



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: Ingeniería Eléctrica, Electrónica, Automática y Física Aplicada

Cotutor: 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

Cotutor: 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

Resumen

Este proyecto se resume en.....

Palabras clave: palabraclave1, palabraclave2, palabraclave3.

Abstract

In this project...

Keywords: keyword1, keyword2, keyword3.

Índice general

Agradecimientos	v
Resumen	vii
Abstract	ix
Índice	xii
1. Introducción	1
1.1. Motivación del proyecto	1
1.2. Objetivos	4
1.3. Estructura del documento	5
2. Estado del arte	7
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
3. Materiales y Herramientas	15
3.1. Materiales	15
3.1.1. Nano-espaciador	15
3.1.2. Célula	15
3.1.3. Emisor	16
3.2. Herramientas	17
3.2.1. Granta EduPack 2021 R2	17
3.2.2. Refractive Index	18
3.2.3. Autodesk Inventor Professional 2021	18
3.2.4. Autodesk CFD	18
3.2.5. MATLAB	19
3.2.6. Calculadora de campo cercano	20
4. Métodos	23
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	26
4.3.1. Para la radiación de campo cercano	26
4.3.2. Para la conducción térmica	29
5. Resultados y discusión	35
5.1. Validación de las simulaciones de CFD	35
5.2. Resultados de las simulaciones para una nTPV de Si-SiO ₂ -Si	36
5.2.1. Efectos de la resistencia de contacto sobre la conducción	36
5.2.2. Efecto de la porosidad sobre la conducción	37
5.2.3. Radiación de campo cercano	38
5.3. Resultados de las simulaciones para una nTPV de Si-SiO ₂ -Ge	41
5.3.1. Simulaciones de CFD	41
5.3.2. Radiación de campo cercano	42
5.3.3. Densidad de nano-espaciadores	43
5.4. Resultados de las simulaciones para una nTPV de SS-SiO ₂ -Ge	46
5.4.1. Simulaciones de CFD	46
5.4.2. Radiación de campo cercano	48
5.4.3. Densidad de nano-espaciadores	49
5.5. Resultados de las simulaciones para una nTPV de SiC-SiO ₂ -Ge	52
5.5.1. Simulaciones de CFD	52
5.5.2. Radiación de campo cercano	53
5.5.3. Densidad de nano-espaciadores	54
5.6. Densidad de nano-espaciadores para soportar la carga	56
5.7. Resultados de las simulaciones para unas nTPVs de nano-espaciadores de Si	57
6. Conclusiones	59
6.1. Conclusiones del trabajo	59
6.2. Desarrollos futuros	60
A. Anexo	61
A.1. Lorem ipsum	61
Bibliografía	63

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 mate- riales de emisor para un rango de longitudes de onda desde aproxi- madamente $0.2 \mu\text{m}$ hasta $1.8 \mu\text{m}$ (0.7 eV) con distancias de separación de 100nm y 1000nm según las ecuaciones de [10] calculadas a partir de las ecuaciones (2.4) y (2.5).	16
3.2. Icono de Autodesk Inventor Professional 2021	18
3.3. Icono de Autodesk CFD	19
3.4. Icono de MATLAB	19
3.5. Pestaña <i>Potencia Radiada</i> de la calculadora de campo cercano	20
3.6. (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
3.7. Pestaña de la Potencia	21
3.8. Pestaña de los datos de n y k de los materiales disponibles	22
4.1. (a) Casilla para la selección de la opción de simular un rango de distancias. (b) Casilla para la selección de la opción de simular una combinación de materiales.	27
4.2. (a) Ventana para la selección del rango de distancias a simular. (b) Ventana para la selección de las combinaciones de materiales a simula, siendo UpFace el emisor y DownFace la célula.	27

4.3. 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.	28
4.4. Preferencias para el cálculo de la potencia	28
4.5. (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.	28
4.6. 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.	30
4.7. (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.	31
4.8. (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.	31
4.9. (a) Panel de control de la ventana del Solver.(b) Panel de las propiedades físicas de la ventana del Solver.	32
4.10. (a) Pestaña de selección y resultados del Wall Calculator .(b) Pestaña de salida del Wall Calculator	33
5.1. Efectos de la resistencia de contacto sobre el flujo de calor por conducción	36
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).	37
5.3. Efectos de la porosidad del nano-espaciador sobre el flujo de calor por conducción	37
5.4. Potencia de radiación monocromática para dos placas gruesas planas de <i>Si</i> en todo el rango espectral frente a diferentes distancias de separación de las placas (d) en metros.	38
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.	39

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 1cm^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.	39
5.7. Potencias de conducción para un sistema nTPV de <i>Si</i> – SiO_2 – <i>Ge</i> 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.	41
5.8. Potencias de radiación monocromática por campo cercano para un sistema nTPV <i>Si</i> – 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).	42
5.9. Potencias por unidad de área para la radiación de campo cercano para el sistema <i>Si</i> – SiO_2 – <i>Ge</i> frente a las diferentes alturas del nano-espaciador	42
5.10. Densidad de nano-espaciadores por 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 (dependencia 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 representan los colores asociados a cada uno de los valores de las relaciones de las potencias, con los contornos de las relaciones más significativas en los gráficos.	43
5.11. Densidad de nano-espaciadores por cm^2 frente a las alturas de los nano-espaciadores para todas las relaciones de la potencia de radiación en todo el rango espectral respecto a las potencias de conducción (dependencia en la densidad de nano-espaciadores) mayores a 10 para el caso sin R_c (a) y para el caso con R_c (b). Donde las barras de colores laterales representan los colores asociados a cada uno de los valores de las relaciones de las potencias, con los contornos de las relaciones más significativas en los gráficos.	44
5.12. Potencias por conducción para una nTPV <i>SS</i> – 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.	46
5.13. Potencias por conducción para una nTPV <i>SS</i> – SiO_2 – <i>Ge</i> con R_c calculadas a partir de las conductancias térmicas [21], para una R_c máxima de $5,5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2\text{K/W}$ (b) y una R_c intermedia $2,75 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2\text{K/W}$ (a) frente a las alturas de un nano-espaciadores.	47
5.14. Potencias por radiación integradas en el rango espectral de energía mayor a 0.7eV para un emisor de <i>Fe</i> y un emisor de <i>SS</i> con receptor de <i>Ge</i> frente a las diferentes distancias de separación de las placas.	48

- | | |
|---|----|
| 5.15. (a) Potencia radiada monocromática por campo cercano para un emisor de <i>SS</i> y una célula de <i>Ge</i> . (b) Potencia radiada para un rango de longitudes de onda cuya energía es mayor a los 0.7eV ($\sim 1,8 \mu m$). | 49 |
| 5.16. Densidades de nano-espaciadores para todas las relaciones de las potencias de radiación respecto a las conducción para un emisor de <i>SS</i> 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. | 49 |
| 5.17. Densidades de nano-espaciadores para todas las relaciones de las potencias de radiación respecto a las conducción para un emisor de <i>SS</i> 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. | 50 |
| 5.18. (a) Potencias de 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 | 52 |
| 5.19. (a) Potencias integradas en el rango espectral de energía mayor a 0.7eV para un emisor de <i>SiC</i> y un emisor de <i>Si</i> frente a las distancias de separación entre emisor y receptor. (b) Potencia de radiación monocromática para un emisor de <i>Si</i> y <i>SiC</i> con un receptor de <i>Ge</i> para una distancia de separación de 100nm frente longitudes de onda. | 53 |
| 5.20. Potencias de radiación monocromática frente a las longitudes de onda para un sistema de <i>SiC</i> – <i>SiC</i> frente a diferentes distancias de separación entre placas. | 53 |
| 5.21. 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 (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. | 54 |
| 5.22. Potencias de 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>SiO₂</i> (b). | 57 |

- 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 *Si* (a) y *SiO₂*(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. 58

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 $4 \cdot 10^{-6} m^2 K/W$ [17], y sin R_c pero con las proporciones de las porosidades de [28] para un 25 % y un 50 %	40
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 $Si - SiO_2 - Ge$	45
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	51
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 SS	55
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	57

Capítulo 1

Introducción

En este capítulo no deben faltar los siguientes apartados:

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.

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.

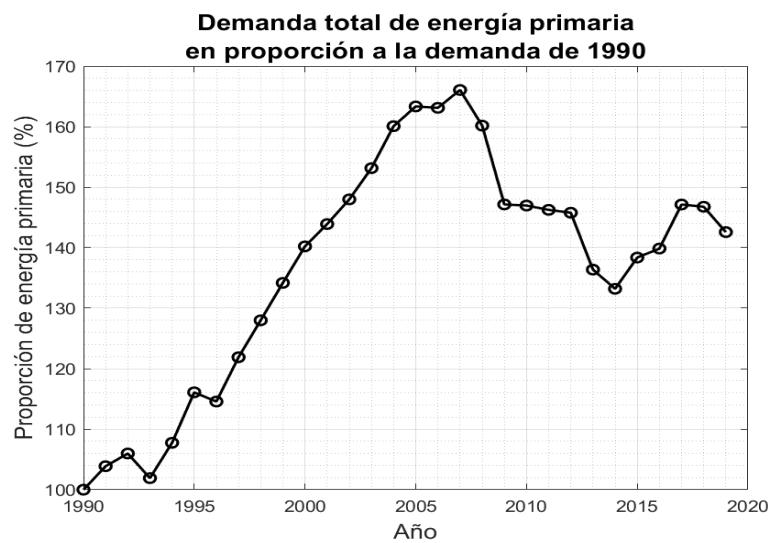


Figura 1.1: Representación gráfica de la relación entre la demanda total de energía primaria anual de 1990 hasta 2019 en España. *Fuente obtención de datos: Ministerio para la transición ecológica y el reto demográfico de España.*

Dicha energía se puede dividir en diferentes categorías según el sector que la consume o la fuente de dicha energía. 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). 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 [22].

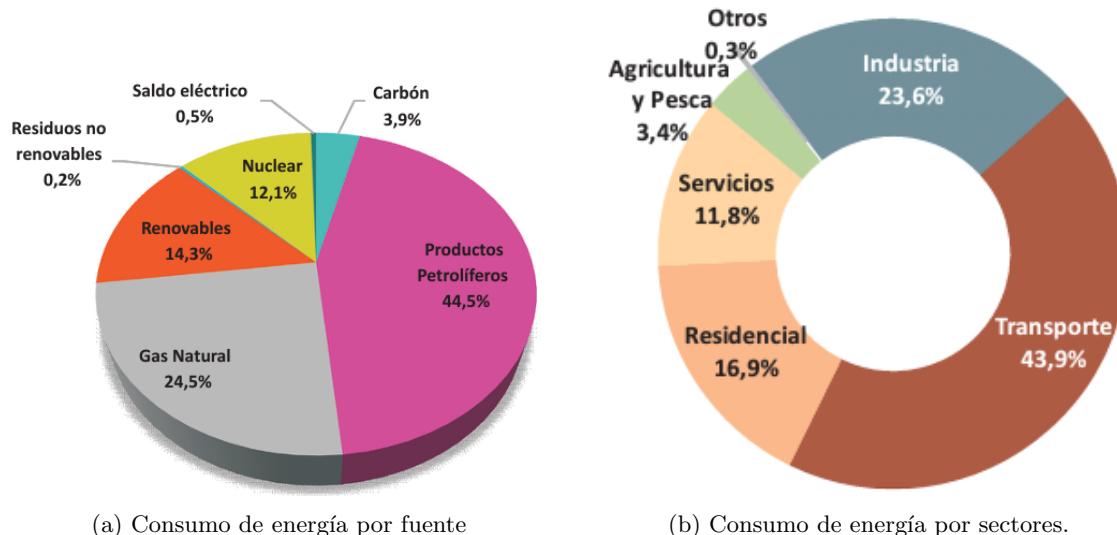


Figura 1.2: Desglose del consumo de energía primaria en España 2019 por fuente de energía(a). Consumo de energía final por sectores en el año 2019 en España(b). *Fuente: Ministerio para la transición ecológica y el reto demográfico de España.*

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 u energía.

El aprovechamiento del calor residual para el calentamiento de otro fluido se utiliza en la industria, por ejemplo, un dispositivo llamado economizador que se usa en calderas para pre-calentar el fluido, mejorando el rendimiento térmico, o en el sector residencial que aprovecha el calor obtenido en el 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, termoíónicos, entre otros.

La conversión termo-eléctrica 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.

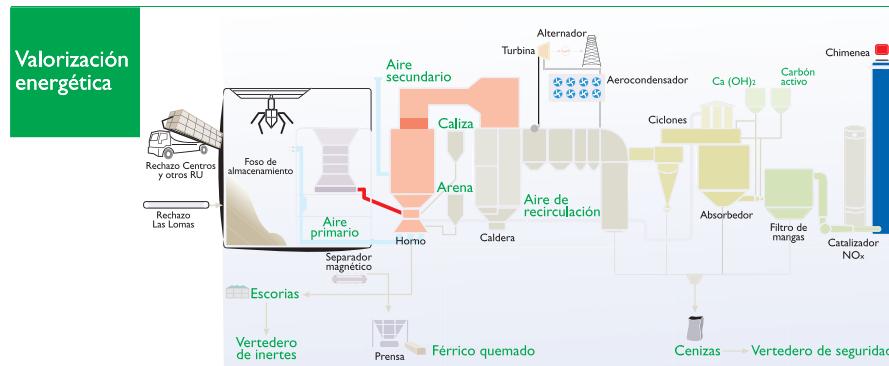


Figura 1.3: Planta de valorización energética del Centro Las Lomas del Parque Tecnológico de Valdemingómez, donde se aprovecha los gases a alta temperatura para producir vapor de agua en la caldera para mover unas turbinas conectadas a generadores para producir electricidad. *Fuente: Ayuntamiento de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

La principal desventaja de 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. Otra desventaja de estos sistemas es que suelen requerir un tamaño mínimo a partir del cual pasan a ser rentables. Con lo cual se reduce el en número de aplicaciones donde pueden ser utilizados. Sin embargo, los dispositivos de estado sólido (termoeléctricos, termiónicos y termofotovoltaicos) son escalables, pudiendo encontrar más aplicaciones donde ser utilizados (a nivel residencial, en aplicaciones espaciales, automoción, etc.).

Los dispositivos termoeléctricos son dispositivos semiconductores, uno tipo n y otro tipo p, que están unidos en sus extremos que cuando se les aplica una diferencia de temperatura entre ambas uniones, se genera una diferencia de potencial, conocido como efecto Seebeck, que se utiliza para generar electricidad. Los materiales que se utilizan para estos dispositivos tienen unas conductividades térmicas bajas, para disminuir las pérdidas por conducción de calor, y aumentar el coeficiente Seebeck del generador termo-eléctrico (TEG) porque a mayor sea esta diferencia, mayor será la diferencia de potencial.

La eficiencia de los TEGs es alrededor del 5% [1], aunque hasta el momento la eficiencia ha llegado como máximo hasta aproximadamente 15% [6], 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.

Otros sistemas de obtención de electricidad de una fuente de calor es la generación termoiónica (TIC), que mediante el 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 utilizar en conjunto con el TIC, es un generador termofotovoltaico (TPV) que transforman la radiación electromagnética producida por el emisor a alta temperatura para ser capturada por el receptor, que es una célula fotovoltaica. 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 bandas de energía entre 1 y 1.4 eV, utilizando un reflector trasero que devuelve la radiación de menor energía a la banda energética directa al emisor, pero solo llegando a obtener una densidad de potencia de 2.39 W cm^{-2} [28]. 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 $< 0.3 \text{ mm}^2$ [16]. 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 $1 \mu\text{m}$ de 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 termofotovoltaico, 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, diferentes 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.

