 0.055W (figura 5.7a). Para la nTPV con  $R_c$  empírica la potencia conducida se encuentra en el rango de 1.45 mW a 1.7 mW (figura 5.12b), igual que para el caso de la nTPV de  $Si - SiO_2 - Ge$ , por lo tanto, el material del emisor no es significativo cuando existe una resistencia de contacto de por lo menos  $4 \cdot 10^{-6} m^2 K/W$ .

Las potencias transmitidas por conducción para los casos con  $R_c$  calculadas (figuras 5.13b a y b) son tres ordenes de magnitud menor que para las potencias del caso con  $R_c$  empírica (figura 5.12b), esta reducción corresponde a que ambas  $R_c$  calculadas son tres ordenes de magnitud superior a la  $R_c$  empírica. Por ende, la  $R_c$  es la resistencia de mayor relevancia del sistema nTPV para cualquiera de estos tres valores.

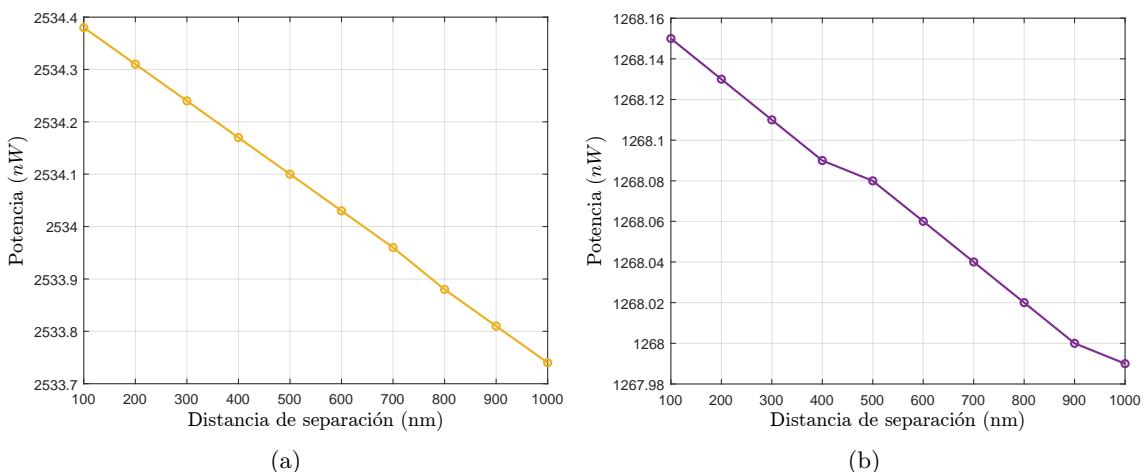


Figura 5.13: Potencias por conducción para una nTPV  $SS - SiO_2 - Ge$  con  $R_c$  calculadas a partir de las conductancias térmicas [26], para una  $R_c$  máxima de  $5,5 \cdot 10^{-3} m^2 K/W$  (b) y una  $R_c$  intermedia  $2,75 \cdot 10^{-3} m^2 K/W$  (a) frente a las alturas de un nano-espaciadores.

Las potencias para las nTPV con  $R_c$  calculadas son del orden de los mil nW, y como se pueden observar en las figuras 5.13 (a) y (b) las potencias son aproximadamente rectas con muy poca variación entre cada altura consecutiva de nano-espaciador, pudiéndose considerarse constantes para unos valores de  $\sim 2,534 \mu W$  para la nTPV de  $R_c$  calculada intermedia y  $\sim 1,268 \mu W$  para la nTPV de  $R_c$  calculada máxima.

Se calcula la relación de cada una de las potencias de conducción de las nTPV con  $R_c$  respecto a la potencia conducida sin resistencia de contacto, obteniéndose una reducción media muy grande de un 99.98 % para las nTPVs con  $R_c$  calculadas porque la resistencia total es mucho mayor que para la  $R_c$  empírica, reducción máxima de un 96.50 %.

Dado que la resistencia de contacto en las simulaciones es constante, no se procede a calcular un modelo analítico que relacione las potencias de conducción con las alturas de los nano-espaciadores y con la resistencia de contacto, y por la alta complejidad de la resistencia de contacto en la realidad, es decir, su alta dependencia en varios parámetros como la presión, temperatura, conductividades

de los materiales, entre otros.

#### 5.4.2. Radiación de campo cercano

Para la simulación de radiación de campo cercano solo se consideran los resultados en el rango espectral de energía mayor a 0.7eV o longitudes de onda menores a  $\sim 1.8 \mu m$ . Los datos disponibles del índice de refracción  $n$  y coeficiente de extinción  $k$  del acero inoxidable llegan hasta los  $1.2 \mu m$  de longitud de onda [29], se realiza una extrapolación lineal hasta los  $1.8 \mu m$  para poder obtener las potencias de radiación para diferentes distancias de separación.

Se comparan las potencias de radiación integradas en el rango espectral de energía mayor a 0.7eV para un emisor de Hierro ( $Fe$ ), cuyos valores de  $n$  y  $k$  son conocidos para este rango energético, y de  $SS$  para verificar que no existan grandes diferencias entre las potencias para un emisor de  $SS$  respecto a las del  $Fe$  como consecuencia de la extrapolación de los valores de  $n$  y  $k$  hasta los  $1.8 \mu m$ . Se compara respecto al  $Fe$  porque es el elemento principal que componen a los aceros.

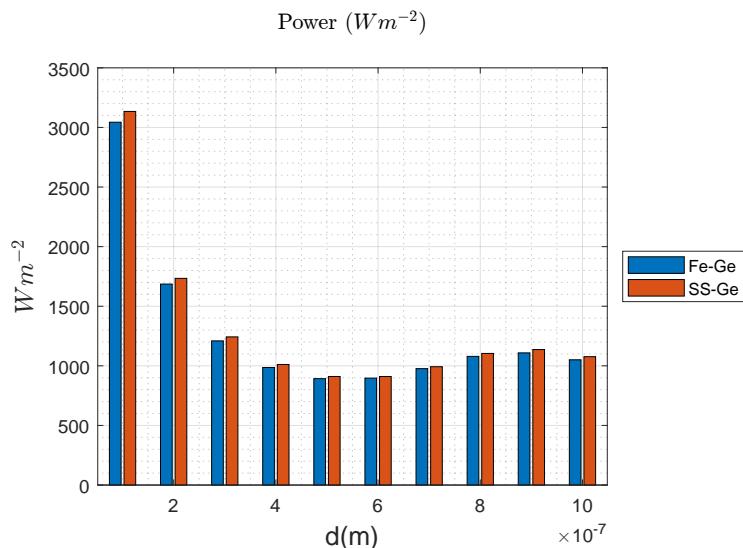


Figura 5.14: Potencias por radiación integradas en el rango espectral de energía mayor a 0.7eV para un emisor de  $Fe$  y un emisor de  $SS$  con receptor de  $Ge$  frente a las diferentes distancias de separación de las placas.

Se obtienen valores similares para todo el rango de distancias de separación estudiadas (figura 5.14), de 100nm a 1000nm. Por lo tanto, se utiliza para las simulaciones de radiación de campo cercano el emisor de  $SS$  con  $n$  y  $k$  extrapolados linealmente.

Se procede a simular la radiación por campo cercano para solo un emisor de  $SS$  (figura 5.15a), obteniéndose la potencia radiada espectral de la figura 5.8a. Se puede observar como esta potencia es menor que para el emisor de  $Si$  (figura 5.8a) y también las potencias integradas en el rango espectral de energía superior a 0.7eV del emisor  $SS$  (figura 5.15b) son menores que para las del emisor de  $Si$  (figura 5.9a) para todas las distancias de separación.

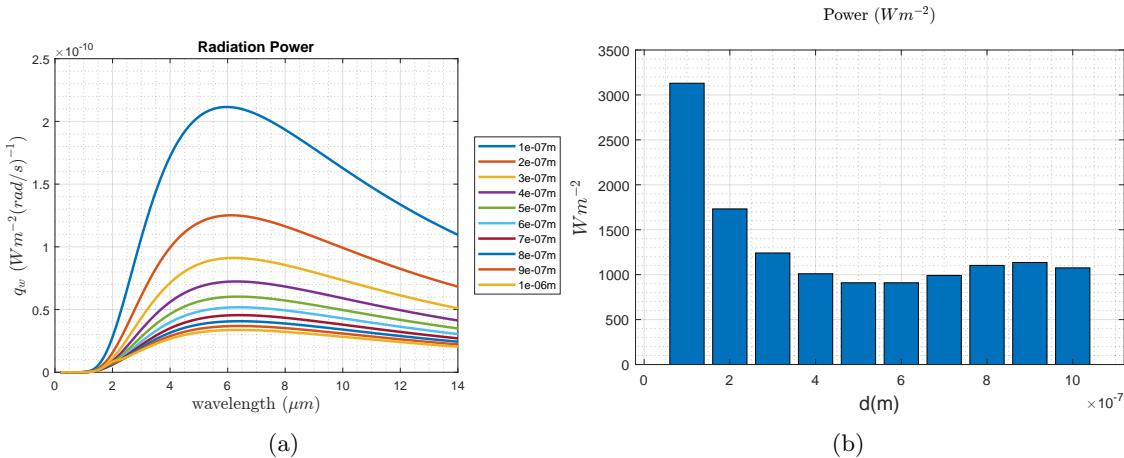


Figura 5.15: (a) Potencia radiada espectral por campo cercano para un emisor de *SS* y una célula de *Ge*. (b) Potencia radiada para un rango de longitudes de onda cuya energía es mayor a los  $0.7\text{ eV}$  ( $\sim 1.8\text{ }\mu\text{m}$ ).

Las potencias integradas no son todas mayores de  $1000\text{ W m}^{-2}$  para las distancias de separación de  $500\text{nm}$ ,  $600\text{nm}$  y  $700\text{nm}$ , pero en promedio se pueden considerar que las potencias se encuentran en el rango de los miles de  $\text{W m}^{-2}$  desde los  $300\text{nm}$  a los  $1000\text{nm}$ , creciendo en mayor proporción a partir de los  $200\text{nm}$  hasta los  $100\text{nm}$ .