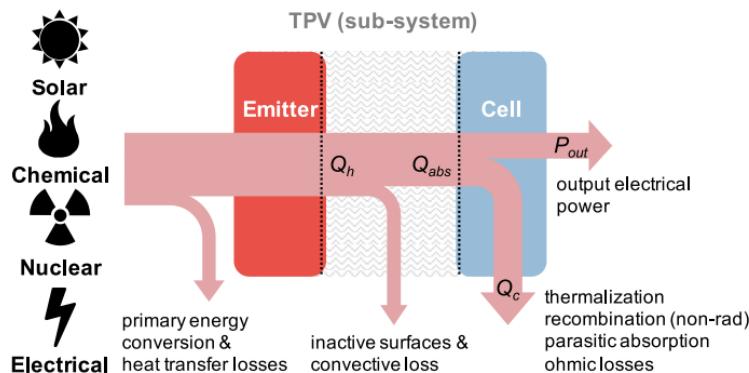


Figura 2.1: Flujo de conversión de la energía térmica en energía eléctrica. *Fuente: [2]*

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 sí solo sí la energía del fotón absorbido es mayor que la energía de la banda energética 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 banda energética son suprimidos o reflejados para disminuir el flujo de calor [2].

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 [14], cumpliéndose en 2004 40 años de investigación sin conseguirse potencias por encima de 500W [13]. 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 [26]. 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 [23].

Todas estas áreas de interés ha provocado un aumento de las investigaciones en los sistemas de generación termo-fotovoltaicos, estudiándose la utilización de células multicapas, diferentes materiales de emisor para aumentar la potencia radiada, aplicación de capas finas en el emisor para el aumento de la potencia radiada [11], aplicación de filtros [27] y capas reflectantes para la recuperación de fotones y disminución de calentamiento [7], la combinación con un TIC para aumentar la densidad de potencia y eficiencia total del sistema generador [4, 7], y la disminución del espacio entre emisor y célula para aprovechar los efectos de la radiación de campo cercano [7, 9, 17].

Las investigaciones no se han limitado a estudiar células TPV de una o varias uniones p-n, sino también la utilización de células termofotovoltaicas interbandas en cascada (ICTPV) de banda energéticas comprendidas entre 0.2 y 0.5 eV que resulta en una eficiente colección de portadores foto-generados, donde la eficiencia máxima (η_{max}) y la diferencia de potencial en vacío (V_{OC}) es proporcional a el número de bandas (stages) hasta unos 0.691 V de V_{OC} y uno 6.2% η_{max} , pero genera una significante cantidad de energía térmica por la densidad de corriente oscura [15]. Esta corriente se consigue disminuir al introducir una barrera entre las capas [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 capas reflectantes porque permiten la re-utilización de los fotones no absorbidos, aumentando la eficiencia y evitando que se acabe calentando innecesariamente la célula. Las capas traseras reflectantes(BSR), principalmente hechas de oro, reducen las pérdidas de radiación por la absorción de la radiación de energía menor a la banda energética, permitiendo que la radiación vuelva al emisor [24].

Habitualmente estas capas se usan en las TPVs y TICs, como por ejemplo se usan en [7, 9, 19]. Los filtros se utilizan para evitar la transmisión de radiación no deseada la célula, consigiéndose un aumento de la eficiencia del 45 % al 75 %, estos filtros pueden ser de una o múltiples capas que la rugosidad de la interfaz degradada seriamente la eficiencia, lo que se puede mejorar con una poca cantidad de capas [27].

La razón por la cual se combinan los TICs y las TPVs 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 [7] se realiza un estudio teórico de un dispositivo termofotovoltaico de campo cercano mejorado con termoiónico (nTiPV) con un emisor de grafito 1000K y una célula fotovoltaica 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.

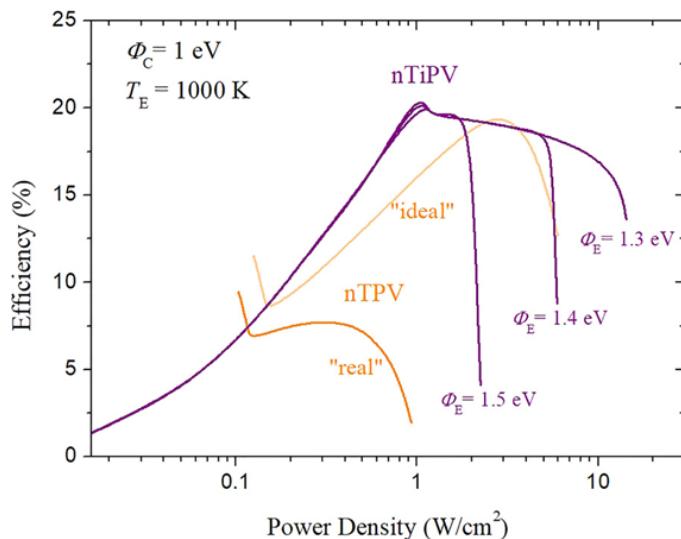


Figura 2.2: Relación entre densidad de potencia y eficiencia entre dispositivos nTPVs y nTiPVs.
Fuente: [7]

Los dispositivos TPV que aprovechan el efecto de campo cercano se denominan como dispositivos NFTPV, NF-TPV o nTPV, los cuales son capaces de producir más potencia que las TPVs por tener un mayor flujo de calor por radiación. Siendo el aumento de la eficiencia para igualar a la actual de campo lejano de 40% [19] un objetivo interesante, en [9] se modeló la eficiencia de un NF-TPV basado en *InAs* con emisor a 700K y radiador de la célula a 300K, alcanzándose unas eficiencia del 17% siendo la separación de 200nm y notándose que a menores temperaturas y mayores distancias se obtiene menos potencia, y notando que al aumentar la temperatura el pico de potencia se desplaza a menores longitudes de onda.

En [5] se evaluó teóricamente diferentes combinaciones de cerámicas para el emisor de una nTPV a 2000°C y célula a 400°C, observando los flujos espectrales de calor, la potencia total y el rendimiento, siendo la máxima potencia por metro cuadrado para el emisor de *B₄C* 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 [10] que proporciona varias ecuaciones para calcular la potencia radiada para varios grososres 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 (ω_{res}) que producen un aumento significativo del flujo radiado monocromático a dicha frecuencia, pudiendo aumentar la eficiencia de la NF-TPV si se consigue que la ω_{res} coincida con la banda energética del semiconductor. En [11] simulan un sistema nTPV utilizando una lámina fina de SiC y otra gruesa, obteniendo que al aumentar el grosor de la capa disminuye la potencia en la ω_{res} pero aumenta para el resto de frecuencias, siendo a partir de los 100nm de grosor la misma potencia radiativa que la lámina gruesa. Para mantener las distancias de separación tan cortas es necesario un mecanismo, siendo lo más sencillo el uso de pilares de algún material cerámico por sus propiedades térmicas, como se presenta en [25] que estudia la transferencia de calor entre dos placas de Si separadas 200nm por vacío y utilizando espaciadores de SiO_2 y prismáticos de base circular de 1 μm de diámetro fabricados con fotolitografía ultravioleta, obteniéndose que el coeficiente radiativo de transferencia de calor aumenta con la disminución de la separación entre emisor y célula, y aumenta con 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 en cada interfaz. En [17] se estudia la radiación por campo cercano entre dos placas de cuarzo con pilares de pirámides truncadas de SiO_2 que están depositados sobre el substrato inferior, descubriendose que la resistencia de contacto es mucho mayor que la geométrica del pilar, por lo tanto, es de gran importancia para disminuir las pérdidas por conducción.

2.2. Transmisión de calor

El calor es una forma de energía que se propaga entre distintos medios de tres formas distintas, por convección, radiación y conducción.

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 dà 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 [21] comparan la diferencia entre un modelo teórico y los resultados experimentales de la resistencia de contacto entre varios materiales, observándose que para dos aceros inoxidables 304 esta diferencia disminuye con el aumento de la presión, siendo este error significativamente menor a partir de los 1GPa 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 evanesciente 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.

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

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

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 ϵ_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 [10], 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 γ , 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_{ρ} es el vector de onda de la onda primaria [12].

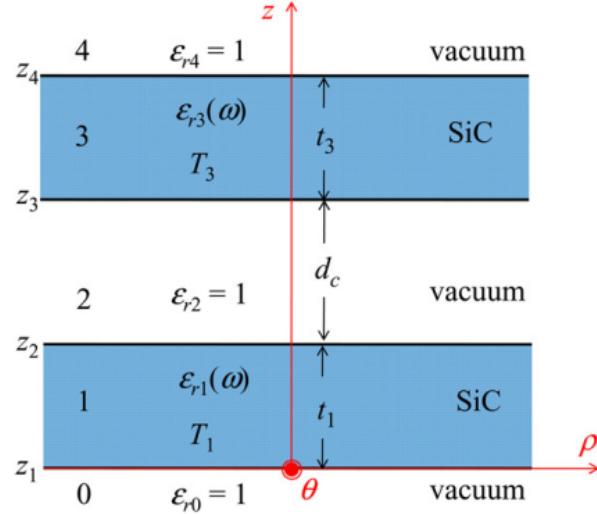


Figura 2.3: Esquemático de la representación geométrica para el flujo entre dos cuerpos separados por vacío. *Fuente: [10]*

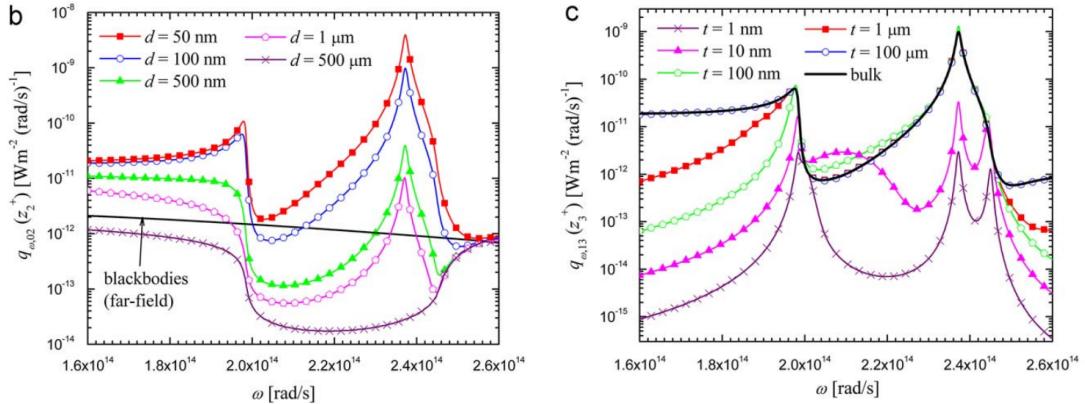
La ecuación 2.4 es para dos placas gruesas separadas por un vacío y rodeadas por vacío, se obtiene de las ecuaciones presentadas en [12], donde se presenta las ecuaciones para la radiación de campo cercano de sistemas multicapa y un método numérico para solucionar las ecuaciones.

Radiación evanescente o campo cercano

La radiación evanescente se transmite distancias muy pequeñas, introduciéndose un algoritmo general para el análisis de un sistema unidimensional multi-capa basado en las funciones de dyadic Green y la amplitud para cada capa es calculada con una matriz de dispersión [12], obteniéndose para el caso de dos capas gruesas separadas por vacío una distancia d_c , el flujo de la radiación evanescente [10] como :

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

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 γ . 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 [12].



(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 300K y 0K 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 300K y un receptor grueso a 0K, ambos de cBN y separados por una distancia de 100nm en el vacío. *Fuente: [12]*

También se puede observar en las figuras 2.4a y 2.4b el efecto de la frecuencia de resonancia sobre la radiación espectral, aumentando considerablemente la potencia radiada monocromática en dicha frecuencia de $\sim 2,373 \cdot 10^{14}$ rad/s y dividiéndose en dos picos al disminuir el grosor del emisor, pudiéndose considerarse casi monocromática alrededor de la ω'_{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

Se listan y desarrolla los materiales utilizados para simular cada uno de los componentes del sistema y los criterios seguidos para su eleccións.

3.1.1. Nano-espaciador

Suponemos que los nano-espaciadores son de Dióxido de Silicio (SiO_2) [3], un material que ha sido utilizado en varias ocasiones en sistemas de campo cercano de TPVs o TEC por ser un material cerámico con una baja conductividad térmica, buena resistencia ante choques de calor y alta 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.

A su vez se considera el SiO_2 con tres porosidades distintas, la primera es con una porosidad del 0 %, segundo con una porosidad del 25 % y tercero con una porosidad del 50 %, calculando la nueva conductividad térmica para los casos de porosidad distinta al 0 % según el modelo CP en [28].

3.1.2. Célula

Suponemos inicialmente que las células son de Silicio (Si) para llevar a cabo unos cálculos preliminares utilizando un material ampliamente conocido y utilizado en la fabricación de células fotovoltaicas. En el resto de simulaciones se utiliza Germanio (Ge), que es un semiconductor como el Si pero que es capaz de absorber una mayor cantidad de radiación por tener una banda energética (Band Gap) de 0.66eV a 300K, a diferencia del Si que es unos 1.11eV a 300K. La capacidad de absorber más radiación es importante en la termofotovoltaica porque la mayor cantidad de

radiación es infrarroja.

También se utiliza el Ge por ser el material de las células termofotovoltaicas a disposición en el Instituto de Energía Solar (IES).

3.1.3. Emisor

Para simular el emisor supondremos varios materiales: Silicio, Acero inoxidable 304L (SS) y Carburo de Silicio (SiC). Se utilizó Si para las pruebas de simulación iniciales para tener un punto de partida, para luego pasar al SS por ser un material que se utiliza mucho en la industria, incluyendo al transporte, y por último el SiC que es una cerámica que ha sido utilizada para el aumento de potencia de radiación en campo cercano [11].

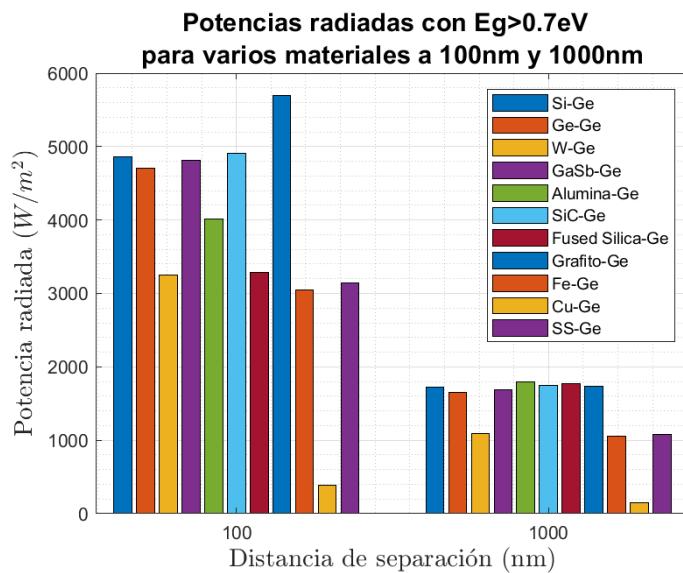


Figura 3.1: Potencias por unidad de área para una célula de Ge y diferentes materiales de emisor para un rango de longitudes de onda desde aproximadamente $0.2 \mu m$ hasta $1.8 \mu m$ (0.7 eV) con distancias de separación de 100nm y 1000nm según las ecuaciones de [10] calculadas a partir de las ecuaciones (2.4) y (2.5).

También se analizaron otros materiales adicionales que finalmente fueron descartados por ser muy caros, o proporcionar una baja potencia radiada (figura 3.1), etc. Dichos materiales son los siguientes:

- **Antimonio de Galio (GaSb):** Semiconductor con punto de fusión de $710^{\circ}C$ que es menor a los $800^{\circ}C$ 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 una buena conductividad térmica, alto punto de fusión, pero es muy blando respecto al SiO_2 , tiene como dureza máxima unos 50 HV (dureza Vickers) en comparación a la dureza del SiO_2 de unos 500 HV, por lo cual cuando se aplique presión a los dispositivos el nano-espaciador se hará paso por el emisor.

- **Tungsteno (W):** El coste del material es medio, 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_2 , 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_2O_3):** Es un material muy caro, aproximadamente 16000€/kg o más, disminuyendo considerablemente la viabilidad del sistema.

3.2. Herramientas

Los 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, la página web Refractive Index 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, para las simulaciones de la transmisión de calor por conducción se utiliza Autodesk CFD 2021, 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.

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

Esta página web (<https://refractiveindex.info>) recopila de artículos científicos los índices de refracción (n) e índices 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.

Los motivos de su utilización son la facilidad para la obtención de los índices de refracción y extinción, necesarios para los cálculos del flujo térmico de radiación por campo cercano, y la disponibilidad de los artículos utilizados para contrastar los valores presentados.

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.



Figura 3.2: Icono de Autodesk Inventor Professional 2021

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:

- 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.



Figura 3.3: Icono de Autodesk CFD

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.

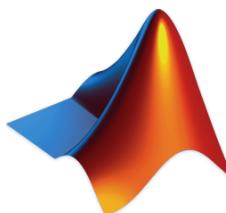


Figura 3.4: Icono de MATLAB

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 para desarrollar 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 3.5), 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.

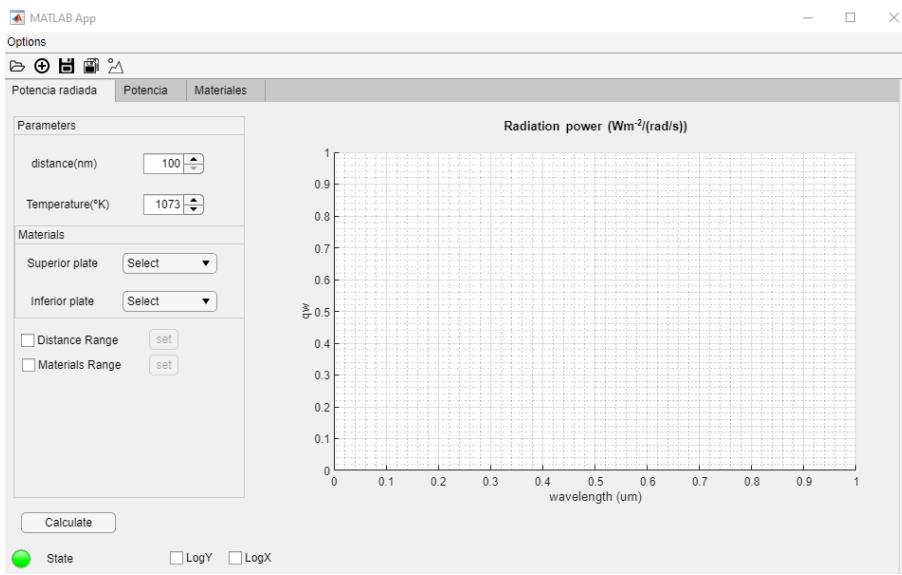


Figura 3.5: Pestaña *Potencia Radiada* de la calculadora de campo cercano

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 3.6b). 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 3.6a). 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.

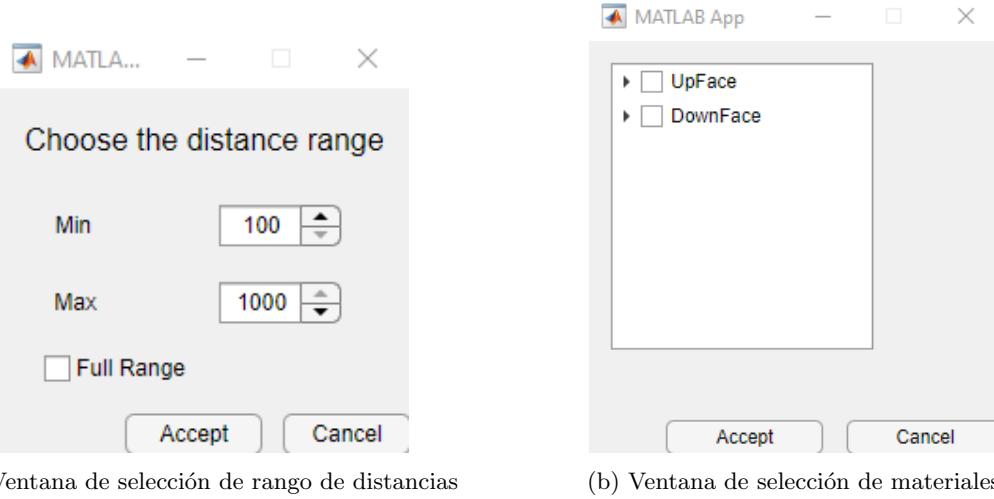


Figura 3.6: (a) Ventana para la selección del rango de las distancias de separación entre el emisor y el receptor. (b) Ventana para la selección de los materiales para el emisor y el receptor.

La pestaña de *Potencia* (figura 3.7) contiene una calculadora para pasar de electrón-voltios a longitud de onda y viceversa, unos campos para controlar el rango de longitudes de onda para realizar la integral de la potencia radiada monocromática 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 3.7), los de la radiaciónpectral o ambos se pueden guardar en un archivo excel.

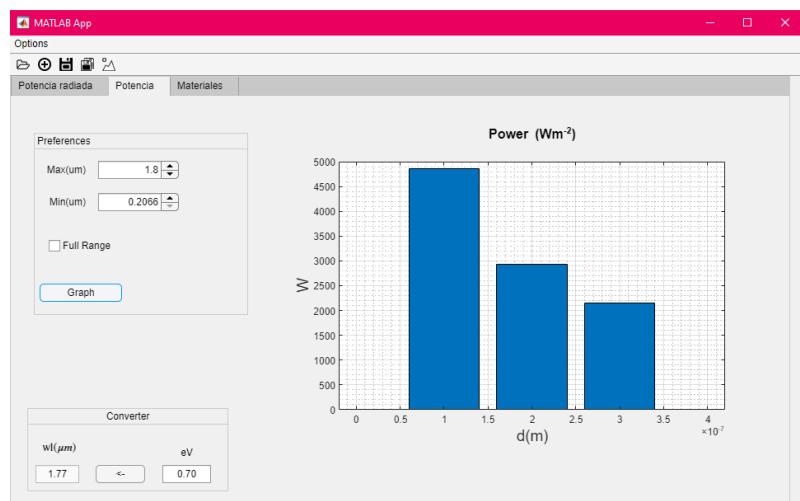


Figura 3.7: Pestaña de la Potencia

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 3.8.

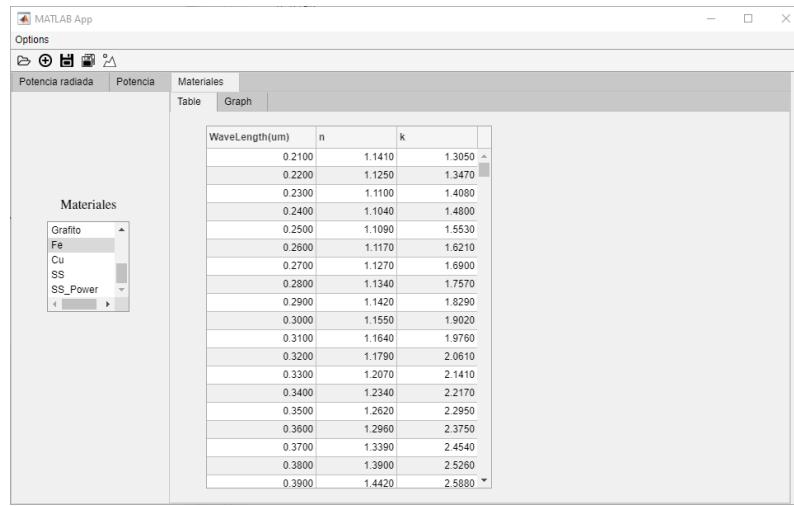


Figura 3.8: Pestaña de los datos de n y k de los materiales disponibles

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

La base del nano-espaciador es cuadrada por ser la más sencilla de fabricar por procesos fotolitográficos y para realizar cálculos por ser sus ecuaciones de área y volumen la más sencilla de los polígonos regulares cerrados. El lado de la base del nano-espaciador son de $3\mu\text{m}$ 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 100nm como la distancia mínima para definir la altura mínima de los nano-espaciadores, correspondiente a 1mm 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 mo-

delo 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.

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

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.

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

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.

$$\begin{aligned} \frac{R}{R'} &= \frac{1/k}{1/k'} \cdot \frac{L/A}{L'/A'} = \frac{k'}{k} \cdot \frac{L}{L'} \cdot \frac{A'}{A} = 1 \\ \frac{k'}{k} &= \frac{L'}{L} \cdot \frac{A}{A'} = \frac{10^4}{10^8} \implies \frac{k'}{k} = 10^{-4} \end{aligned} \quad (4.5)$$

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 [28].

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 de 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.

$$\frac{R'_{th}}{R_{th}} = \frac{R'_c}{R_c} \cdot \frac{A}{A'} = 1$$

$$\frac{R'_{th}}{R_{th}} = \frac{R'_c}{R_c} \cdot \frac{A}{A'} = 1 \Rightarrow \frac{R'_c}{R_c} = \frac{A'}{A} = 10^8 \quad (4.6)$$

Para los casos que la resistencia de contacto es presentada como conductancia de contacto (h_c) según un modelo matemático [21], según la ecuación de Cooper reducida por Yovanovich (ecuación (4.7a)).

$$\frac{P}{H_c} = \left[\frac{P}{c_1 (1,62\sigma/m)^{c_2}} \right]^{\frac{1}{2+0,071c_2}} \quad (4.7a)$$

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

Donde c_1 es 10.6 GPa, c_2 es -0.40, σ es la combinación RMS de la rugosidad de ambas superficies de los materiales con σ_i siendo la rugosidad de la superficie i (ecuación (4.8b)), m es la combinación RMS de la media absoluta de la pendiente de la rugosidad con m_i siendo la media de la pendiente absoluta de la superficie i (ecuación (4.8a)), k_s es la media armónica de la conductividad térmica con k_i siendo la conductividad térmica del material i (ecuación (4.8c)), H_c es la micro-dureza Vickers del material más duro y P es la presión aplicada.

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

Estas son las únicas expresiones analíticas que se han encontrado en la literatura para calcular la conductancia térmica de contacto entre dos superficies, las cuales han sido validadas para el caso concreto de dos superficies de acero inoxidable 304 (SS) [21]. Para tener una mejor idea como la resistencia de contacto afecta a la conducción de calor simplificamos las ecuaciones suponiendo que el nano-espaciador de SiO_2 es liso, por ende, su m_i y su σ_i son nulas. Por lo tanto, se calcula la relación de las ecuaciones para el caso de los dos aceros y para el caso de SS- SiO_2 .

Como se puede observar en las ecuaciones 4.7, el valor de σ y m se presentan siempre relacionados como σ/m , y se cumple que $\sigma/m = \sigma'/m'$ porque al suponer que el caso de dos aceros tienen idénticas m_i y σ_i , la relación σ/m queda como σ_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 (4.7b) 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 y 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 acero inoxidable 304.

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

$$\frac{h'_c}{h_c} = 2 \cdot \frac{k_{SiO_2}}{k_{SS} + k_{SiO_2}} \quad (4.9)$$

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 $1,5 \text{ W/ (m}^2\text{K)}$ y el valor de k_{SS} es de $15 \text{ W/ (m}^2\text{K)}$, 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 100nm a 1000nm. Para la realización de las simulaciones y la obtención de la potencia se siguen los siguientes pasos:

1. Abrir la aplicación de la Calculadora de campo cercano.
2. Seleccionar la cajetilla de **Materials Range** (figura 4.1b).
3. Seleccionar la cajetilla de **Distance Range** (figura 4.1a).



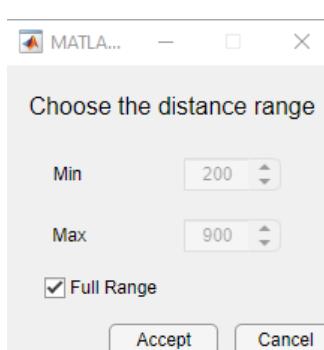
(a) Rango de distancias



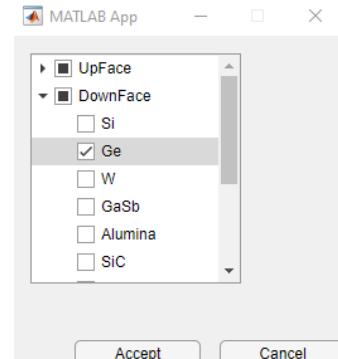
(b) Rango de materiales

Figura 4.1: (a) Casilla para la selección de la opción de simular un rango de distancias. (b) Casilla para la selección de la opción de simular una combinación de materiales.

4. Hacer clic en el **set** de **Materials Range**.
5. Seleccionar los materiales para el emisor (UpFace) y la célula (DownFace), y hacer clic en aceptar (figura 4.2b).
6. Hacer clic en el **set** de **Distance Range**.
7. Seleccionar el rango de distancias a simular de 100 a 1000 o seleccionar la casilla **Full Range** y hacer clic en aceptar (figura 4.2a).



(a) Set de distancias



(b) Set de materiales

Figura 4.2: (a) Ventana para la selección del rango de distancias a simular. (b) Ventana para la selección de las combinaciones de materiales a simular, siendo **UpFace** el emisor y **DownFace** la célula.

8. Asegurar que la temperatura del emisor sea la deseada.
9. Hacer clic en el botón **Calculate** para lanzar la simulación.
10. Esperar que el indicador de estado pase de *Running...*, color rojo del indicador (figura 4.3b), a *StdBy*, color verde del indicador (figura 4.3c), es decir, esperar que termine la simulación.

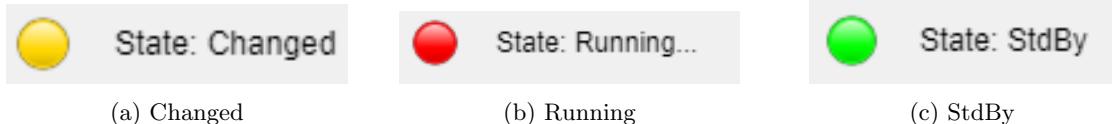


Figura 4.3: Indicadores del estado actual del sistema. (a) Indicador del estado **Changed** o estado de cambio, se activa cuando se produce algún cambio en los datos seleccionados para simular. (b) Indicador del estado **Running** o corriendo, se activa cuando estando en el estado **Changed** se hace 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.

11. Ir a la pestaña de **Potencia**.
12. 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 4.4).
13. Hacer clic en el botón **Graph** para calcular y graficar las potencias (figura 4.4).