#### 5.4.3. Densidad de nano-espaciadores

Se realizan los cálculos de las densidades de nano-espaciadores para las relaciones de las potencias de radiación respecto a las de conducción. Para el caso de la nTPV con  $R_c$  se gráfica solo para potencias de radiación 3 veces superior a las potencias de conducción. Para el caso con  $R_c$  se gráfica para potencias de readiación de un orden de magnitud superior a las de conducción.

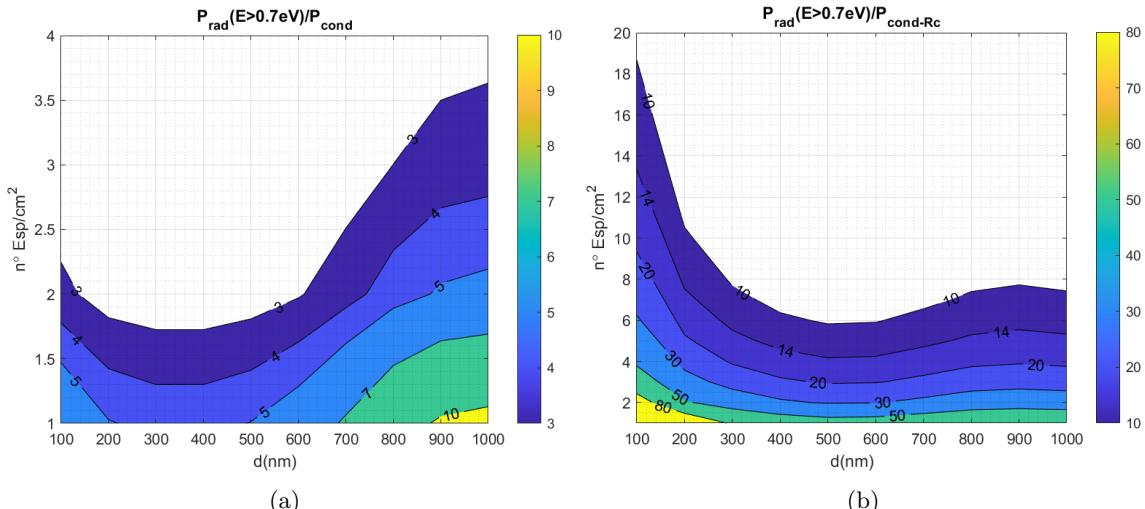


Figura 5.16: Densidades de nano-espaciadores para todas las relaciones de las potencias de radiación respecto a las conducción para un emisor de *SS* frente a las altura de los nano-espaciadores para un emisor y una célula de  $1\text{ cm}^2$  sin  $R_c$  (a) y con  $R_c$  empírica (b). El espectro de colores para cada relación entre las potencias de cada gráfica está indicado en las barra de colores lateral en el rango de valores que se encuentran en los extremos de cada barra.

Las densidades de nano-espaciadores obtenidas son menores que para la nTPV de  $Si - SiO_2 - Ge$  para todas las relaciones de potencias, siendo para el caso sin  $R_c$  entre 1 a 2 nano-espaciadores menos por  $cm^2$ . Para las densidades de las nTPVs con  $R_c$  para una altura de nano-espaciadores de 100nm la densidad disminuye de unos  $\sim 30\ n^{\circ}esp/cm^2$  (figura 5.10b) para la nTPV con emisor de  $Si$  a unos  $\sim 19\ n^{\circ}esp/cm^2$  (figura 5.16b) para la nTPV con emisor de  $SS$  porque la potencia radiada es menor para el emisor de  $SS$  que para el emisor de  $Si$ .

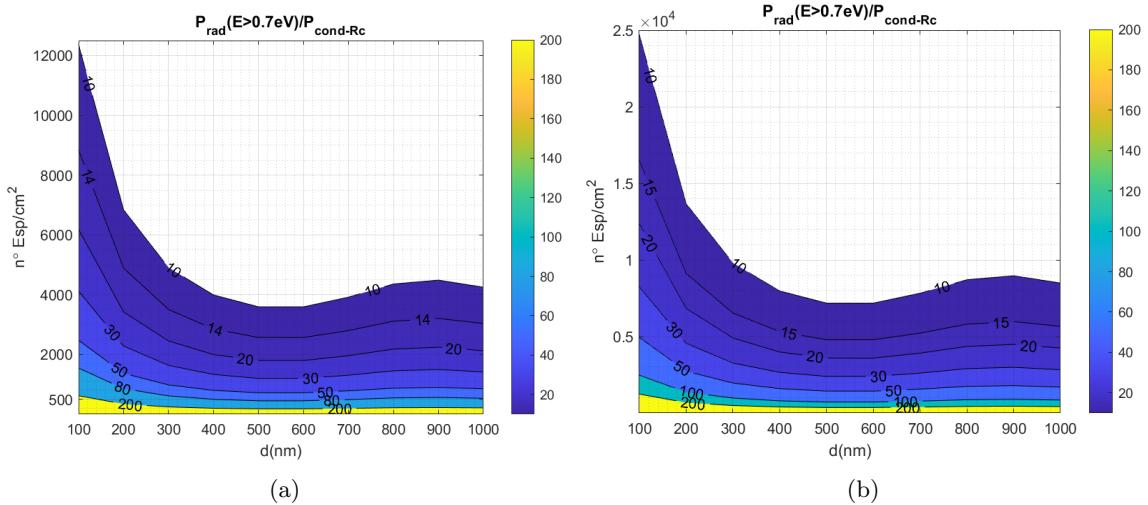


Figura 5.17: Densidades de nano-espaciadores para todas las relaciones de las potencias de radiación respecto a las conducción para un emisor de  $SS$  frente a las altura de los nano-espaciadores para un emisor y una célula de  $1\ cm^2$  con  $R_c$  calculada intermedia (a) y con  $R_c$  calculada máxima (b). El espectro de colores para cada relación entre las potencias de cada gráfica está indicado en las barra de colores lateral en el rango de valores que se encuentran en los extremos de cada barra.

Para los casos con  $R_c$  calculadas, las densidades de nano-espaciadores para una relación mínima de potencias de un orden de magnitud son del orden de  $10^4\ n^{\circ}esp/cm^2$  y disminuyendo al orden de los miles de  $n^{\circ}esp/cm^2$  para relaciones de potencias de dos órdenes de magnitud. Para las relaciones de las potencias de dos órdenes de magnitud las densidades de nano-espaciadores a una altura de nano-espaciadores de 100nm son  $\sim 2500\ n^{\circ}esp/cm^2$  para la nTPV con  $R_c$  intermedia y  $\sim 1000\ n^{\circ}esp/cm^2$  para la nTPV con  $R_c$  máxima (figuras 5.17 a y b).

Se observa que la relación entre las densidades de nano-espaciadores para ambos casos de  $R_c$  calculada es aproximadamente igual a la relación entre ambas resistencias de contacto porque son constantes y solo afectan a la conducción en las simulaciones. El conocer estas relaciones es de utilidad para poder determinar en una primera instancia que valor de resistencia de contacto sería necesario como mínimo para tener la relación de potencias deseada con una cierta cantidad de nano-espaciadores de cierta altura.

También es importante tener en cuenta la variación de la densidad de nano-espaciadores o de la potencia de radiación entre su valor máximo y mínimo para una relación de potencias de un orden de magnitud porque las superficies tanto del emisor como de la célula presentan curvaturas que provocan un aumento o disminución de las distancias de separación entre ambos componentes, por ende, un aumento

o disminución de las potencias de radiación útiles para su conversión en electricidad.

Para estudiar dicha variación, se calcula la reducción máxima de la densidad de nano-espaciadores para una relación de potencias de un orden de magnitud, suponiendo que todos los nano-espaciadores son de 100 nm de altura. Para el mejor caso se considera que la distancia de separación entre el emisor y la célula es igual a la altura de los nano-espaciadores, 100 nm, y para el peor caso es de 600 nm, por presentar la mayor y menor potencia de radiación, respectivamente.

Se obtiene que para todos los casos con  $R_c$ , la reducción de las densidades entre el mejor y peor caso supuestos es de un 70.95 %. Las nTPV con  $R_c$  calculadas no se ven significativamente afectas por la reducción de la densidad de nano-espaciadores, a diferencia de la  $R_c$  empírica, porque aún así la densidad es lo suficientemente alta para poder mantener una separación más estable entre el emisor y la célula, y mantener una relación de potencias más estable.

Por último, se recopilan los resultados obtenidos de las simulaciones en la tabla 5.3 para tener una mejor idea de los valores numéricos y de la magnitud de los resultados.

Tabla 5.3: Tabla de recopilación de los resultados de las simulaciones de transmisión de calor por conducción y radiación de campo cercano para una nTPV de emisor de *SS*.

Dist. (nm)	Potencias según transmisión del calor				
	Conducción (W/nº esp.)				Radiación (W/m <sup>2</sup> )
	$P_{Normal}$	$P_{R_c-Cal.Max}$	$P_{R_c-Cal.Inter}$	$P_{R_c-Empirico}$	$P_{Eg>0,7eV}$
100	4,80E-02	1,26815E-06	2,53438E-06	1,68E-03	3,13E+03
200	3,42E-02	1,26813E-06	2,53431E-06	1,65E-03	1,73E+03
300	2,64E-02	1,26811E-06	2,53424E-06	1,62E-03	1,24E+03
400	2,15E-02	1,26809E-06	2,53417E-06	1,60E-03	1,01E+03
500	1,81E-02	1,26808E-06	2,53410E-06	1,57E-03	9,11E+02
600	1,56E-02	1,26806E-06	2,53403E-06	1,54E-03	9,10E+02
700	1,37E-02	1,26804E-06	2,53396E-06	1,52E-03	9,93E+02
800	1,22E-02	1,26802E-06	2,53388E-06	1,50E-03	1,10E+03
900	1,11E-02	1,26800E-06	2,53381E-06	1,48E-03	1,14E+03
1000	1,01E-02	1,26799E-06	2,53374E-06	1,45E-03	1,08E+03

## 5.5. Resultados de las simulaciones para una nTPV de SiC-SiO<sub>2</sub>-Ge

Se procede a estudiar el caso de una nTPV con un emisor de Carburo de Silicio (*SiC*) por ser una material con mayor conductividad térmica que el *Si* y el *SS* a 800°C, que rondan unos 60 W/(m<sup>2</sup>K) para el emisor de *SiC*, 26 W/(m<sup>2</sup>K) para el *Si* y 30 W/(m<sup>2</sup>K) para el *SS*. Además el *SiC* tiene un punto de fusión mayor que el *Si* y el *SS*, siendo una característica del material de gran utilidad para su uso en baterías para almacenar la energía en forma de calor.

Otra razón de estudiar la nTPV con emisor de *SiC* es por su utilización en [14] en una capa fina depositada sobre el emisor de una nTPV para aumentar el flujo de calor por radiación de campo cercano simulado entre el emisor y el receptor de *SiC* grueso.

### 5.5.1. Simulaciones de CFD

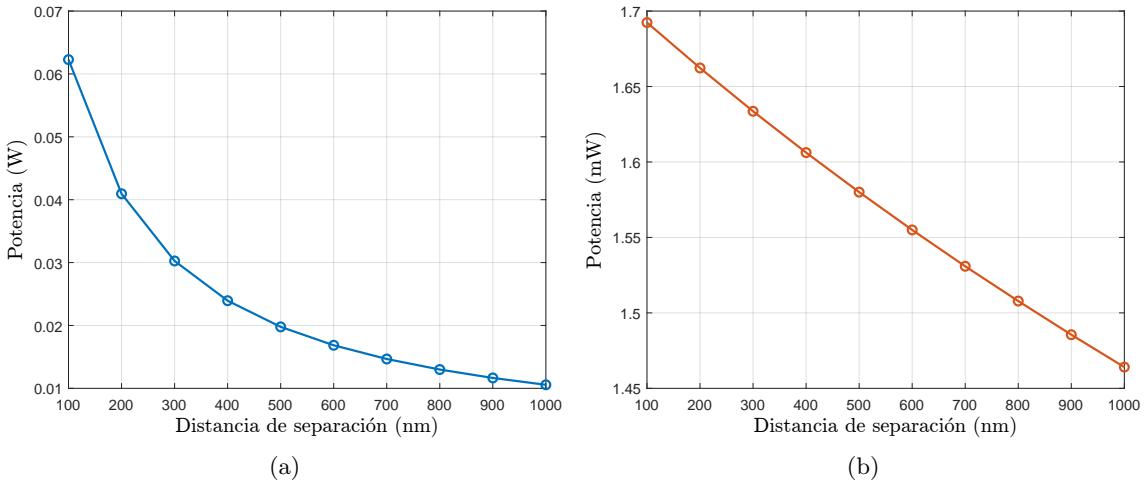


Figura 5.18: (a) Potencias transmitidas por conducción para sin y con el efecto de la  $R_c$  empírica, eje izquierdo para el caso sin  $R_c$  y eje derecho para el caso con  $R_c$ . (b) Relación de la potencia de conducción con  $R_c$  respecto a sin  $R_c$ .

Se realizan las simulaciones de transmisión de calor por conducción, obteniéndose resultados similares a los casos anteriores porque la mayor cantidad de caída de temperatura se produce en el nano-espaciador por tener una baja conductividad térmica respecto al emisor y la célula. Algo que si se nota es que la potencia máxima es un 15.75 % mayor que para el emisor de *Si*, pero la reducción de las potencias con  $R_c$  respecto a sin  $R_c$  es menor, no superando el 86.14 % a los 1000 nm. Siendo esta mayor que para el caso de la nTPV de emisor de *Si*, con una reducción de 85.69 % a los 1000 nm.

### 5.5.2. Radiación de campo cercano

Se realizan las simulaciones de transmisión de calor por radiación de campo cercano para el emisor de *SiC*, obteniéndose una potencia radiada espectral similar al del emisor de *Si* para longitudes de onda menores a  $2\mu\text{m}$  (figura 5.19b) y también tiene valores similares de la potencia radiada integrada en el rango espectral de energía mayor a  $0.7\text{eV}$  frente a las distancias de separación respecto al emisor de *Si* (figura 5.19a).

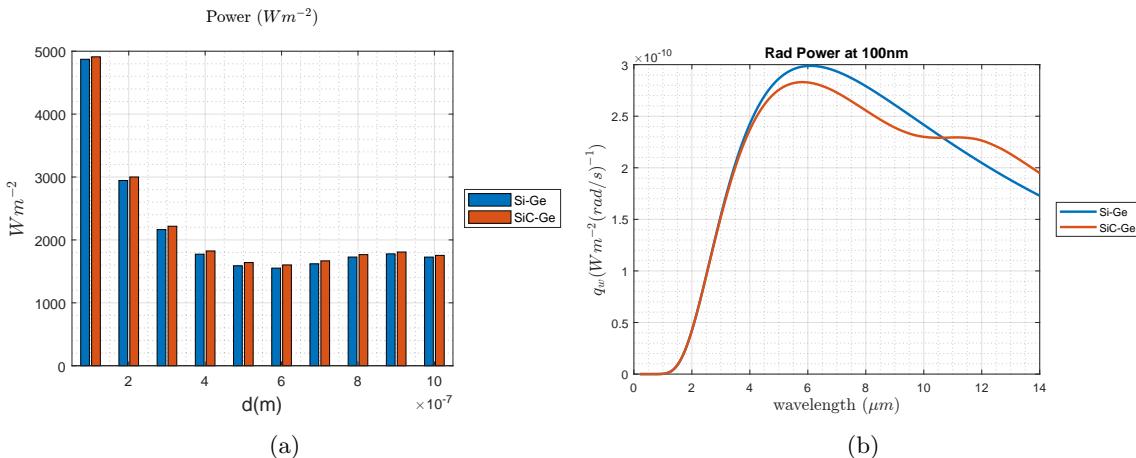


Figura 5.19: (a) Potencias integradas en el rango espectral de energía mayor a  $0.7\text{eV}$  para un emisor de *SiC* y un emisor de *Si* frente a las distancias de separación entre emisor y receptor. (b) Potencia radiada espectral para un emisor de *Si* y *SiC* con un receptor de *Ge* para una distancia de separación de 100nm frente longitudes de onda.

Aunque la potencia radiada espectral difieren al aumentar la longitud de onda ( $\lambda$ ), no supone una gran diferencia entre ambos emisores porque en el rango energético de interés ( $E > 0.7\text{eV}$ ) las curvas son bastante similares, provocando que las potencias integradas en dicho rango energético sean similares también. Este rango se encuentra en la parte inferior izquierda de la figura 5.20, que va desde el origen hasta aproximadamente  $1.8\mu\text{m}$ .

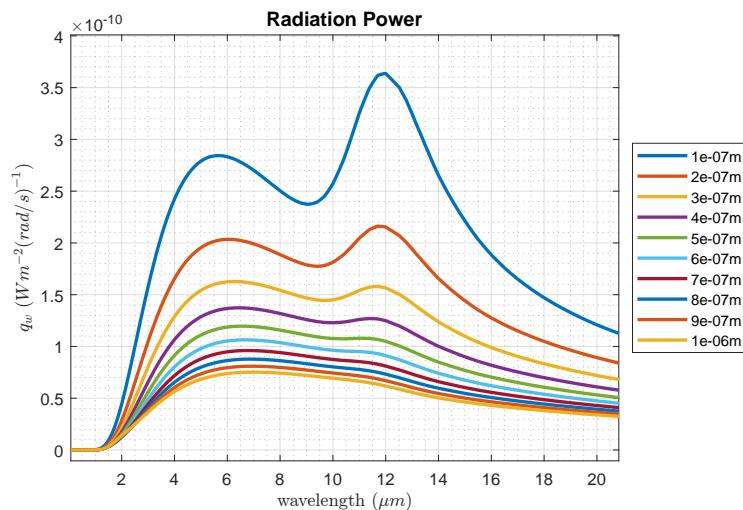


Figura 5.20: Potencias radiadas espectrales frente a las longitudes de onda para un sistema de *SiC* – *SiC* frente a diferentes distancias de separación entre placas.

También se simula un sistema con receptor de *SiC* y emisor de *SiC* para observar los efectos de la  $\omega_{res}$  sobre las potencias de radiación frente a las longitudes de onda. Se observa en la figura 5.20 que la  $\omega_{res}$  es aproximadamente  $1,57 \cdot 10^{14} \text{ rad/s}$  ( $\lambda = 12\mu\text{m}$ ) porque existe un pico de potencia espectral máxima que disminuye al aumentar la distancia de separación entre emisor y receptor, pudiéndose aprovechar dicha potencia para la conversión en electricidad si mediante una combinación de materiales se consigue que la frecuencia se encuentre dentro del rango espectral útil.

### 5.5.3. Densidad de nano-espaciadores

Se procede a calcular las densidades de nano-espaciadores por centímetro cuadrado para la nTPV con emisor de *SiC* para los casos de sin  $R_c$  y con  $R_c$  de  $4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{K/W}$  [19]. Obteniéndose unos resultados muy parecidos a los de la nTPV de emisor de *Si* porque los resultados obtenidos de las simulaciones también son bastante cercanos.