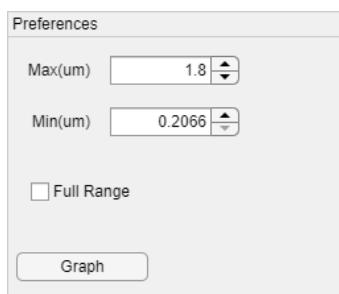


Figura 4.4: Preferencias para el cálculo de la potencia

El procedimiento seguido en este trabajo se encuentra detallado paso a paso en el Apéndice xxxx. Para la extracción de los datos obtenidos de potencia por unidad de área se hace clic sobre el botón de **guardar** (figura 4.5a) estando en la pestaña **Potencia**, para guardar la potencia radiada se hace clic del botón de **guardar** estando en la pestaña de **Potencia Radiada** y para guardar todos los datos se hace clic sobre el botón de **guardar todos** (figura 4.5b).

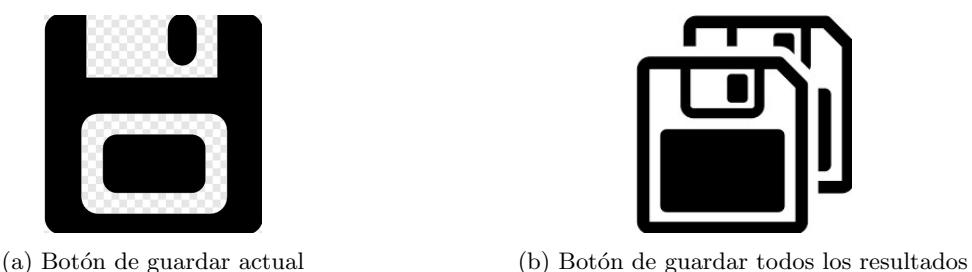


Figura 4.5: (a) Botón de guardar los resultados obtenidos de los cálculos o la simulación, dependiendo de la pestaña que se encuentre el usuario de la calculadora de campo cercano. (b) Botón de guardar todos los resultados obtenidos de los cálculos y simulación.

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 $3 \mu m$ y de altura variable h , el emisor y la célula tiene el mismo modelo 3D, con base cuadrada de 1mm de lado con 0.2mm 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 es:

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 4.6).
 - 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 4.6c).
 - 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 4.6c).
 - 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 4.6a.

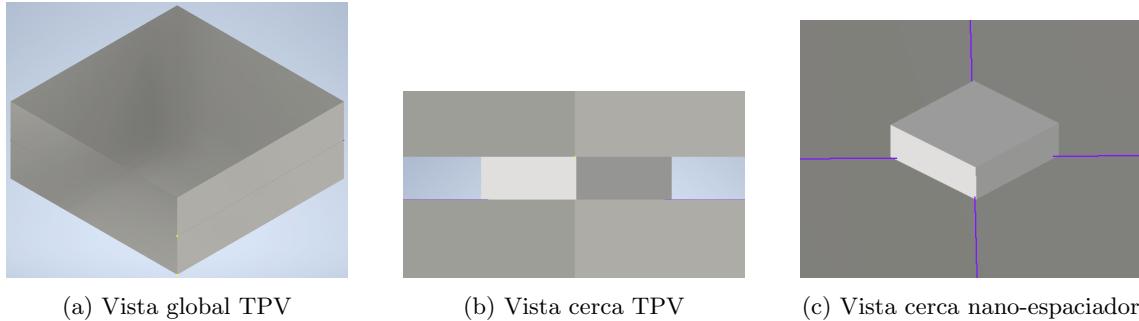


Figura 4.6: Vistas del sistema TPV. (a) Vista de lejos del sistema completo de la TPV. (b) Vista del sistema TPV de cerca desde un borde. (c) Vista del nano-espaciador colocado sobre el centro de una cara de la célula.

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.

Procedimiento simulación CFD

El procedimiento a seguir para cada modelo de la simulación de transmisión de calor por conducción en CFD es el siguiente:

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 *SiO₂* 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.



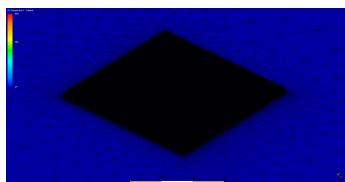
(a) Panel principal



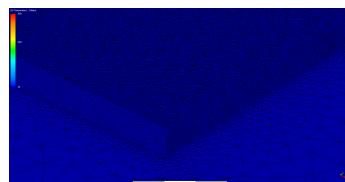
(b) Panel de resultados

Figura 4.7: (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.

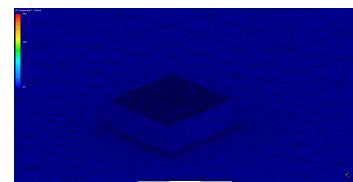
9. Seleccionar la cara superior del emisor y agregar como condición de contorno una temperatura constante de 800°C.
10. Seleccionar la cara inferior de la célula y agregar como condición de contorno una temperatura constante de 25°C.
11. Seleccionar la función de mallado.
12. Aplicar un mallado de tamaño 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 4.8).
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 4.8: (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 4.7a).

15. Seleccionar en la pestaña **Physics** la casilla de **Heat transfer** (4.9b) .

16. Ir a la pestaña **Control** (figura 4.9a).
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.

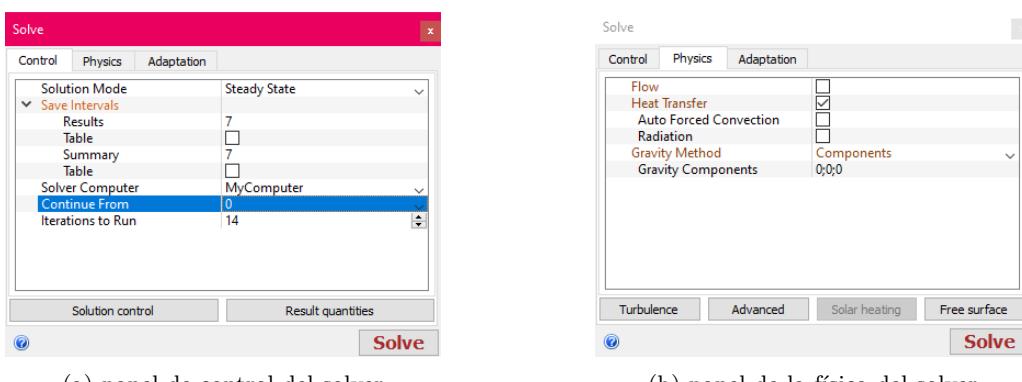
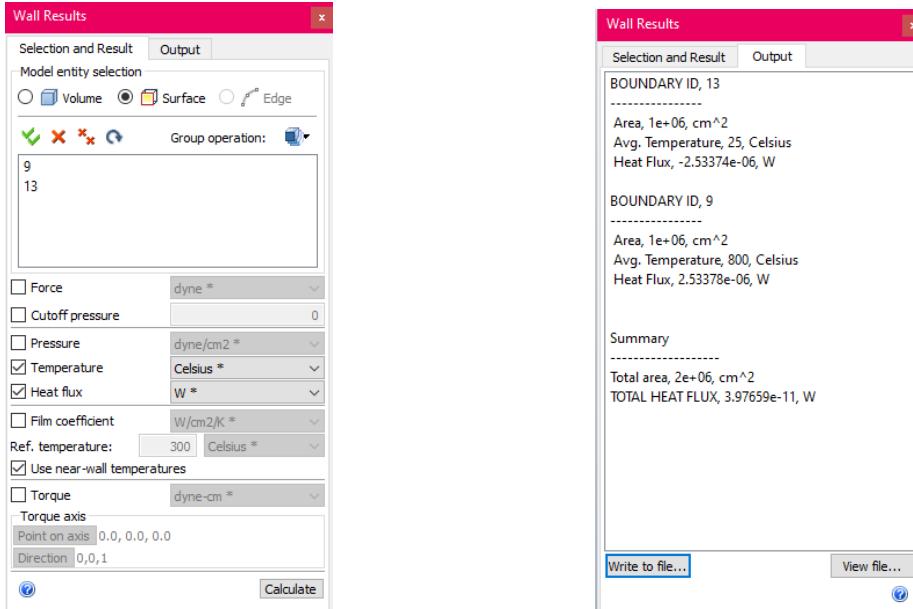


Figura 4.9: (a) Panel de control de la ventana del Solver.(b) Panel de las propiedades físicas de la ventana del Solver.

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 4.7b).
 - b) Seleccionar las casillas de potencia y temperatura.
 - c) Seleccionar la opción de superficie del **Model entity selection**.
 - 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 4.10a).
 - 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 4.10b).



(a) Pestaña de selección y resultados.

(b) Pestaña de salida.

Figura 4.10: (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.

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 $1cm^2$ con distintas distribuciones de nano-espaciadores ($nespaciadores/cm^2$, y se simula la transmisión de calor por radiación de campo cercano en un dispositivo de $1cm^2$. Las simulaciones se realizan con el emisor a una temperatura constante de $800^\circ C$ y la célula a $25^\circ C$.

- 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 *SiO₂* 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 1000nm.

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

La conductividad térmica (σ) del *Si* es 182.977 W/m°C y la del *SiO₂* es 1.30067 W/m°C ambas a $25^\circ C$. 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°C , la temperatura media mínima del nano-espaciador es 32.3903°C y el flujo de calor es 0.00889793 W . Con los resultados de las temperaturas medias del nano-espaciador se obtiene un flujo de calor teórico de 0.00889905 W (obtenido mediante la ecuación (5.1), siendo k la conductancia térmica $k = \sigma \cdot A/L$), obteniéndose un error relativo aproximado del 0.0126% , 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-SiO₂-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 mm lado y 0.2 mm de altura con la cara superior a 800°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°C .

5.2.1. Efectos de la resistencia de contacto sobre la conducción

La resistencia de contacto (R_c) usada es de unos $4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2\text{K/W}$ [17] 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.

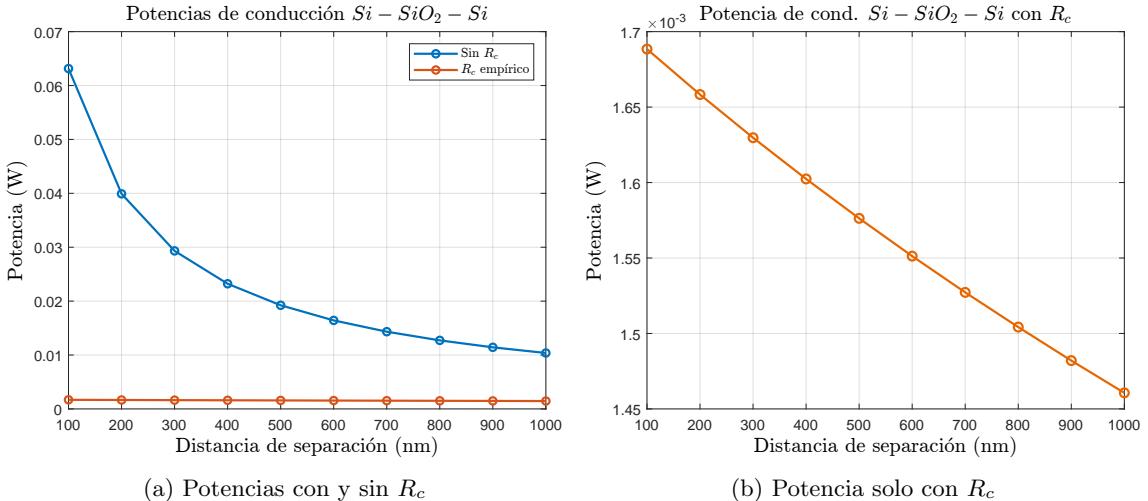


Figura 5.1: Representación gráfica del flujo de calor por conducción frente a las diferentes alturas del nano-espaciador con y sin R_c . (a) Comparación de la potencia conducida de un nano-espaciador sin R_c y con R_c sobre un mismo eje. (b) Potencia conducida de un nano-espaciador con R_c .

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 5.1a la resistencia de contacto

constante domina sobre la resistencia del nano-espaciador dando así la forma aproximada de una recta (figura 5.1b) 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).

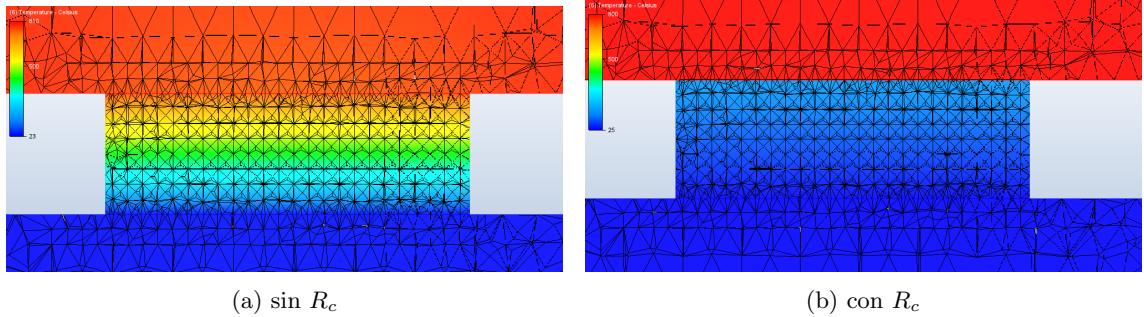


Figura 5.2: Resultados gráficos de la simulación de CFD de la transmisión de calor por conducción a través de un nano-espaciador de 1000nm de altura sin R_c (a) y con R_c (b).

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

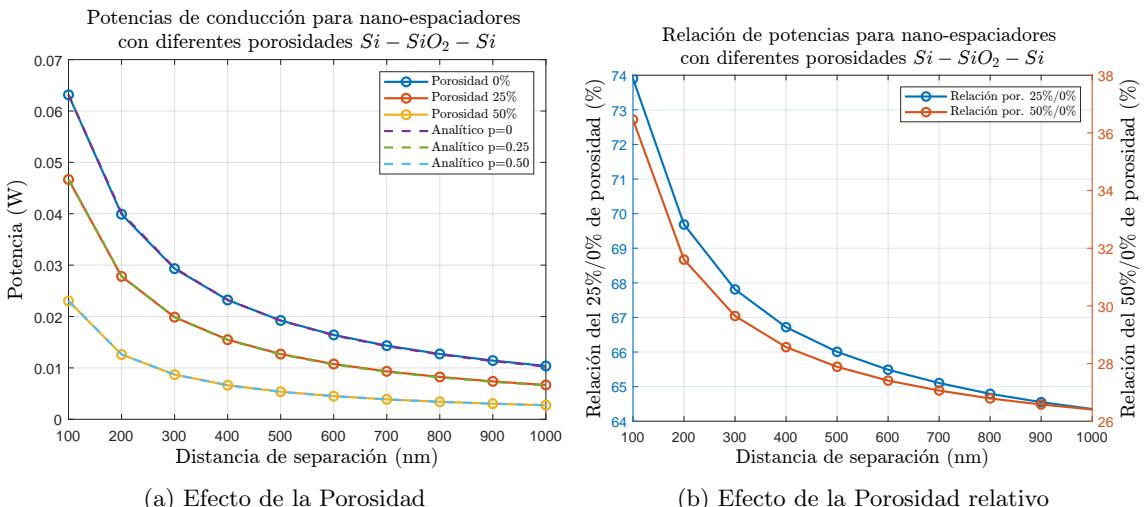


Figura 5.3: (a) Representación gráfica de las potencias de calor transmitidas por conducción a través de un nano-espaciador frente a la variación de la altura del nano-espaciador para diferentes grados de porosidad del 0 %, 25 % y 50 % del SiO_2 y su modelo analítico (ec. (5.2)). (b) Representación gráfica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

Para diferentes porosidades la conductividad térmica varía, disminuyendo con el aumento del grado de porosidad [28], 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 [28].

Como se puede observar en la figura 5.1b 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.

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 (ρ), 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 [10].