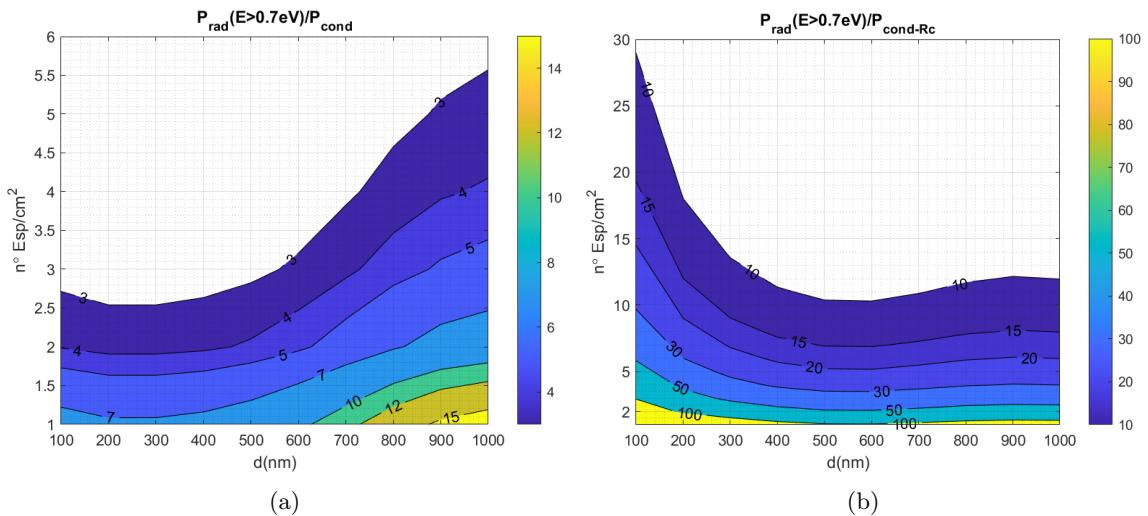


Figura 5.21: Densidades de nano-espaciadores ( $n^{\circ} \text{esp}/\text{cm}^2$ ) frente a las alturas de los nano-espaciadores para todas las relaciones de la potencia de radiación en el rango espectral de energías mayores e igual a 0.7 eV respecto a las potencias de conducción (dependientes en la densidad de nano-espaciadores) mayores a 3 para el caso sin  $R_c$  (a) y mayores a 10 para el caso con  $R_c$  (b). Donde las barras de colores laterales de cada gráfica representan los colores asociados a cada uno de los valores de las relaciones de las potencias, con los contornos de las relaciones más significativas representadas en las gráficas.

La principal diferencia es en las densidades de nano-espaciadores para el caso de la nTPV sin  $R_c$  (figura 5.21a), siendo esta menor que la del emisor de *Si* para todo el rango de alturas de los nano-espaciadores porque la conductividad térmica del *SiC* a 800°C es mayor que para el *Si* por lo tanto la resistencia térmica del sistema disminuye, teniendo así unas menores densidades. Para el caso de la nTPV con  $R_c$ , las diferencias no son tan notables como en el caso sin  $R_c$  porque la componente con mayor relevancia es la resistencia de contacto.

Por último, se recopilan los resultados obtenidos de las simulaciones de transferencia de calor por conducción y radiación de campo cercano en la tabla 5.4, los resultados se muestran en notación científica para simplificar el análisis de los

mismos.

Tabla 5.4: Tabla de recopilación de los resultados de las simulaciones de transmisión de calor por conducción y radiación de campo cercano para una nTPV de emisor de *SiC*.

Dist. (nm)	<b>Potencias según transmisión del calor</b>			
	Conducción (W/nº esp.)	Radiación (W/m <sup>2</sup> )	$P_{Eg>0,7eV}$	$P_{full}$
$P_{Normal}$	$P_{R_c-Empirico}$			
100	6,23E-02	1,69E-03	4,90E+03	1,50E+05
200	4,09E-02	1,66E-03	3,00E+03	1,01E+05
300	3,03E-02	1,63E-03	2,21E+03	7,80E+04
400	2,39E-02	1,61E-03	1,82E+03	6,43E+04
500	1,98E-02	1,58E-03	1,64E+03	5,52E+04
600	1,68E-02	1,55E-03	1,60E+03	4,87E+04
700	1,47E-02	1,53E-03	1,67E+03	4,40E+04
800	1,30E-02	1,51E-03	1,76E+03	4,06E+04
900	1,17E-02	1,49E-03	1,81E+03	3,80E+04
1000	1,06E-02	1,46E-03	1,75E+03	3,61E+04

## 5.6. Densidad de nano-espaciadores para soportar la carga

Dado que los nano-espaciadores tendrán que soportar el peso del emisor o la célula se estudia la cantidad mínima de nano-espaciadores necesarios en un centímetro cuadrados para soportar la carga. También se estudia la densidad de nano-espaciadores para el caso de que se aplique una presión de una atmósfera a una de las caras para asegurar que las distancias de separación sean lo más uniformes posibles.

La resistencia a compresión del  $SiO_2$  es de unos  $1,68 \text{ GPa}$  y la densidad mayor entre los materiales de emisor y células es el acero inoxidable 304, con una densidad aproximada de  $8 \text{ g/cm}^3$  o  $8 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$ . Para un emisor  $SS$  de área  $1 \text{ cm}^2$  y espesor de  $0,5 \text{ cm}$  la masa total es de unos  $4 \text{ gr}$  o un peso de unos  $\sim 0,04 \text{ N}$ , obteniéndose una densidad mínima de nano-espaciadores para solo soportar la carga del emisor de  $3 \text{ n}^\circ esp/cm^2$ , un valor bastante pequeño para disminuir las curvaturas por flexión o imperfecciones del acabado de la superficie del emisor, pero teniendo una mayor relación entre las potencias de radiación respecto a las de conducción, es decir, mayor transferencia de potencia útil respecto a las pérdidas por conducción, disminuyendo así el aumento indeseado de la temperatura de la célula.

Al aplicarse una presión de una atmósfera sobre la superficie superior del emisor de la nTPV, la fuerza que soportan los nano-espaciadores aumenta hasta los  $10,17 \text{ N}$  generando que se necesiten una densidad mínima de nano-espaciadores de  $673 \text{ n}^\circ esp/cm^2$  para poder soportar la carga. Esta densidad mínima es bastante alta respecto a las obtenidas en todos los casos de nTPVs de célula de germanio estudiados con resistencia de contacto empírica de  $4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 K/W$ , pero no es tan elevada para el caso de la nTPV  $SS - SiO_2 - Ge$  con las  $R_c$  calculadas para una relación de potencias mayor de un orden de magnitud (figuras 5.17 a y b) porque sus valores de  $R_c$  son mayores que la  $R_c$  empírica y por ende, disminuyen las pérdidas que provoca un aumento de las densidades.

## 5.7. Resultados de las simulaciones para unas nTPVs de nano-espaciadores de Si

Como último caso de simulación se simula la transmisión de calor en CFD por conducción para una nTPV de nano-espaciador de *Si* para un emisor de *Si*, un emisor de *SS* y un emisor de *SiC* con resistencias de contacto empíricas de  $4 \cdot 10^{-6} m^2 K/W$  por si durante el proceso de fabricación de la nTPV, específicamente la deposición del nano-espaciador, no se llegara a conseguir depositar  $SiO_2$  sino *Si*.

Tabla 5.5: Tabla de recopilación de los resultados de las simulaciones de transferencia de calor por conducción para las nTPVs con nano-espaciador de Si y emisores de *Si*, *SS* y *SiC* respecto a cada altura del nano-espaciador.

Potencias de Conducción (mW)			
Dist. (nm)	$P_{R_c-Si}$	$P_{R_c-SS}$	$P_{R_cSiC}$
100	1,7136	1,7113	1,7261
200	1,7135	1,7112	1,7260
300	1,7134	1,7110	1,7258
400	1,7132	1,7109	1,7257
500	1,7130	1,7107	1,7255
600	1,7128	1,7105	1,7252
700	1,7126	1,7103	1,7250
800	1,7125	1,7102	1,7249
900	1,7122	1,7099	1,7246
1000	1,7121	1,7098	1,7244

En primer lugar, de los resultados de las simulaciones de CFD, recopiladas en la tabla 5.5, se observa como las pérdidas de conducción son mayores para los nano-espaciadores de *Si* (figura 5.22a) que para los nano-espaciador de  $SiO_2$  (figura 5.22b) porque la conductividad del *Si* es mayor que la del  $SiO_2$ . Por lo tanto, la resistencia térmica del nano-espaciador es menos significativa y la resistencia de contacto tiene una mayor importancia.

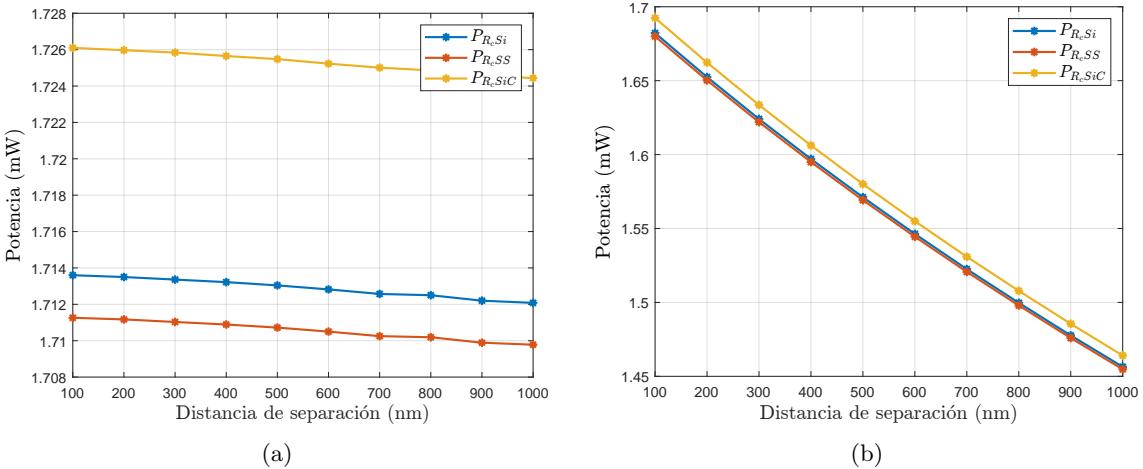


Figura 5.22: Potencias transmitidas por conducción de unas nTPVs con emisores de *Si*, *SS* y *SiC* frente a las alturas de un solo nano-espaciador en nanómetros para un nano-espaciador de *Si* (a) y para un nano-espaciador de  $SiO_2$  (b).

En segundo lugar, se observa como las curvas de las potencias de conducción

no varían tanto entre su valor máximo y valor mínimo, siendo para el caso de las nTPVs con nano-espaciadores de *Si* el que presenta la menor variación de los dos, siendo esta menor de 0,002 mW (figura 5.22a), a diferencia de los nano-espaciadores de *SiO<sub>2</sub>* cuya variación es menor a los 0,25 mW (figura 5.22b). También se observa con mayor detalle como la diferencias de las resistencias térmicas de los materiales afecta al flujo de calor, aumentando con la disminución de la resistencia térmica o aumento de la conductividad térmica, cuyos valores se mencionan en la sección 5.5.