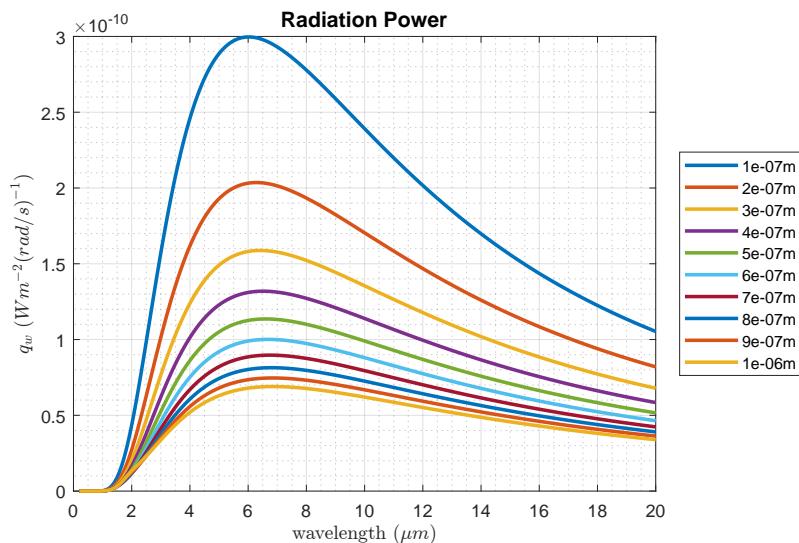


Figura 5.4: Potencia de radiación monocromática para dos placas gruesas planas de *Si* en todo el rango espectral frente a diferentes distancias de separación de las placas (d) en metros.

Integrando la potencia en el rango espectral de longitudes de onda con energías mayores a 1.1 eV, energía de banda 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.

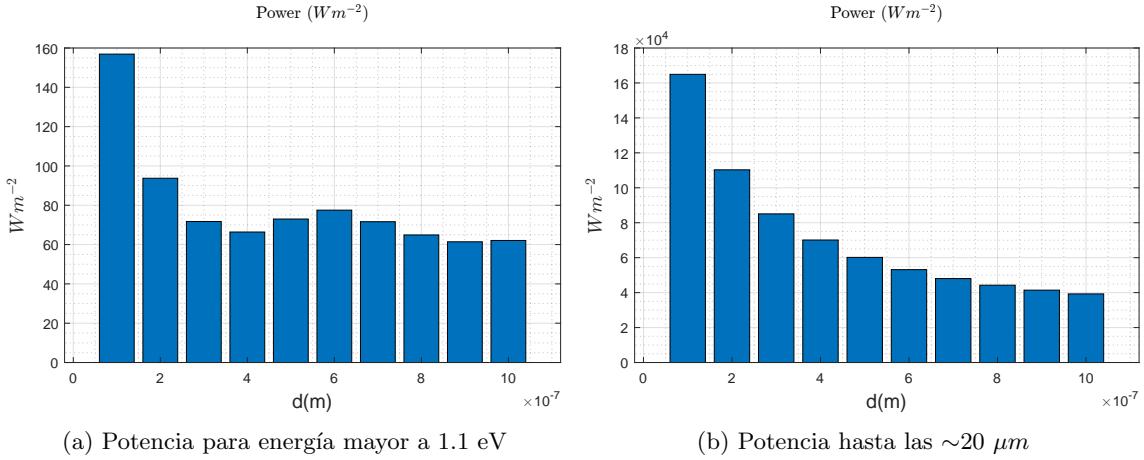


Figura 5.5: Potencias por unidad de área transmitida por radiación por efecto de campo cercano para el rango espectral de energía mayor a 1.1 eV (a) y para todo el rango espectral (b) frente a las diferentes distancias de separación.

Las potencias radiadas obtenidas para el rango de longitudes de onda mayor a la banda energética del *Si* son muy pequeñas (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).

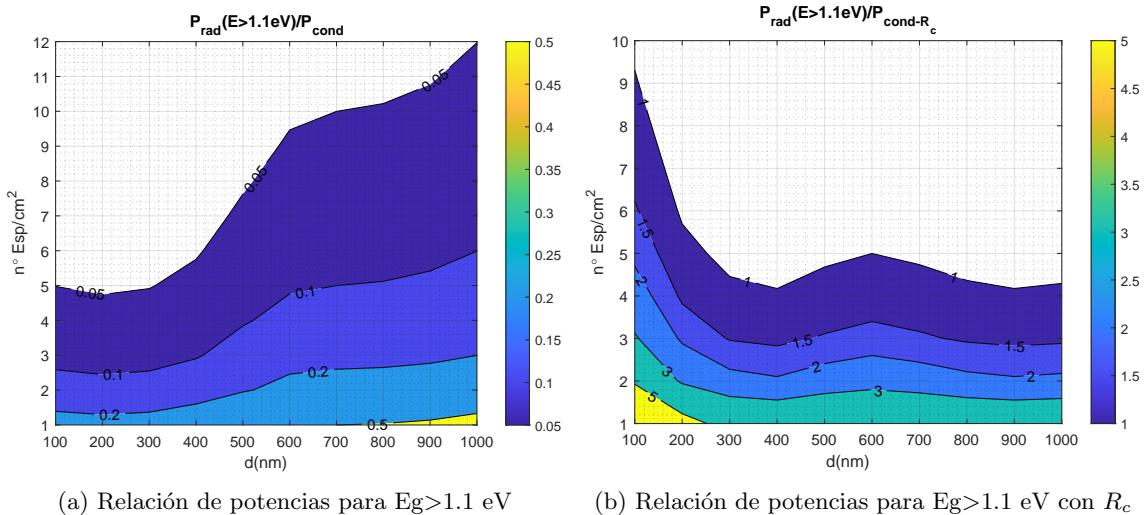


Figura 5.6: Densidad de los nano-espaciadores para diferentes relaciones de las potencias de radiación en el rango espectral de energía mayor a 1.1 eV respecto a las de conducción para cada densidad de nano-espaciadores de un sistema nTPV de $1cm^2$ y célula de *Si* sin R_c (a) y con R_c (b) frente a 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 recolectan 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.

Dist. (nm)	Potencias según como se transmite el calor					
	Conducción (W/nº nano-espaciadores)				Radiación (W/m²)	
P_{Normal}	$P_{R_c-Empirico}$	$P_{Porosidad25}$	$P_{Porosidad50}$	$P_{Eg>1,1eV}$	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

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 nTPV $Si-SiO_2-Si$ para diferentes alturas del nano-espaciador, para los casos sin R_c y con R_c igual a $4 \cdot 10^{-6} m^2 K/W$ [17], y sin R_c pero con las proporciones de las porosidades de [28] para un 25 % y un 50 %.

5.3. Resultados de las simulaciones para una nTPV de Si-SiO₂-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 banda energética 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* (figuras 5.1 a y b).

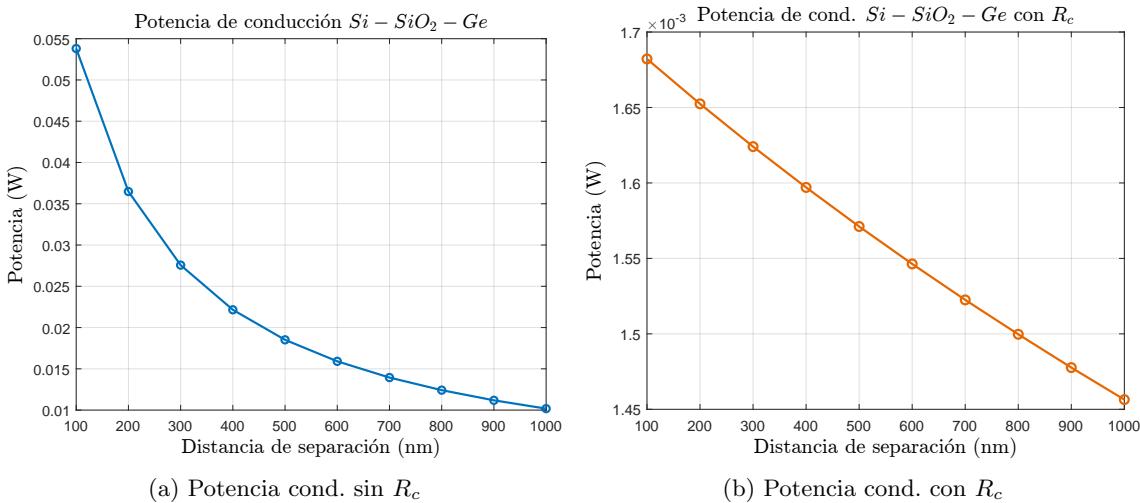


Figura 5.7: Potencias de conducción para un sistema nTPV de *Si*–*SiO₂*–*Ge* de un nano-espaciador con emisor a 800°C y célula a 25°C sin R_c (a) y con R_c (b) frente a las diferentes alturas del nano-espaciador.

La potencia de conducción con R_c disminuye de unos 53.80 mW sin R_c a unos 1.68 mW para una altura de nano-espaciador de 100nm, que representa una relación del 3.13 %. Para unos 1000nm 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 relación del 14.31 %.

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*, ambas con R_c , se obtiene una relación mayor del 99 % 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 con la existencia de R_c , a diferencia de la nTPV sin R_c donde la relación varía entre un ~85 % y un ~98 %.

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).

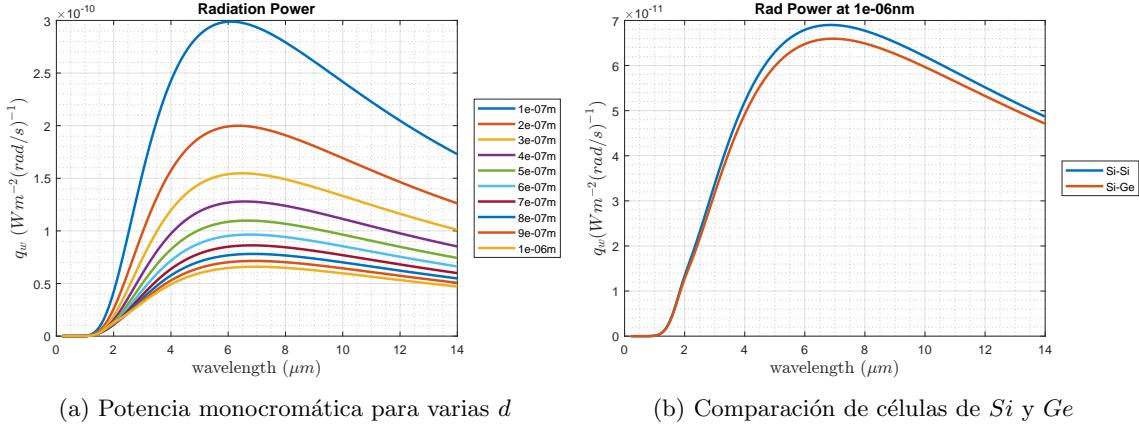


Figura 5.8: Potencias de radiación monocromática por campo cercano para un sistema nTPV *Si* – *SiO₂* – *Ge* frente a las longitudes de onda para varias distancias entre placas (a) y para dos materiales de célula, *Si* y *Ge* (b).

Para la obtención de las potencias de radiación se procede a realizar la integral en el rangopectral 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 rangopectral de longitudes de onda se obtiene potencias alrededor de los $10^4 W/m^2$ con un máximo de $\sim 1.510^5 W/m^2$ (figura 5.9b) y tabla 5.2).

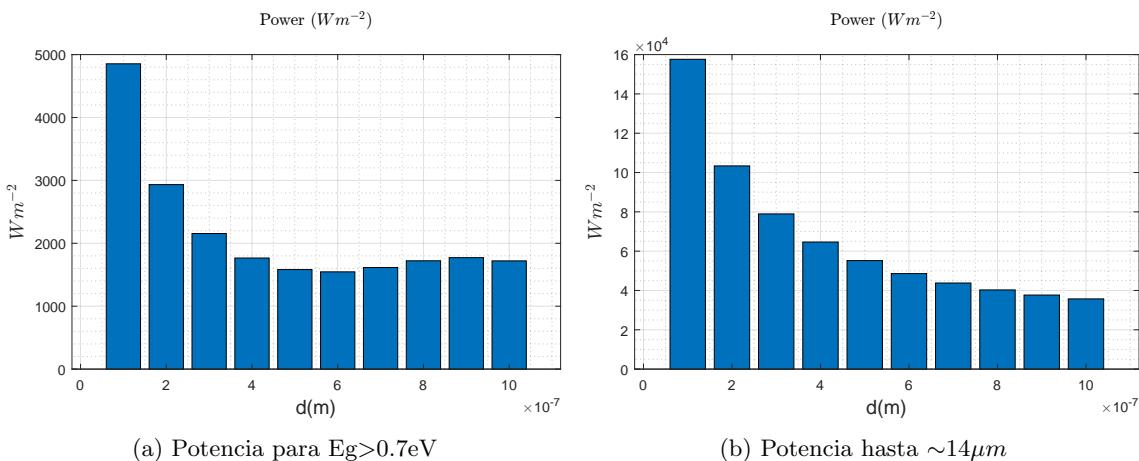


Figura 5.9: Potencias por unidad de área para la radiación de campo cercano para el sistema *Si* – *SiO₂* – *Ge* frente a las diferentes alturas del nano-espaciador. (a) Potencias en el rangopectral de todas las longitudes de onda de energía mayor a 0.7 eV. (b) Potencias en todo el rangopectral, hasta las $\sim 14\mu m$.

Como para el caso de la nTPV de *Si* – *SiO₂* – *Si* la diferencia de la potencia entre integrar hasta los 0.7 eV del rangopectral e integrar en todo el rangopectral es significativa. Al cambiar la célula de *Si* por una de menor energía de banda 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 600nm (figura 5.9a), a diferencia de la célula de *Si* que aumenta (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 todas las relaciones de la potencia de radiación respecto a la de conducción mayores que 3 o 10.

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 ~ 10 mayor que la potencia conducida sin resistencia de contacto para un nano-espaciador (figura 5.10a), pero ~ 100 veces mayor que la potencia conducida con resistencia de contacto (figura 5.10b).

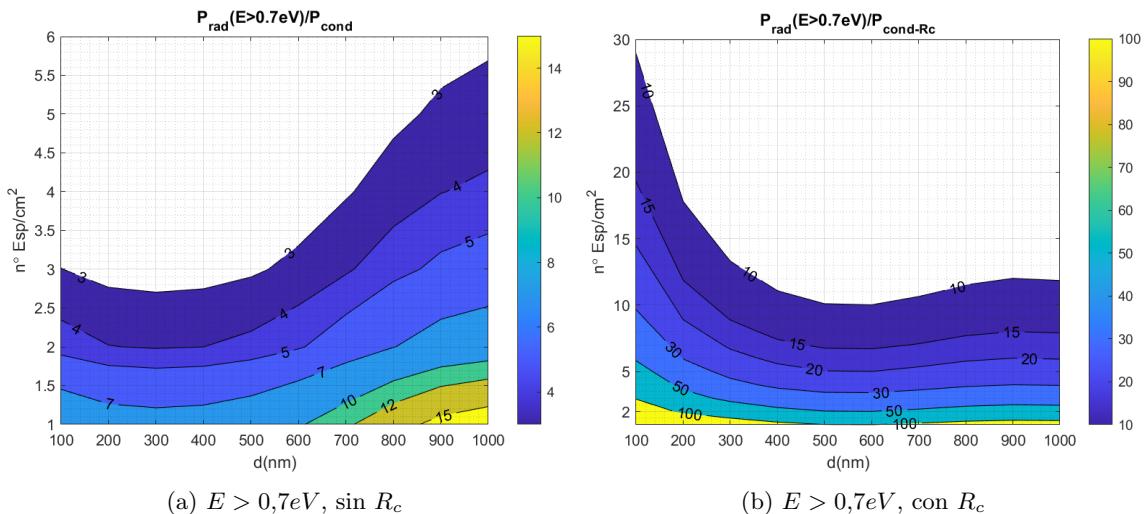


Figura 5.10: Densidad de nano-espaciadores por cm^2 frente a las alturas de los nano-espaciadores para todas las relaciones de la potencia de radiación en el rango espectral de energías mayores e igual a 0.7 eV respecto a las potencias de conducción (dependencia en la densidad de nano-espaciadores) mayores 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 representan los colores asociados a cada uno de los valores de las relaciones de las potencias, con los contornos de las relaciones más significativas en los gráficos.