En tercer lugar, las potencias de conducción son muy similares para ambos materiales de nano-espaciador con la altura de 100 nm porque la resistencia térmica de los nano-espaciadores disminuye considerablemente con la disminución de la distancia, por ser proporcional a ella. Esto produce que la  $R_c$  sea la principal resistencia térmica del sistema, por tal motivo, los valores de las potencias de conducción se asemejan a dicha altura del nano-espaciador.

Por último, se calculan las densidades de nano-espaciadores frente a las alturas de los nano-espaciadores para la nTPV de emisor de *SiC* y nano-espaciadores de *Si* (figura 5.23a), y se compara con las densidades de la nTPV de emisor de *SiC* pero nano-espaciadores de *SiO<sub>2</sub>* (figura 5.23b). Se observa que existe una disminución de las densidades para cada relación de potencias y todas las alturas de los nano-espaciadores, siendo la más notable a los 1000 nm de altura y relación de potencias de un orden de magnitud, pasando la densidad de ser 12  $n^{\circ}\text{esp}/\text{cm}^2$  (figura 5.23b) a ser 10  $n^{\circ}\text{esp}/\text{cm}^2$  (figura 5.23a). Esta poca variación para dos materiales distintos de nano-espaciadores se dá porque para ambos casos la nTPV tiene una  $R_c$  que es la resistencia térmica más significativa del sistema.

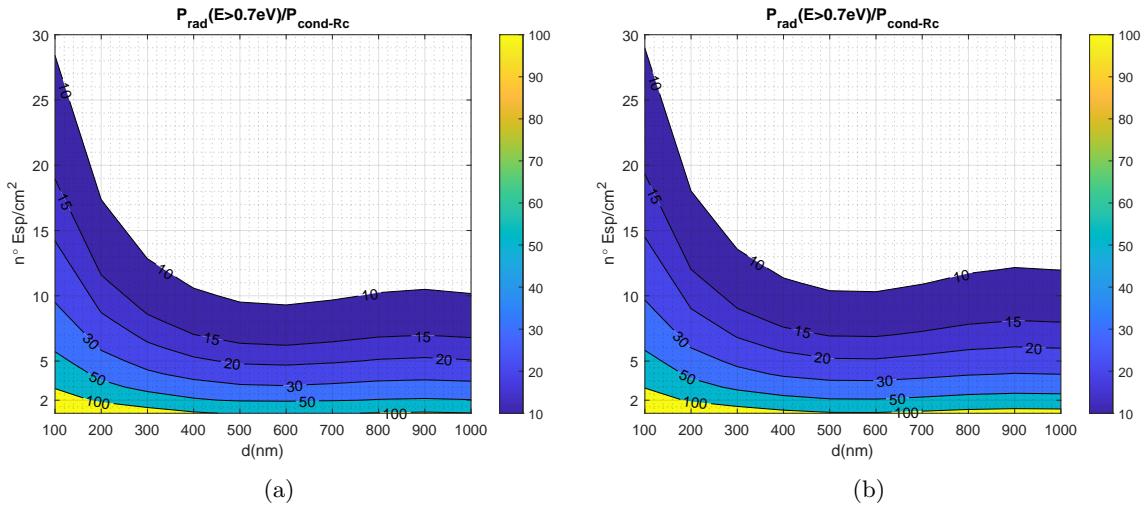


Figura 5.23: Densidades de nano-espaciadores ( $n^{\circ}\text{esp}/\text{cm}^2$ ) frente a las alturas de los nano-espaciadores para todas las relaciones de la potencia de radiación en el rango espectral de energías mayores e igual a 0.7 eV respecto a las potencias de conducción con  $R_c$  (dependientes en la densidad de nano-espaciadores) mayores a 10 para nTPVs de nano-espaciadores de *Si* (a) y *SiO<sub>2</sub>*(b) . Donde las barras de colores laterales de cada gráfica representan los colores asociados a cada uno de los valores de las relaciones de las potencias, con los contornos de las relaciones más significativas representadas en las gráficas.

# Capítulo 6

## Conclusiones

En este capítulo se presentan las conclusiones de las simulaciones realizadas y la viabilidad de cada caso estudiado, también se presentan los posibles desarrollos futuros en base a los resultados obtenidos en este trabajo.

### 6.1. Conclusiones del trabajo

En primer lugar, se concluye para el caso sencillo de una nTPV de  $Si - SiO_2 - Si$  (sección 5.2) que el aumento de la porosidad del material del nano-espaciador disminuye las pérdidas de conducción por la disminución de la conductividad térmica, obteniéndose un modelo analítico que relaciona las pérdidas por conducción con la porosidad y la altura del nano-espaciador. También se concluye que la existencia de una resistencia de contacto es de gran importancia para la disminución de las pérdidas, pero no lo suficiente para que sea viable usar una célula de Silicio porque no se obtienen buenas relaciones entre potencia de radiación útil y pérdidas.

En segundo lugar, para el caso de una nTPV de  $Si - SiO_2 - Ge$  (sección 5.3) la potencia radiada espectral son muy parecidos que para el caso de la nTPV de  $Si - SiO_2 - Si$ , por lo tanto, que al disminuir la banda energética de corte aumenta la potencia total útil, concluyéndose que podría llegar a ser viable el sistema solo con la resistencia de contacto si se consigue disminuir las imperfecciones en las superficies y las curvaturas.

Para el tercer caso, una nTPV de  $SS - SiO_2 - Ge$  (sección 5.4) fue estudiada para un sistema de recuperación de calor residual, se concluye que a pesar de tener menor potencia integrada útil de radiación que el caso anterior de nTPV de célula de germanio se pueden conseguir unas altas densidades de nano-espaciadores y grandes relaciones de potencias entre la potencia útil y las pérdidas (calor transmitido por conducción) con el aumento significativo de la resistencia de contacto, siendo esta de gran importancia para la disminución de las pérdidas a cambio de disminuir la potencia total útil y siendo importante para determinar la viabilidad del sistema.

Para el cuarto caso, de una nTPV de  $SiC - SiO_2 - Ge$  (sección 5.5) se concluye que teniendo potencias de radiación y conducción muy parecidas al caso de la nTPV de emisor de silicio pero menor densidad de nano-espaciadores por cada

relación de potencias, se puede llegar a aprovechar la frecuencia de resonancia si se es capaz de desplazarla dicha frecuencia al rango de potencia útil de radiación en un sistema multi-capas con carburo de silicio en el emisor y el receptor.

Para la densidad mínima de nano-espaciadores (sección 5.6) se concluye que solo es viable para las nTPVs con resistencia de contacto, solo siendo viable con la  $R_c$  empírica para cuando solo se considera el peso del emisor de acero inoxidable como la carga que soportan los nano-espaciadores y una densidad mínima de  $3 \text{ n}^\circ\text{esp/cm}^2$ , también es viable para las nTPV con  $R_c$  calculadas, que son tres ordenes de magnitud respecto a la empírica, con la carga del emisor y una presión de una atmósfera con una densidad mínima de  $673 \text{ n}^\circ\text{esp/cm}^2$ .

El uso de diferentes materiales para los nano-espaciadores no es tan significativo para las pérdidas por conducción y tampoco lo es el material del emisor, siempre y cuando exista una resistencia de contacto de magnitud lo suficientemente grande para que sea la principal fuente de disminución de el flujo de calor por conducción. Esto se ha demostrado en las simulaciones de la sección 5.7, donde se corrobora que existe una diferencia no tan significativa de las pérdidas por conducción a pesar de un poco mayores, afectando en poca proporción a las densidades de nano-espaciadores para todas las relaciones de potencias para cada altura de nano-espaciador.

Por último, la resistencia de contacto es de gran importancia como se ha destacado hasta ahora en la disminución de pérdidas por conducción y el aumento de las densidades de nano-espaciadores para las relaciones de potencias, pero también genera la disminución de la expansión térmica de los nano-espaciadores produciendo así que no aumente excesivamente la presión entre emisor y nano-espaciadores que evita una mayor disminución de la propia resistencia de contacto, como se da en [26], porque la mayor caída de temperatura se da en la resistencia de contacto.

## 6.2. Desarrollos futuros

A continuación se detallan los posibles desarrollos a futuro a partir de los resultados y conclusiones obtenidos durante la realización del trabajo. Estos son principalmente nuevos trabajos que van más en detalle de cada una de las propiedades más importante del sistema nTPV.

- Diseñar y desarrollar una aplicación para el cálculo de la transmisión de calor por radiación de campo cercano para sistemas de varias capas de diferentes materiales y temperaturas según las ecuaciones (2.4) y (2.5) de [27].
- Estudiar en detalle que combinación de materiales de emisor y receptor se obtiene la mayor cantidad de potencia de radiación para una célula termofotovoltaica de germanio.
- Estudiar que materiales, principalmente cerámicas por sus propiedades térmicas y altas fuerzas de compresión, se pueden utilizar para la fabricación de los nano-espaciadores con altas transmitancias para el rango espectral de potencias de

radiación de campo cercano útiles de un sistema nTPV por permitir el paso de la mayoría de la radiación útil.

- Estudiar que procesos se pueden utilizar para aumentar la resistencia de contacto entre el emisor y los nano-espaciadores mediante el tratamiento de sus superficies de contacto.
- Estudiar que procesos de tratamiento de superficies se pueden utilizar para conseguir menos curvaturas en la célula y en el emisor, y para conseguir una mayor resistencia de contacto.
- Estudiar el uso de células termo-fotovoltaicas de unión múltiple para el aumento del rango espectral de potencia de radiación de campo cercano útil y el uso de filtros o superficies traseras de reflexión.
- Estudiar los efectos de las variaciones del índice de refracción y el coeficiente de extinción de los materiales de emisor estudiados en este trabajo sobre el flujo de calor por radiación de campo cercano.
- Diseñar y fabricar un sistema nTPV con una superficie trasera reflectante(BSR) o un filtro sobre la superficie superior de la célula conectada a un regulador mppt, que sigue el punto de máxima potencia de la célula, para corroborar la validez de las ecuaciones de [27] y obtener una relación analítica de las resistencias de contacto respecto a diferentes rangos de temperatura.
- Estudiar como la expansión térmica y presión por el aumento de la temperatura se ve afectada por la resistencia de contacto, y como esta varía para un sistema nTPV de nano-espaciador de dióxido de silicio y célula de germanio.