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 entre ambas potencias no son muy altos para el caso sin R_c , apenás consiguiendo seguro un factor de relación de al menos un orden de magnitud solo para una altura de un nano-espaciador de al menos unos

600nm, a diferencia del caso con R_c que se consigue como mínimo una relación de dos ordenes de magnitud para todas las alturas de un nano-espaciador. 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 para una configuración mínima de cuatro nano-espaciadores.

Para la densidad de nano-espaciadores se nota en la figura 5.10b que el valor máximo para una relación de potencias de un orden de magnitud es aproximadamente 30, que es aproximadamente 10 veces respecto a la del caso sin R_c (menor que 3) para la misma altura de nano-espaciadores (figura 5.10a), y el valor para la misma relación de potencias para una altura de nano-espaciadores de 1000nm es 12, que es entre 6 y 12 veces respecto al caso sin R_c .

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.

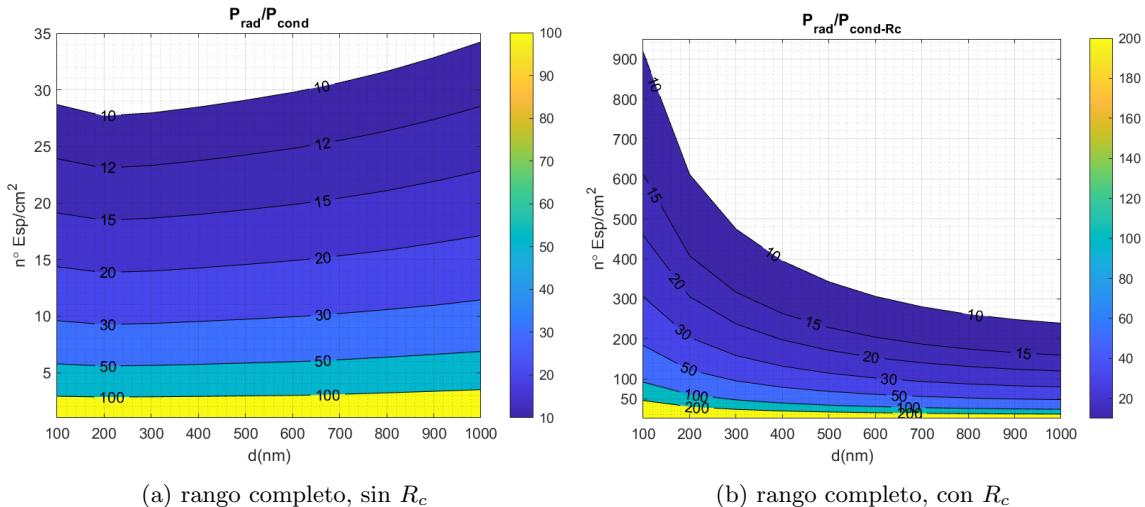


Figura 5.11: Densidad de nano-espaciadores por cm^2 frente a las alturas de los nano-espaciadores para todas las relaciones de la potencia de radiación en todo el rango espectral respecto a las potencias de conducción (dependencia en la densidad de nano-espaciadores) mayores a 10 para el caso sin R_c (a) y para el caso con R_c (b). Donde las barras de colores laterales representan los colores asociados a cada uno de los valores de las relaciones de las potencias, con los contornos de las relaciones más significativas en los gráficos.

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 agrupan en la tabla 5.2, donde se presentan en notación científica para facilitar la observación de los ordenes de magnitud de los resultados.

Dist. (nm)	Potencias según transmisión del calor			
	Conducción (W/nº esp.)	Radiación (W/m ²)	$P_{Eg>0,7eV}$	P_{full}
P_{Normal}	$P_{R_c-Empirico}$			
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

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 – SiO₂ – Ge*.

5.4. Resultados de las simulaciones para una nTPV de SS-SiO₂-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 conductancia de contacto ($h_c = 1/R_c$), la cual se obtiene mediante la relación de las conductancias de contacto según la ecuación (4.9) para un emisor de *SS* y un nano-espaciador liso de *SiO₂*. La conductancia de contacto entre dos aceros inoxidables utilizada para una presión de ~ 1 GPa, porque a dicha presión el error respecto al modelo matemático es pequeño, es aproximadamente unos $1000 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$ [21].

La nueva resistencia de contacto calculada a partir de la conductancia de contacto entre dos aceros inoxidables es $5,5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2\text{K}/\text{W}$ y se toma un valor intermedio entre dicha resistencia de contacto y la resistencia de contacto empírica de $4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2\text{K}/\text{W}$ [17] para obtener en mayor detalle los efectos de la resistencia de contacto sobre el flujo de calor por conducción, siendo el valor de dicha resistencia de contacto calculada intermedia unos $\sim 2,75 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2\text{K}/\text{W}$.

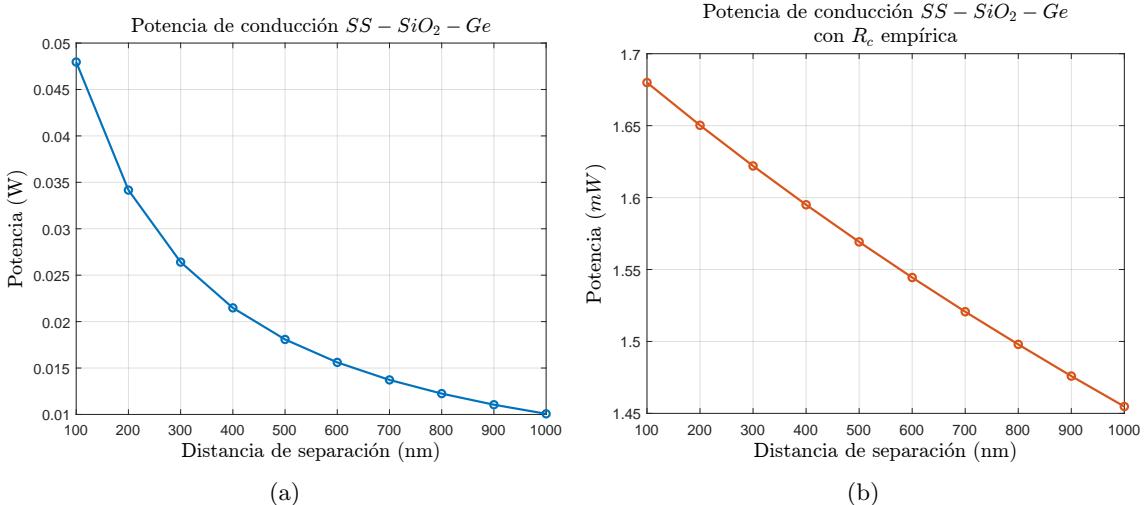


Figura 5.12: Potencias por conducción para una nTPV *SS*–*SiO₂*–*Ge* sin *R_c* (a) y con *R_c* empírica de $4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2\text{K}/\text{W}$ (b) frente a las alturas de un nano-espaciador.

La potencia máxima sin *R_c* es menor que 0.05W (figura 5.12a) a diferencia de la nTPV de *Si*–*SiO₂*–*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 $4 \cdot 10^{-6} m^2 K/W$.

Para las resistencias de contacto calculadas la potencia por conducción disminuye significativamente, siendo tres ordenes de magnitud menor que para la R_c empírica, correspondiente a los tres ordenes de magnitud por encima que las resistencias de contacto calculadas son respecto a la empírica (figuras 5.12b y 5.13a). Por ende, la resistencia de contacto es la resistencia de mayor relevancia del sistema nTPV.

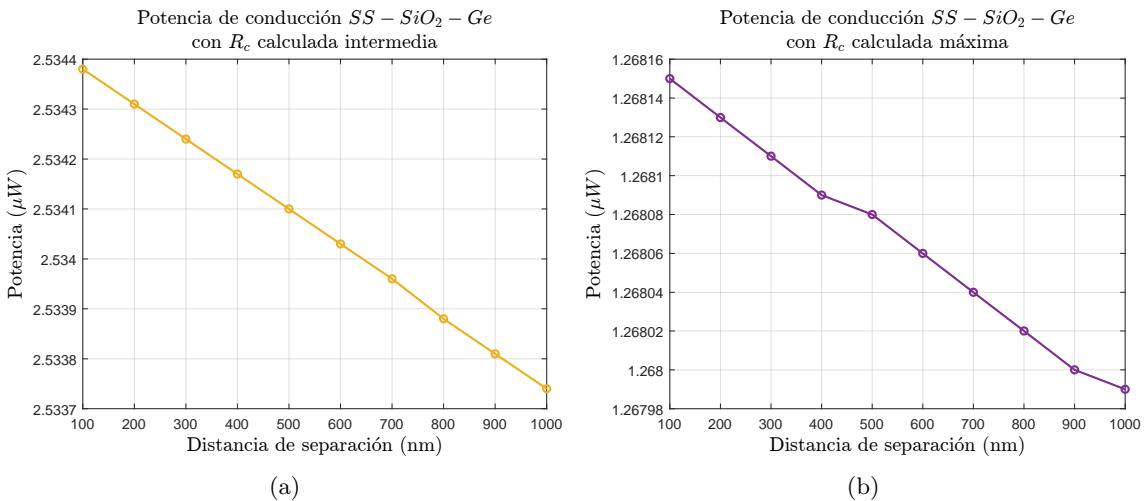


Figura 5.13: Potencias por conducción para una nTPV $SS - SiO_2 - Ge$ con R_c calculadas a partir de las conductancias térmicas [21], para una R_c máxima de $5,5 \cdot 10^{-3} m^2 K/W$ (b) y una R_c intermedia $2,75 \cdot 10^{-3} m^2 K/W$ (a) frente a las alturas de un nano-espaciadores.

Las potencias para las nTPV con R_c calculadas son del orden de μW , 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 relación muy pequeña menos de un 0.03 % para las nTPVs con R_c calculadas porque la resistencia total es mucho mayor que para la R_c empírica, relación mínima de un 3 %.

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 considera los resultados en el rango espectral de energía mayor a 0.7eV o longitud de onda de $\sim 1.8 \mu m$ porque los datos de el índice de refracción n y coeficiente de extinción k del acero inoxidable llegan hasta los $1.2 \mu m$ de longitud de onda [18], realizando 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*) y de acero inoxidable 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 los aceros.

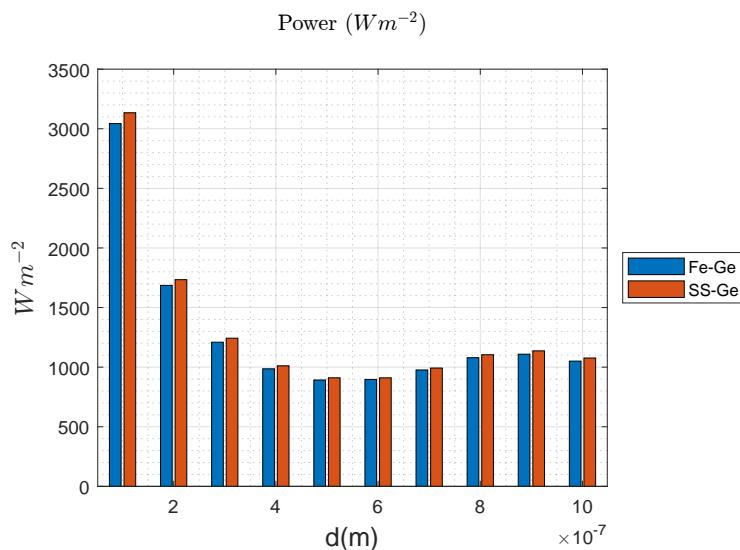


Figura 5.14: Potencias por radiación integradas en el rango espectral de energía mayor a 0.7eV para un emisor de *Fe* y un emisor de *SS* con receptor de *Ge* frente a las diferentes distancias de separación de las placas.

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 una potencia radiativa monocromática máxima 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.

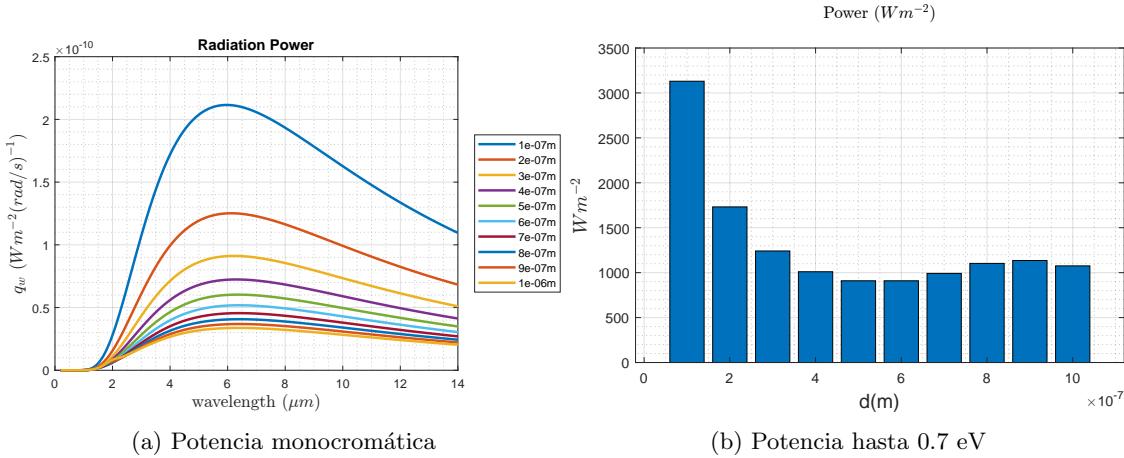


Figura 5.15: (a) Potencia radiada monocromática por campo cercano para un emisor de *SS* y una célula de *Ge*. (b) Potencia radiada para un rango de longitudes de onda cuya energía es mayor a los 0.7eV ($\sim 1.8 \mu m$).

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

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 valores superiores por un orden de magnitud para los casos con R_c y superiores a 3 para el caso sin R_c .