## Apéndice A

# Procedimientos seguidos para la realización de las simulaciones de radiación de campo cercano

En este apéndice se detallan los pasos genéricos seguidos para la realización de las simulaciones de radiación de campo cercano y la obtención de los resultados de las potencias integradas en un respectivo rango espectral utilizando la aplicación **calculadora de campo cercano**, descrita en la sección 3.2.6.

### A.1. Procedimientos genéricos

Existen solo cuatro posibles casos de simulaciones de transmisión de calor por radiación de campo cercano utilizando la aplicación, estos casos son los siguientes:

- Una distancia de separación y un par de materiales, uno para el emisor y otro para el receptor.
- Rango de distancias de separación y un par de materiales.
- Una distancia de separación y varias combinaciones de materiales.
- Rango de distancias de separación y varias combinaciones de materiales.

Los procedimientos para la realización de las simulaciones de transmisión de calor por radiación de campo cercano siguen el mismo orden de ejecución genérico. Estos procedimientos son:

- Selección de la temperatura del emisor, que para este trabajo se mantiene a 1073K (800°C).
- Selección de las combinaciones de materiales a simular.
- Selección del rango de distancias a simular.
- Hacer clic sobre el botón **Calculate**.

## A.2. Distancia fija y un par de materiales

Este caso consiste en una sola distancia de separación, un material para el emisor y otro material para el receptor. Para proceder con la simulación se siguen los siguientes pasos:

1. Seleccionar el material de la placa superior en **Superior plate** (figura A.1b).
2. Seleccionar el material de la placa inferior en **Inferior plate**.
3. Seleccionar la distancia (figura A.1a).

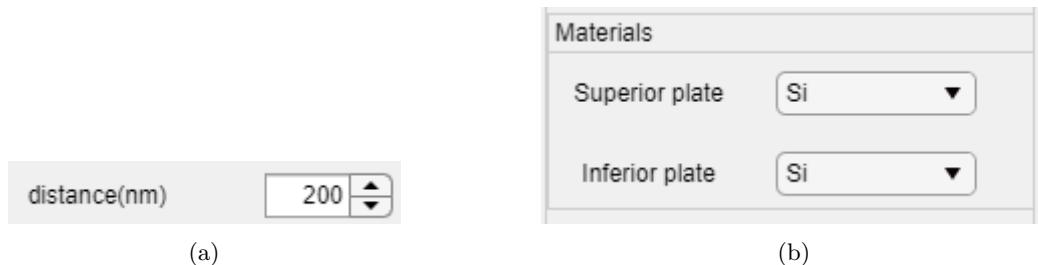


Figura A.1: Seleccionador de una distancia de separación en nanometros (a) y seleccionar de los materiales de emisor (Superior plate) y receptor (Inferior plate) (b) de la calculadora de campo cercano.

4. Hacer click sobre el botón **Calculate**.
5. Esperar que el indicador de estado pase de *Running...*, color rojo del indicador (figura A.2b), a *StdBy*, color verde del indicador (figura A.2c), es decir, esperar que termine la simulación.



Figura A.2: Indicadores del estado actual del sistema. (a) Indicador del estado **Changed** o estado de cambio, se activa cuando se produce algún cambio en los datos seleccionados para simular. (b) Indicador del estado **Running** o corriendo, se activa cuando estando en el estado **Changed** se hace clic al botón **Calculate** y corre la simulación. (c) Indicador del estado **StdBy**, se activa cuando termina la simulación, avisando que está a la espera de algún cambio.

## A.3. Rango de distancias y un par de materiales

Este caso de simulación consiste en un rango de distancias de separación de 100 nm de paso y la combinación de un material del emisor con otro material del receptor. Para proceder con la simulación se siguen los siguientes pasos:

1. Seleccionar el material de la placa superior en **Superior plate** (figura A.1b).
2. Seleccionar el material de la placa inferior en **Inferior plate**.
3. Hacer click sobre el checkbox **Distance Range** (figura A.3a).

4. Hacer click sobre el botón **set** del **Distance Range**, que produce que aparezca la ventana de la figura A.3b.
5. Seleccionar el rango de distancias deseado o el checkbox **Full Range**, según lo que se desee. Para este trabajo se selecciona el checkbox **Full Range**.
6. Hacer click en **Accept** de la nueva ventana.
7. Hacer click sobre el botón **Calculate** y esperar a que termine de ejecutarse la simulación.



Figura A.3: (a) Casilla para la selección de la opción de simular un rango de distancias. (b) Ventana para la selección del rango de distancias a simular.

#### A.4. Distancia fija y varios materiales

Este caso de simulación consiste en una sola distancia de separación y varias combinaciones de los materiales del emisor con los del receptor. Para proceder con la simulación se siguen los siguientes pasos:

1. Hacer click sobre el checkbox **Materials Range** (figura A.4b).
2. Hacer click sobre el botón **set** del **Materials Range**, que produce que aparezca la ventana de la figura A.4a.
3. Seleccionar los materiales para la cara superior (UpFace) (figura A.4a).
4. Seleccionar los materiales para la cara inferior (DownFace).
5. Hacer clic en **Accept** de la ventana emergente.
6. Seleccionar la distancia (figura A.1a).
7. Hacer click sobre el botón **Calculate** y esperar a que termine de ejecutarse la simulación.



Figura A.4: (a) Ventana para la selección de las combinaciones de materiales a simula, siendo **UpFace** el emisor y **DownFace** la célula. (b) Casilla para la selección de la opción de simular una combinación de materiales.

## A.5. Rango de materiales y varios materiales

Este caso de simulación consiste en un rango de distancias de separación de 100 nm de paso y varias combinaciones de materiales del emisor con los del receptor. Para proceder con la simulación se siguen los siguientes pasos:

1. Hacer click sobre el checkbox **Materials Range** (figura A.4b).
2. Hacer click sobre el checkbox **Distance Range** (figura A.3a).
3. Hacer click sobre el botón **set** del **Materials Range**, que produce que aparezca la ventana de la figura A.4a.
4. Seleccionar los materiales para la cara superior (UpFace) (figura A.4a).
5. Seleccionar los materiales para la cara inferior (DownFace).
6. Hacer clic en **Accept** de la ventana emergente.
7. Hacer click sobre el botón **set** del **Distance Range**, que produce que aparezca la ventana de la figura A.3b.
8. Seleccionar el rango de distancias deseado o el checkbox **Full Range**, según lo que se desee. Para este trabajo se selecciona el checkbox **Full Range**.
9. Hacer click en **Accept** de la nueva ventana.
10. Hacer click sobre el botón **Calculate** y esperar a que termine de ejecutarse la simulación.

## A.6. Integración de la potencia en un rango espectral

Para proceder a la integración de las potencias obtenidas de las simulaciones, se siguen los siguientes pasos:

1. Ir a la pestaña de **Potencia**.

2. Introducir el rango de longitudes de onda para calcular la potencia por unidad de área, siendo elegido desde el mínimo hasta  $1.8 \mu m$  que es el rango de longitudes de onda que absorbe la célula de Ge (figura A.5).
3. Hacer clic en el botón **Graph** para calcular y graficar las potencias (figura A.5).

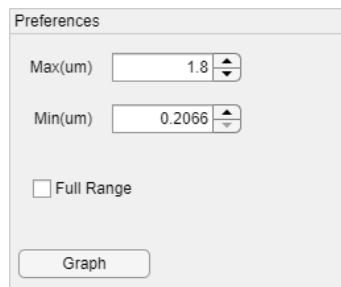
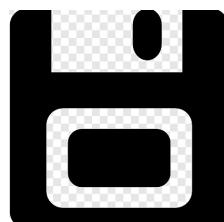


Figura A.5: Preferencias para el cálculo de la potencia

## A.7. Guardado de los datos

Para la extracción o guardado de los resultados obtenidos de las simulaciones, es decir, las potencias de transmisión de calor por radiación. Para guardar todos los datos disponibles de la última simulación ejecutada, las potencias frente a la longitud de onda y las potencias integradas en un rango espectral, se hace clic sobre el botón de **guardar todos**, que se observa en la figura A.6b.



(a) Botón de guardar actual



(b) Botón de guardar todos los resultados

Figura A.6: (a) Botón de guardar los resultados obtenidos de los cálculos o la simulación, dependiendo de la pestaña que se encuentre el usuario de la calculadora de campo cercano. (b) Botón de guardar todos los resultados obtenidos de los cálculos y simulación.

Para guardar exclusivamente las potencias frente a la longitud de onda, se procede a dicha pestaña y hacer clic sobre el botón de **guardar**, que se observa en la figura A.6a. Y para guardar exclusivamente las potencias integradas en un rango espectral, se hace clic sobre el mismo botón **guardar**.



## Apéndice B

# Procedimiento para la realización del modelado 3D

Para la realización del modelado 3D del sistema a simular en CFD y de sus componentes se sigue el siguiente procedimiento, detallado paso a paso.

1. Crear las bases cuadradas con la longitud de lado respectiva, 10m para emisor o célula y 3cm para el nano-espaciador en la escala del modelo 3D en Inventor.
2. Extrudir el prisma la longitud correspondiente, 2m para el emisor/célula y  $h_0$  para el nano-espaciador, siendo  $h$  un valor inicial cualquier en el rango de 1mm a 10mm.
3. Crear un ensamblaje de emisor-espaciador-célula, estando la base del nano-espaciador en el centro de las bases de los otros dos componentes (figura B.1).
  - a) Agregar el nano-espaciador y los dos prismas de 10m de lado.
  - b) Renombrar los prismas de 10m de lado, una siendo emisor y la otra célula, para así diferenciarlas.
  - c) Obtener el centro de la cara superior de la célula, mediante un dibujo con dos rectas secantes que van de una esquina a otra (figura B.1c).
  - d) Aplicar una restricción con la opción **Mate** de separación nula entre la cara inferior del nano-espaciador con el centro de la cara superior de la célula, es decir, las caras entran en contacto si la distancia de separación es nula (figura B.1c).
  - e) Aplicar una restricción **Mate** de separación nula entre la cara inferior del emisor y la cara superior del nano-espaciador.
  - f) Aplicar una restricción **Flush** de separación nula a una cara lateral del emisor y una cara lateral de la célula.
  - g) Repetir el paso anterior para las caras conjuntas, siendo el resultado final el de la figura B.1a.

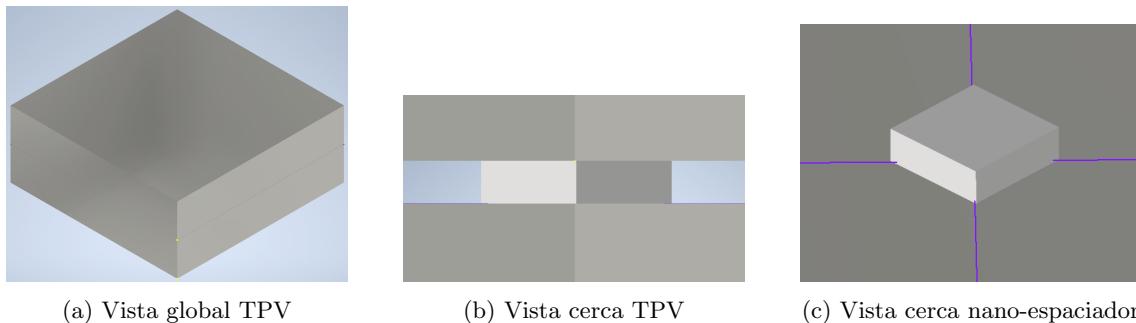


Figura B.1: Vistas del sistema TPV. (a) Vista de lejos del sistema completo de la TPV. (b) Vista del sistema TPV de cerca desde un borde. (c) Vista del nano-espaciador colocado sobre el centro de una cara de la célula.

4. Guardar el ensamblaje.
5. Usar el **Active Model Assessment Tool**, que se encuentra en la pestaña de simulaciones, para generar el modelo o estudio de simulación de CFD.
6. Al abrirse CFD hacer clic en *Transfer to Set Up*, dar un nombre y lanzar.
7. Guardar el modelo o estudio de CFD .
8. Ir al ensamblaje en Inventor.
9. Hacer clic derecho sobre el ícono del objeto correspondiente al nano-espaciador en el panel **model** y hacer clic en editar.
10. Hacer clic derecho sobre la extrusión y seleccionar la opción de editar característica (**Edit Feature**).
11. Modificar la altura del nano-espaciador y al terminar hacer clic en **Return** .
12. Repetir desde el paso 5 al 11, excepto en la última iteración que es hasta el paso 7, incluido.

## Apéndice C

# Procedimiento para la realización de las simulaciones de CFD

Para la realización de las simulaciones de transmisión de calor por conducción en CFD se sigue el siguiente procedimiento, que se encuentra detallado paso a paso.

1. Abrir el modelo o estudio correspondiente de simulación en CFD.
2. Seleccionar el emisor y cambiar el material por defecto por el que se va a simular a escala.
3. Seleccionar el entorno del material del emisor como variable.
4. Seleccionar la célula y cambiar el material por defecto por el que se va a simular a escala.
5. Seleccionar el entorno del material de la célula como variable.
6. Hacer zoom sobre el nano-espaciador, seleccionarlo y cambiar el material por defecto por el  $SiO_2$  a escala.
7. Seleccionar el entorno del material del nano-espaciador como variable.
8. **En el caso que la resistencia de contacto no sea nula:**
  - a) Esconder el emisor.
  - b) Seleccionar el selector de superficies.
  - c) Seleccionar la superficie superior del nano-espaciador, es decir, la superficie que hace contacto con el emisor.
  - d) Cambiar el material por defecto por la resistencia de contacto a escala.
  - e) Seleccionar el selector de volúmenes.
  - f) Mostrar el emisor.
9. Seleccionar la cara superior del emisor y agregar como condición de contorno una temperatura constante de 800°C.
10. Seleccionar la cara inferior de la célula y agregar como condición de contorno una temperatura constante de 25°C.
11. Seleccionar la función de mallado.



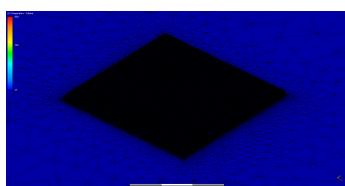
(a) Panel principal



(b) Panel de resultados

Figura C.1: (a) Panel de las herramientas utilizadas para aplicar materiales, condiciones de contorno, lanzar simulaciones, seleccionar el selector de superficies y volúmenes. (b) Paneles de las herramientas utilizadas para la extracción de resultados de las simulaciones de transmisión de calor por conducción.

12. Aplicar un mallado de tamaño de 0.01 o más al nano-espaciador, el valor del mallado varía según la altura del nano-espaciador, aumentando al aumentar la altura del nano-espaciador (figura C.2).
13. Aplicar un mallado de tamaño entre 40 y 60 a los demás componentes de la TPV.



(a) Mallado del nano-espaciador de 100nm



(b) Mallado del nano-espaciador de 100nm de cerca



(c) Mallado del nano-espaciador de 1000nm

Figura C.2: (a) Mallado del nano-espaciador de 100nm, con tamaño de malla de 0.01. (b) Mallado del nano-espaciador de 100nm visto de cerca. (c) Mallado del nano-espaciador de 1000nm, con tamaño de malla de 0.1.

14. Hacer clic en **Solve** (figura C.1a).
15. Seleccionar en la pestaña **Physics** la casilla de **Heat transfer** (C.3b) .
16. Ir a la pestaña **Control** (figura C.3a).
17. Poner el guardado de los resultados de la simulación a la mitad del número de iteraciones.
18. Hacer unas 10 a 14 iteraciones asegurándose que continua desde la iteración cero.
19. Correr la simulación dando click al botón de **Solve** dentro de la ventana del lanzar la simulación.
20. Esperar a que la simulación termine. Un mensaje aparecerá en la ventana de salidas de que la simulación ha finalizado.
21. **Extraer los datos de la simulación en un archivo CSV.**
  - a) Abrir la herramienta **Wall Calculator** con un clic (figura C.1b).
  - b) Seleccionar las casillas de potencia y temperatura.
  - c) Seleccionar la opción de superficie del **Model entity selection**.

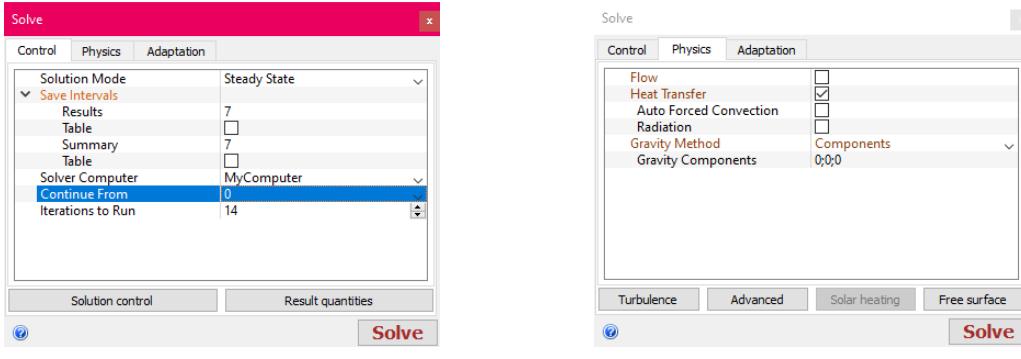


Figura C.3: (a) Panel de control de la ventana del Solver.(b) Panel de las propiedades físicas de la ventana del Solver.

- d) Seleccionar la superficie superior del emisor y la inferior de la célula, aparecerá los números correspondientes a dichas superficies en el **Wall Calculator** (figura C.4a).
- e) Hacer clic en **Calculate**, esto nos llevará a la pestaña de **Output**.
- f) Hacer clic en **Write to file** y guardar el archivo de salida que contiene las potencias y temperaturas medias de las superficies seleccionadas (figura C.4b).

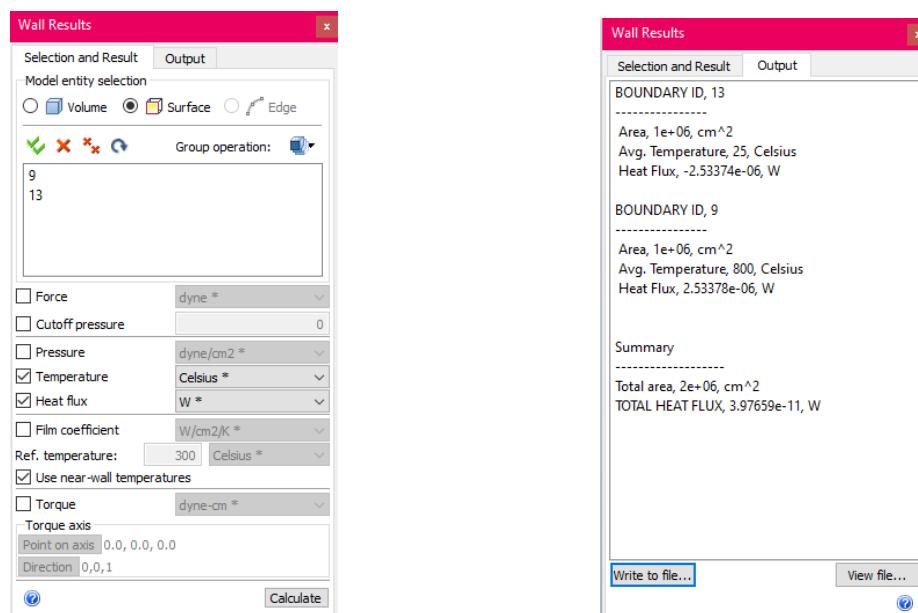


Figura C.4: (a) Pestaña de selección y resultados del **Wall Calculator**. (b) Pestaña de salida del **Wall Calculator**.

22. Repetir los pasos anteriores para cada combinación de materiales y resistencias de contacto sin tener que volver a introducir las condiciones de contorno o volver a configurar el mallado.
23. Repetir los pasos anteriores para cada altura del nano-espaciador.