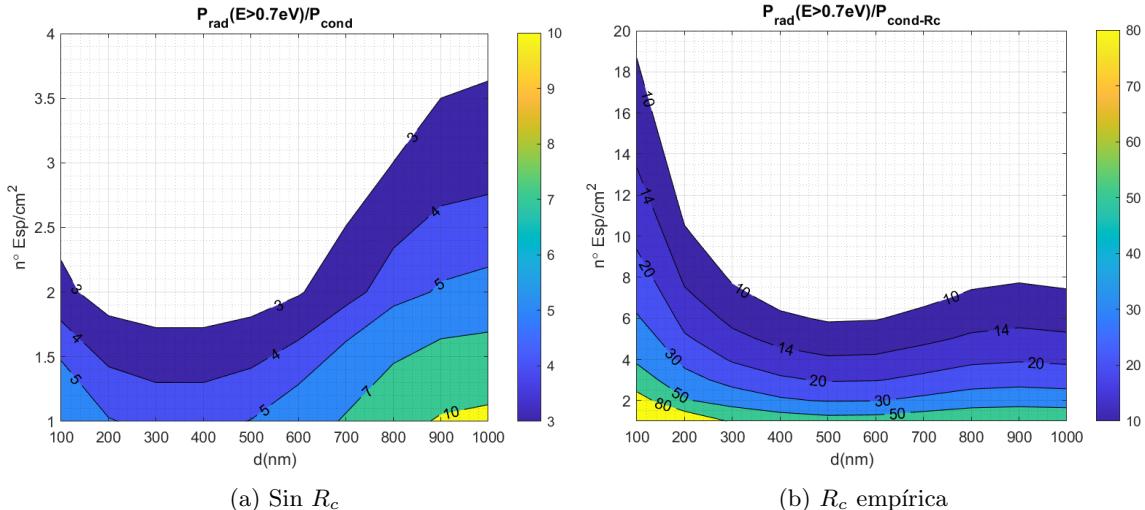


Figura 5.16: Densidades de nano-espaciadores para todas las relaciones de las potencias de radiación respecto a las conducción para un emisor de *SS* frente a las altura de los nano-espaciadores para un emisor y una célula de $1 cm^2$ sin R_c (a) y con R_c empírica (b). El espectro de colores para cada 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 de $Si - SiO_2 - Ge$ a unos $\sim 19\ n^{\circ}esp/cm^2$ (figura 5.16b) para la nTPV de $SS - SiO_2 - Ge$ porque la potencia radiada es menor para el emisor de SS que para el emisor de Si .

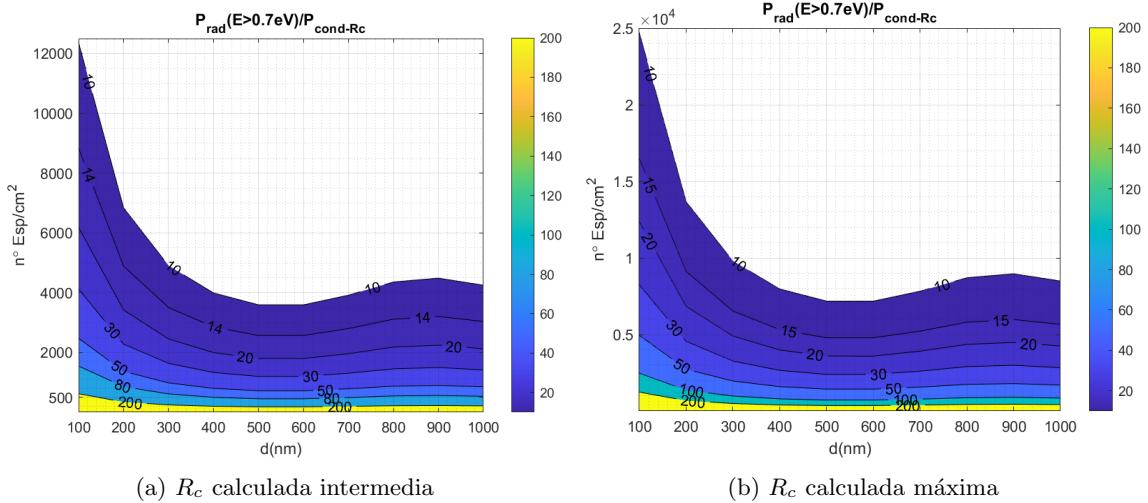


Figura 5.17: Densidades de nano-espaciadores para todas las relaciones de las potencias de radiación respecto a las conducción para un emisor de SS frente a las altura de los nano-espaciadores para un emisor y una célula de $1\ cm^2$ con R_c calculada intermedia (a) y con R_c calculada máxima (b). El 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 ordenes de magnitud. Para las relaciones de las potencias de dos ordenes 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.

Se realizan los cálculos del peor caso de estas variaciones, cuando la densidad va de su valor máximo a su valor mínimo. Para el caso con R_c empírica la variación de las densidades es de aproximadamente $12 \text{ n}^{\circ}\text{esp}/\text{cm}^2$ que representa una disminución del 66.67 % respecto al valor pico, para el caso con R_c calculada intermedia la variación es de $\sim 8500 \text{ n}^{\circ}\text{esp}/\text{cm}^2$ que es una disminución del 70.83 % y para el caso de R_c calculada máxima la variación de densidad es aproximadamente unos $18 \cdot 10^3 \text{ n}^{\circ}\text{esp}/\text{cm}^2$ que es una disminución del 72 %. Aunque al aumentar la R_c aumenta la disminución porcentual de las densidades, no es algo tan importante mientras la densidad de nano-espaciadores es lo suficientemente alta para poder mantener mejor la separación entre ambas placas manteniendo una relación de potencias de producción vs pérdidas alta, es decir, la relación entre las potencias sea al menos de un orden de magnitud.

Por último, se recopilan y agrupan 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.

Dist. (nm)	Potencias según transmisión del calor				
	Conducción ($\text{W/n}^{\circ}\text{esp.}$)				Radiación (W/m^2)
	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

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*.

5.5. Resultados de las simulaciones para una nTPV de SiC-SiO₂-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/(m²K) para el emisor de *SiC*, 26 W/(m²K) para el *Si* y 30 W/(m²K) 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 [11] 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

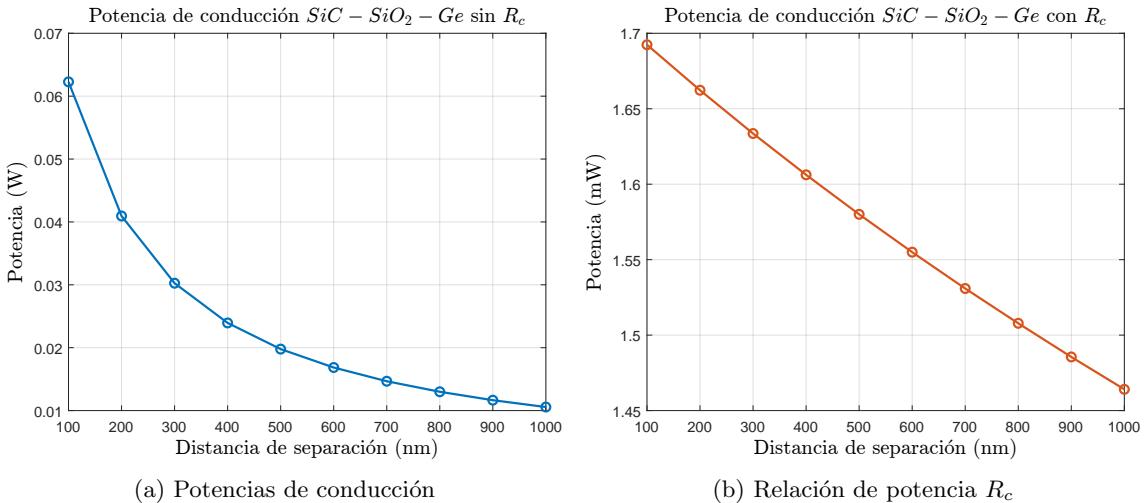


Figura 5.18: (a) Potencias de conducción para sin y con el efecto de la *R*_c empírica, eje izquierdo para el caso sin *R*_c y eje derecho para el caso con *R*_c. (b) Relación de la potencia de conducción con *R*_c respecto a sin *R*_c.

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 $\sim 0,85 \cdot 10^{-2}$ W mayor que para el emisor de *Si* pero la relación entre las potencias con *R*_c respecto a sin *R*_c es menor, no superando el 14 % como valor máximo a los 1000nm.

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 valores de potencia radiada monocromática similares 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 0.7eV frente a las distancias de separación respecto al emisor de *Si* (figura 5.19a).

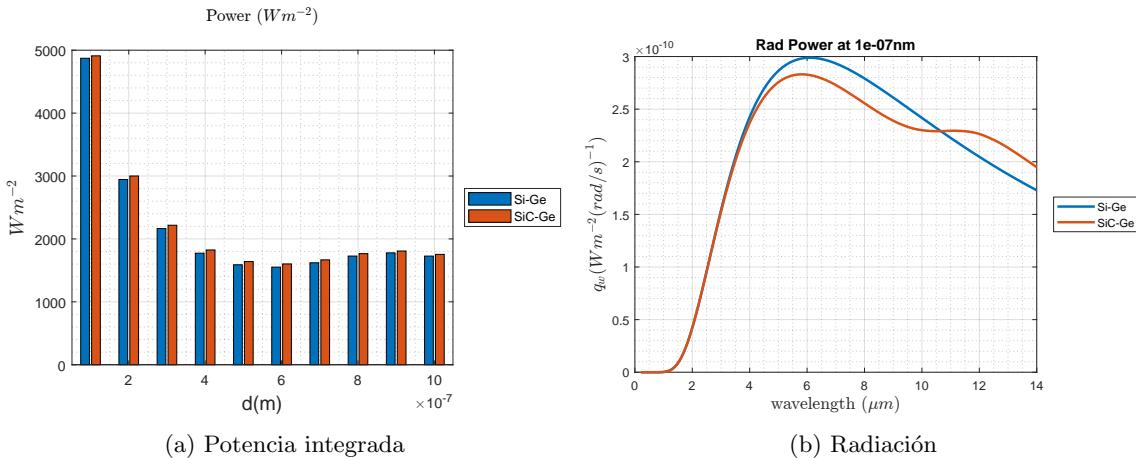


Figura 5.19: (a) Potencias integradas en el rango espectral de energía mayor a 0.7eV para un emisor de *SiC* y un emisor de *Si* frente a las distancias de separación entre emisor y receptor. (b) Potencia de radiación monocromática para un emisor de *Si* y *SiC* con un receptor de *Ge* para una distancia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

Aunque las potencias radiadas monocromáticas, es decir, frente a las longitudes de onda, difieren al aumentar la longitud de onda (λ), 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.

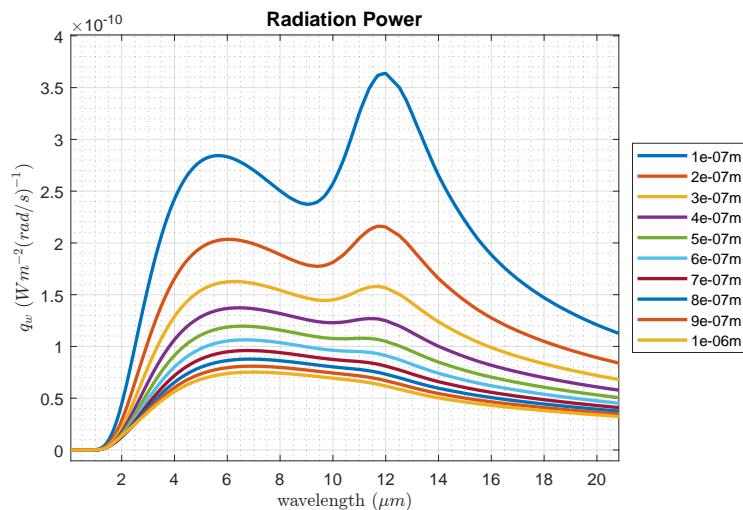


Figura 5.20: Potencias de radiación monocromática frente a las longitudes de onda para un sistema de *SiC* – *SiC* frente a diferentes distancias de separación entre placas.

También se simula un sistema con receptor de *SiC* y emisor de *SiC* para observar los efectos de la frecuencia de resonancia (ω_{res}) sobre las potencias de radiación frente a las longitudes de onda. Se observa en la figura 5.20 que la ω_{res} es aproximadamente $1,57 \cdot 10^{14} \text{ rad/s}$ ($\lambda = 12\mu\text{m}$) porque existe un pico de potencia monocromática 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 $4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{K/W}$ [17]. 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.

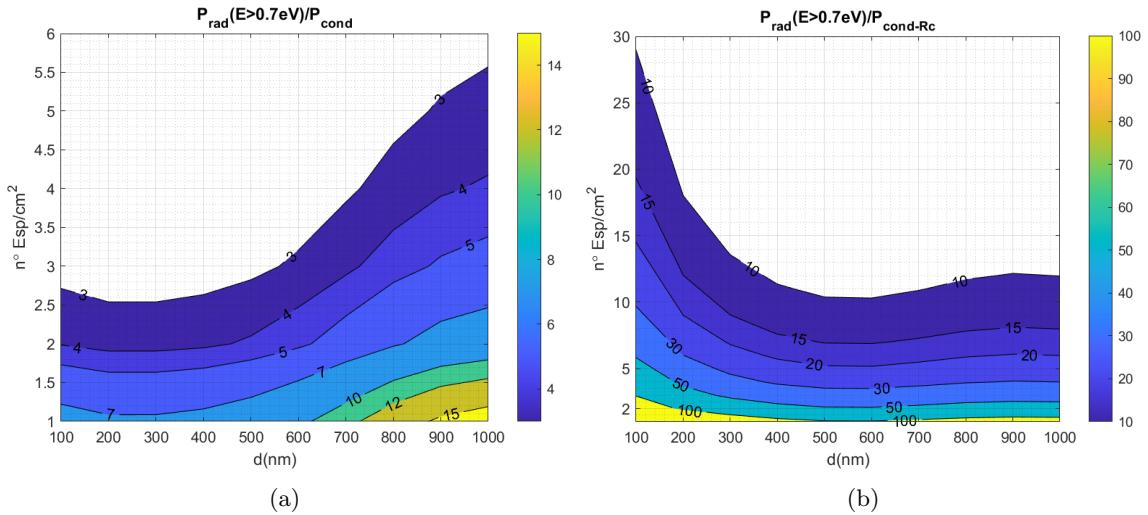


Figura 5.21: Densidades de nano-espaciadores ($n^{\circ} esp/cm^2$) frente a las alturas de los nano-espaciadores para todas las relaciones de la potencia de radiación en el rango espectral de energías mayores e igual a 0.7 eV respecto a las potencias de conducción (dependientes en la densidad de nano-espaciadores) 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.

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 agrupan 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.

Dist. (nm)	Potencias según transmisión del calor			
	Conducción (W/nº esp.)		Radiación (W/m²)	
	P_{Normal}	$P_{R_c-Empirico}$	$P_{Eg>0,7eV}$	P_{full}
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

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 *SS*.

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 fuerza de compresión del SiO_2 es de unos $1,68 \text{ MPa}$ y la densidad mayor entre los materiales de emisor y células es el acero inoxidable 304, con una densidad aproximada de 8 g/cm^3 o $8 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$. Para un emisor SS de área 1 cm^2 y espesor de $0,5 \text{ cm}$ la masa total es de unos 4 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 $3 \text{ n}^{\circ}\text{esp/cm}^2$, 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 $673 \text{ n}^{\circ}\text{esp/cm}^2$ 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 $4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ K/W}$, 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 $4 \cdot 10^{-6} m^2 K/W$ porque durante el proceso de fabricación de la nTPV, específicamente la deposición del nano-espaciador, no se llegara a conseguir depositar *SiO*₂ sino *Si*.

Potencias de Conducción (mW)			
Dist. (nm)	P_{R_c-Si}	P_{R_c-SS}	P_{R_c-SiC}
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

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.

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.