## Apéndice D

### Lista de siglas

<b>Entrada</b>	<b>Descripción</b>
$E_g$	energía del ancho de banda
$R_c$	Resistencia de contacto
$R_{cCalInt}$	Resistencia de contacto calculada intermedia
$R_{cCalMax}$	Resistencia de contacto calculada máxima
$R_{cCal}$	Resistencia de contacto calculada
$R_{cEmp}$	Resistencia de contacto empírica
$V_{OC}$	tensión de circuito abierto
BG	ancho de banda
BSR	Capa trasera reflectante
ICTPV	Células termofotovoltaicas interbandas en cascada
IES	Instituto de Energía Solar
NF-TPV	Termo-fotovoltaico de campo cercano
NFTPV	Termo-fotovoltaico de campo cercano
nTiPV	Dispositivo termoiónico-fotovoltaico de campo cercano
nTPV	Termo-fotovoltaico de campo cercano
PV	fotovoltaico
SS	Acero inoxidable
TEG	Generador Termoeléctrico
TFG	Trabajo de Fin de Grado
TIC	Termoiónico
TPV	Termo-fotovoltaico

## Apéndice E

# Tabla de Símbolos

Símbolo	Descripción	Unidades
$BeO$	Óxido de berilio	
$Ge$	Germanio	
$H_c$	Dureza Vickers del material más duro	$VH$
$K_s$	Media armónica de la conductividad térmica $k_s = 2 \cdot k_1 \cdot k_2 / (k_1 + k_2)$	falta
$SiO_2$	Dióxido de silicio	
$\Delta T$	Diferencia de temperatura	$K$
$\omega_{res}$	Frecuencia de resonancia	$rad/s$
$\rho$	Densidad	$kg/m^3$
$\sigma$	Combinación RMS de la rugosidad $\sigma = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}$	falta
$h_c$	Conductancia térmica de contacto	$W/m^2K$
$h_{rad}$	Coeficiente de transferencia de calor por radiación	$W/m^2K$
$k_i$	Conductividad térmica del material i	$W/m \cdot k$
$M$	Masa	$kg$
$P$	Presión	$Pa$
$P$	Presión de contacto	$Pa$
$Q$	Potencia calorífica transmitida por conducción	$W$
$SiC$	Carburo de silicio	
$Si$	Silicio	
$k$	Coeficiente de extinción	
$m$	Combinación RMS de la media absoluta de la pendiente de la rugosidad $m = \sqrt{m_1^2 + m_2^2}$	falta
$n$	Índice de refracción	

# Bibliografía

- [1] M. para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico del Gobierno de España, *La Energía en España*. Solana e hijos, A.G., S.A.U, 2019 ed., 2019. Accedido: 29 de agosto de 2022.
- [2] M. Papapetrou, G. Kosmadakis, A. Cipollina, U. La Commare, and G. Micale, “Industrial waste heat: Estimation of the technically available resource in the eu per industrial sector, temperature level and country,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 138, pp. 207–216, 2018.
- [3] N. Jaziri, A. Boughamoura, J. Müller, B. Mezghani, F. Tounsi, and M. Ismail, “A comprehensive review of thermoelectric generators: Technologies and common applications,” *Energy Reports*, vol. 6, pp. 264–287, 2020. SI:Energy Storage - driving towards a clean energy future.
- [4] V. Adalid, “A review on thermoelectric devices,” *The Journal of Undergraduate Research at the University of Illinois at Chicago*, vol. 9, 08 2016.
- [5] Z. Dashevsky, A. Jarashneli, Y. Unigovski, B. Dzunzda, F. Gao, and R. Z. Shneck, “Development of a high perfomance gas thermoelectric generator (teg) with possible use of waste heat,” *Energies*, vol. 15, no. 11, 2022.
- [6] W. Zhu, G. Zheng, S. Cao, and H. He, “Thermal conductivity of amorphous SiO<sub>2</sub> thin film: A molecular dynamics study,” *Scientific Reports*, vol. 8, p. 10537, July 2018.
- [7] T. Inoue, T. Koyama, D. D. Kang, K. Ikeda, T. Asano, and S. Noda, “One-Chip Near-Field Thermophotovoltaic Device Integrating a Thin-Film Thermal Emitter and Photovoltaic Cell,” *Nano Lett.*, vol. 19, pp. 3948–3952, June 2019. Publisher: American Chemical Society.
- [8] R. S. DiMatteo, P. Greiff, S. L. Finberg, K. A. Young-Waithe, H. K. H. Choy, M. M. Masaki, and C. G. Fonstad, “Micron-gap thermophotovoltaics (mtpv),” *AIP Conference Proceedings*, vol. 653, no. 1, pp. 232–240, 2003.
- [9] T. Burger, C. Sempere, B. Roy-Layinde, and A. Lenert, “Present efficiencies and future opportunities in thermophotovoltaics,” *Joule*, vol. 4, no. 8, pp. 1660–1680, 2020.
- [10] R. Hamlen, H. Christopher, and S. Gilman, “U.s. army battery needs-present and future,” *IEEE Aerospace and Electronic Systems Magazine*, vol. 10, no. 6, pp. 30–33, 1995.

- [11] G. Guazzoni and S. Matthews, “A retrospective of four decades of military interest in thermophotovoltaics,” *AIP Conference Proceedings*, vol. 738, no. 1, pp. 3–12, 2004.
- [12] D. Wilt, D. Chubb, D. Wolford, P. Magari, and C. Crowley, “Thermophotovoltaics for space power applications,” *AIP Conference Proceedings*, vol. 890, no. 1, pp. 335–345, 2007.
- [13] W. E. S. W. A. Rashid, P. J. Ker, M. Z. B. Jamaludin, M. M. A. Gamel, H. J. Lee, and N. B. A. Rahman, “Recent development of thermophotovoltaic system for waste heat harvesting application and potential implementation in thermal power plant,” *IEEE Access*, vol. 8, pp. 105156–105168, 2020.
- [14] M. Francoeur, M. P. Mengüç, and R. Vaillon, “Near-field radiative heat transfer enhancement via surface phonon polaritons coupling in thin films,” *Applied Physics Letters*, vol. 93, no. 4, p. 043109, 2008.
- [15] H. Yu, Z. Ikonic, D. Indjin, and R. Kelsall, “The effect of interface roughness on spectral efficiency of thermophotovoltaics with multi-layer filters,” *Optik*, vol. 257, p. 168663, 2022.
- [16] A. Datas and R. Vaillon, “Thermionic-enhanced near-field thermophotovoltaics for medium-grade heat sources,” *Applied Physics Letters*, vol. 114, no. 13, p. 133501, 2019.
- [17] M. Campbell, T. Celenza, F. Schmitt, J. Schwede, and I. Bargatin, “Progress toward high power output in thermionic energy converters,” *Advanced Science*, vol. 8, 05 2021.
- [18] G. P. Forcade, C. E. Valdivia, S. Lu, S. Molesky, A. W. Rodriguez, J. J. Krich, R. St-Gelais, and K. Hinzer, “Modeling efficiency of inas-based near-field thermophotovoltaic devices,” in *2021 International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices (NUSOD)*, pp. 53–54, 2021.
- [19] K. Ito, A. Miura, H. Iizuka, and H. Toshiyoshi, “Parallel-plate submicron gap formed by micromachined low-density pillars for near-field radiative heat transfer,” *Applied Physics Letters*, vol. 106, no. 8, p. 083504, 2015.
- [20] W. Huang, L. Li, J. A. Massengale, R. Q. Yang, T. D. Mishima, and M. B. Santos, “Multistage interband cascade thermophotovoltaic devices with 0.2 ev bandgap,” in *2019 IEEE 46th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)*, pp. 2315–2318, 2019.
- [21] J. Song, J. Han, M. Choi, and B. J. Lee, “Modeling and experiments of near-field thermophotovoltaic conversion: A review,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 238, p. 111556, 2022.
- [22] A. LaPotin, K. L. Schulte, M. A. Steiner, K. Buznitsky, C. C. Kelsall, D. J. Friedman, E. J. Tervo, R. M. France, M. R. Young, A. Rohskopf, S. Verma, E. N. Wang, and A. Henry, “Thermophotovoltaic efficiency of 40 %,” *Nature*, vol. 604, pp. 287–291, Apr. 2022.

- [23] F. Chen, X. Liu, Y. Tian, J. Goldsby, and Y. Zheng, “Refractory all-ceramic thermal emitter for high-temperature near-field thermophotovoltaics,” *Energies*, vol. 15, no. 5, 2022.
- [24] M. Francoeur, M. P. Mengüç, and R. Vaillon, “Spectral tuning of near-field radiative heat flux between two thin silicon carbide films,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 43, p. 075501, feb 2010.
- [25] J. I. Watjen, B. Zhao, and Z. M. Zhang, “Near-field radiative heat transfer between doped-si parallel plates separated by a spacing down to 200 nm,” *Applied Physics Letters*, vol. 109, no. 20, p. 203112, 2016.
- [26] F. Milanez, J. Culham, and M. Yovanovich, “Experimental thermal contact conductance of bead-blasted ss 304 at light loads,” *Journal of Thermophysics and Heat Transfer - J THERMOPHYS HEAT TRANSFER*, vol. 17, pp. 534–536, 10 2003.
- [27] M. Francoeur, M. Pinar Mengüç, and R. Vaillon, “Solution of near-field thermal radiation in one-dimensional layered media using dyadic green’s functions and the scattering matrix method,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 110, no. 18, pp. 2002–2018, 2009.
- [28] D. G. Cahill, “Thermal conductivity measurement from 30 to 750 k: the 3w method,” *Review of Scientific Instruments*, vol. 61, no. 2, pp. 802–808, 1990.
- [29] J. Jyothi, A. Biswas, P. Sarkar, A. Soum-Glaude, H. S. Nagaraja, and H. C. Barshilia, “Optical properties of TiAlC/TiAlCN/TiAlSiCN/TiAlSiCO/TiAlSiO tandem absorber coatings by phase-modulated spectroscopic ellipsometry,” *Applied Physics A*, vol. 123, p. 496, June 2017.