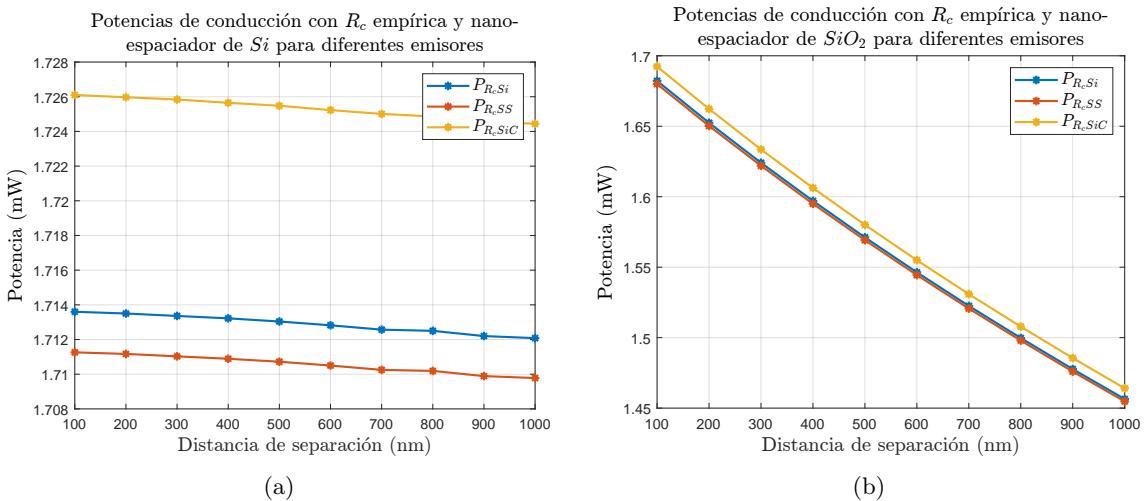


Figura 5.22: Potencias de conducción de unas nTPVs con emisores de *Si*, *SS* y *SiC* frente a las alturas de un solo nano-espaciador en nanómetros para un nano-espaciador de *Si* (a) y para un nano-espaciador de *SiO*₂ (b).

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*₂ cuya variación es menor a los 0,25 *mW* (figura 5.22b). También se observa con mayor detalle como la diferencias de las resistencias de contacto de los materiales afecta al flujo de calor, aumentando con la disminución de la resistencia de contacto o aumento de la conductividad térmica, cuyos valores se mencionan en la sección 5.5.

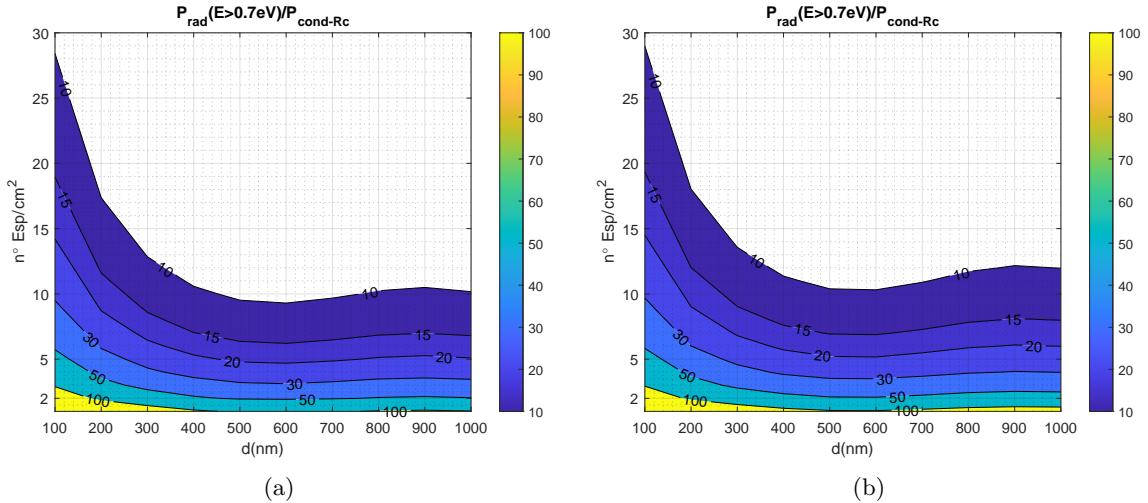


Figura 5.23: Densidades de nano-espaciadores ($n^{\circ} esp/cm^2$) frente a las alturas de los nano-espaciadores para todas las relaciones de la potencia de radiación en el rango espectral de energías mayores e igual a 0.7 eV respecto a las potencias de conducción con R_c (dependientes en la densidad de nano-espaciadores) mayores a 10 para nTPVs de nano-espaciadores de *Si* (a) y *SiO*₂(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.

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*, y se compara con las densidades de la nTPV de emisor de *SiC* pero nano-espaciadores de *SiO*₂ (figuras 5.23 a y b). 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 1000nm de altura y relación de potencias de un orden de magnitud pasando la densidad de ser 12 $n^{\circ} esp/cm^2$ (figura 5.23a) a ser 10 $n^{\circ} esp/cm^2$ (figura 5.23b).

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) las radiaciones frente al rango 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 [21], porque la mayor caída de temperatura se da en la resistencia de contacto.

6.2. Desarrollos futuros

Un posible desarrollo...

Apéndice A

Anexo ...

En este apéndice...

A.1. Lorem ipsum

 Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Maecenas ornare erat nisl, a laoreet purus pellentesque id. Duis laoreet ipsum posuere est hendrerit, quis ornare nisi iaculis. Quisque imperdiet gravida egestas. Maecenas in mauris felis. Quisque quis imperdiet enim. Curabitur dignissim eget nisi lobortis placerat. Donec et magna rutrum, tempor magna a, consectetur tortor. Donec faucibus sodales sem, eu iaculis leo eleifend id. Nam semper lectus nisl, sed molestie erat pharetra quis. Quisque vestibulum metus elit, id interdum ligula dignissim a.

 Praesent eu velit ac lectus tristique tristique vitae et tellus. Mauris dignissim feugiat orci, vitae luctus dolor finibus ut. Ut congue bibendum lectus, vitae congue ligula. Donec commodo, lacus ac iaculis scelerisque, nunc purus finibus diam, at lacinia sem justo non quam. Aenean tempor urna vitae quam pretium porta. Sed in lacinia ipsum. Class aptent taciti sociosqu ad litora torquent per conubia nostra, per inceptos himenaeos. Integer ut tristique est. Nam vitae interdum ligula, ac sodales dolor. Nulla mollis bibendum urna, sit amet interdum est aliquet at. Sed sagittis mi vel tellus posuere, eu rutrum arcu tristique.

 Vestibulum aliquet orci pharetra justo auctor, pharetra viverra felis finibus. Ut ac gravida quam. Donec egestas turpis nisi, nec elementum orci feugiat at. In hac habitasse platea dictumst. Praesent mollis sem in felis feugiat, dapibus finibus metus scelerisque. Aliquam ultricies ante quis nibh laoreet, ac aliquam justo maximus. Etiam rhoncus pharetra imperdiet.

 Nullam at libero quis augue tristique luctus eget placerat lorem. Donec pretium, dui scelerisque dapibus feugiat, ex lacus auctor ipsum, in ultricies odio justo in eros. Proin sodales velit non accumsan tempor. Mauris at consectetur est. Donec aliquam porttitor tortor, id malesuada nunc euismod vel. Ut id ullamcorper turpis, nec feugiat sapien. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Morbi aliquam tempus tortor, et gravida lectus iaculis non. Interdum et malesuada fames ac ante ipsum primis in faucibus. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Integer non maximus felis. Nullam ac tempor augue. Vestibulum in efficitur mauris. Sed in nulla ultrices, pharetra ligula et, blandit nunc. Quisque dictum magna eget diam maximus, ac pulvinar nisi tempor. Pellentesque quis feugiat elit.

Integer euismod in urna id placerat. Etiam urna elit, tempor et turpis venenatis, volutpat viverra lacus. In luctus arcu sit amet lectus rutrum, id ultricies mi pellen-tesque. Nulla bibendum, orci in elementum aliquam, mi purus sollicitudin orci, quis ornare nulla arcu placerat urna. Integer consequat, risus ac elementum pellentesque, nulla est lobortis justo, sed mattis nibh ligula nec velit. Integer sem mauris, luctus vitae venenatis a, tincidunt egestas purus. In et lectus semper, dapibus massa sed, ultrices nisi. Ut sit amet dolor porta, accumsan lectus ut, semper tellus. Praesent velit odio, facilisis quis sodales vel, molestie at risus. In sollicitudin mauris risus, ullamcorper ullamcorper ligula commodo sed. Ut libero tortor, rhoncus ut sagittis quis, fringilla nec nunc. Ut efficitur nisi id leo feugiat ultrices. Class aptent taciti sociosqu ad litora torquent per conubia nostra, per inceptos himenaeos. Sed at malesuada arcu.

Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Sed consectetur, justo nec scelerisque accumsan, leo erat dictum odio, id feugiat nibh felis vel ipsum. Duis urna ante, commodo vitae neque varius, congue egestas turpis. Donec condimentum ullamcorper dapibus. Nulla sed sapien eu diam commodo finibus. Nulla fringilla lectus vitae augue rutrum volutpat. Nulla in accumsan orci. Suspendisse eget diam massa.

Bibliografía

- [1] V. Adalid. A review on thermoelectric devices. *The Journal of Undergraduate Research at the University of Illinois at Chicago*, 9, 08 2016.
- [2] Tobias Burger, Caroline Sempere, Bosun Roy-Layinde, and Andrej Lenert. Present efficiencies and future opportunities in thermophotovoltaics. *Joule*, 4(8):1660–1680, 2020.
- [3] David G. Cahill. Thermal conductivity measurement from 30 to 750 k: the 3w method. *Review of Scientific Instruments*, 61(2):802–808, 1990.
- [4] Matthew Campbell, Thomas Celenza, Felix Schmitt, Jared Schwede, and Igor Bargatin. Progress toward high power output in thermionic energy converters. *Advanced Science*, 8, 05 2021.
- [5] Fangqi Chen, Xiaojie Liu, Yanpei Tian, Jon Goldsby, and Yi Zheng. Refractory all-ceramic thermal emitter for high-temperature near-field thermophotovoltaics. *Energies*, 15(5), 2022.
- [6] Zinovi Dashevsky, Albert Jarashneli, Yaakov Unigovski, Bohdan Dzunzda, Feng Gao, and Roni Z. Shneck. Development of a high performance gas thermoelectric generator (teg) with possible use of waste heat. *Energies*, 15(11), 2022.
- [7] A. Datas and R. Vaillon. Thermionic-enhanced near-field thermophotovoltaics for medium-grade heat sources. *Applied Physics Letters*, 114(13):133501, 2019.
- [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*, 653(1):232–240, 2003.
- [9] Gavin P. Forcade, Christopher E. Valdivia, Shengyuan Lu, Sean Molesky, Alejandro W. Rodriguez, Jacob J. Krich, Raphael St-Gelais, and Karin Hinzer. Modeling efficiency of inas-based near-field thermophotovoltaic devices. In *2021 International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices (NUSOD)*, pages 53–54, 2021.
- [10] Mathieu Francoeur, M Pinar Mengüç, and Rodolphe Vaillon. Spectral tuning of near-field radiative heat flux between two thin silicon carbide films. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 43(7):075501, feb 2010.
- [11] Mathieu Francoeur, M. Pinar Mengüç, and Rodolphe Vaillon. Near-field radiative heat transfer enhancement via surface phonon polaritons coupling in thin films. *Applied Physics Letters*, 93(4):043109, 2008.

- [12] Mathieu Francoeur, M. Pinar Mengüç, and Rodolphe 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*, 110(18):2002–2018, 2009.
- [13] Guido Guazzoni and Selma Matthews. A retrospective of four decades of military interest in thermophotovoltaics. *AIP Conference Proceedings*, 738(1):3–12, 2004.
- [14] R.P. Hamlen, H.A. Christopher, and S. Gilman. U.s. army battery needs-present and future. *IEEE Aerospace and Electronic Systems Magazine*, 10(6):30–33, 1995.
- [15] Wenxiang Huang, Lu Li, Jeremy A. Massengale, Rui Q. Yang, Tetsuya D. Mishima, and Michael B. Santos. Multistage interband cascade thermophotovoltaic devices with 0.2 ev bandgap. In *2019 IEEE 46th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)*, pages 2315–2318, 2019.
- [16] Takuya Inoue, Takaaki Koyama, Dongyeon Daniel Kang, Keisuke Ikeda, Takashi Asano, and Susumu Noda. One-Chip Near-Field Thermophotovoltaic Device Integrating a Thin-Film Thermal Emitter and Photovoltaic Cell. *Nano Lett.*, 19(6):3948–3952, June 2019. Publisher: American Chemical Society.
- [17] Kota Ito, Atsushi Miura, Hideo Iizuka, and Hiroshi Toshiyoshi. Parallel-plate submicron gap formed by micromachined low-density pillars for near-field radiative heat transfer. *Applied Physics Letters*, 106(8):083504, 2015.
- [18] J. Jyothi, A. Biswas, P. Sarkar, A. Soum-Glaude, H. S. Nagaraja, and Harish C. Barshilia. Optical properties of TiAlC/TiAlCN/TiAlSiCN/TiAlSiCO/TiAlSiO tandem absorber coatings by phase-modulated spectroscopic ellipsometry. *Applied Physics A*, 123(7):496, June 2017.
- [19] Alina LaPotin, Kevin L. Schulte, Myles A. Steiner, Kyle Buznitsky, Colin C. Kelsall, Daniel J. Friedman, Eric J. Tervo, Ryan M. France, Michelle R. Young, Andrew Rohskopf, Shomik Verma, Evelyn N. Wang, and Asegun Henry. Thermophotovoltaic efficiency of 40 %. *Nature*, 604(7905):287–291, April 2022.
- [20] Abigail S. Licht, Dante F. DeMeo, J. B. Rodriguez, and Thomas E. Vandervelde. Decreasing dark current in long wavelength inas/gasb thermophotovoltaics via bandgap engineering. In *2014 IEEE 40th Photovoltaic Specialist Conference (PVSC)*, pages 0482–0486, 2014.
- [21] Fernando 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*, 17:534–536, 10 2003.
- [22] Michael Papapetrou, George Kosmadakis, Andrea Cipollina, Umberto La Commare, and Giorgio Micale. Industrial waste heat: Estimation of the technically available resource in the eu per industrial sector, temperature level and country. *Applied Thermal Engineering*, 138:207–216, 2018.

- [23] Wan Emelin Suliza Wan Abdul Rashid, Pin Jern Ker, Md Zaini Bin Jamaldin, Mansur Mohammed Ali Gamel, Hui Jing Lee, and Nazaruddin Bin Abd Rahman. Recent development of thermophotovoltaic system for waste heat harvesting application and potential implementation in thermal power plant. *IEEE Access*, 8:105156–105168, 2020.
- [24] Jaeman Song, Jihye Han, Minwoo Choi, and Bong Jae Lee. Modeling and experiments of near-field thermophotovoltaic conversion: A review. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 238:111556, 2022.
- [25] Jesse I. Watjen, Bo Zhao, and Zhuomin M. Zhang. Near-field radiative heat transfer between doped-si parallel plates separated by a spacing down to 200 nm. *Applied Physics Letters*, 109(20):203112, 2016.
- [26] David Wilt, Donald Chubb, David Wolford, Patrick Magari, and Chris Crowley. Thermophotovoltaics for space power applications. *AIP Conference Proceedings*, 890(1):335–345, 2007.
- [27] Hang Yu, Z. Ikonic, D. Indjin, and R.W. Kelsall. The effect of interface roughness on spectral efficiency of thermophotovoltaics with multi-layer filters. *Optik*, 257:168663, 2022.
- [28] Wenhui Zhu, Guang Zheng, Sen Cao, and Hu He. Thermal conductivity of amorphous SiO₂ thin film: A molecular dynamics study. *Scientific Reports*, 8(1):10537, July 2018.