



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

Cotutor: Esther López Estrada
Instituto de Energía Solar

Tutor: Pablo García-Linares

Fontes

Departamento: Ingeniería
Eléctrica, Electrónica,
Automática y Física Aplicada

Madrid, Septiembre, 2022

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

Autor: Martín Augusto Reigadas Terán

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. Radiación	11
2.2.3. Conducción	12
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	16
3.2.1. Granta EduPack 2021 R2	17
3.2.2. Refractive Index	17
3.2.3. Autodesk Inventor Professional 2021	17
3.2.4. Autodesk CFD	18
3.2.5. MATLAB	19
3.2.6. Calculadora de campo cercano	19
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 seguidos en la realización de las simulaciones de trans- misión de calor 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	31
5.1. Resultados	31
5.2. Discusión	31
6. Conclusiones	33
6.1. Conclusión	33
6.2. Desarrollos futuros	33
A. Anexo ...	35
A.1. Lorem ipsum	35
Bibliografía	37

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	12
2.4.	Flujos de radiación monocromática por variación de grosor de emisor y variación de distancia	13
3.1.	Icono de Autodesk Inventor Professional 2021	18
3.2.	Icono de Autodesk CFD	18
3.3.	Icono de MATLAB	19
3.4.	Pestaña <i>Potencia Radiada</i> de la calculadora de campo cercano	20
3.5.	(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.	20
3.6.	Pestaña de la Potencia	21
3.7.	Pestaña de los datos de n y k de los materiales disponibles	21
4.1.	(a) Cajetilla para la selección de la opción de simular un rango de distancias. (b) Cajetilla 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 simular, 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

Índice de tablas

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.

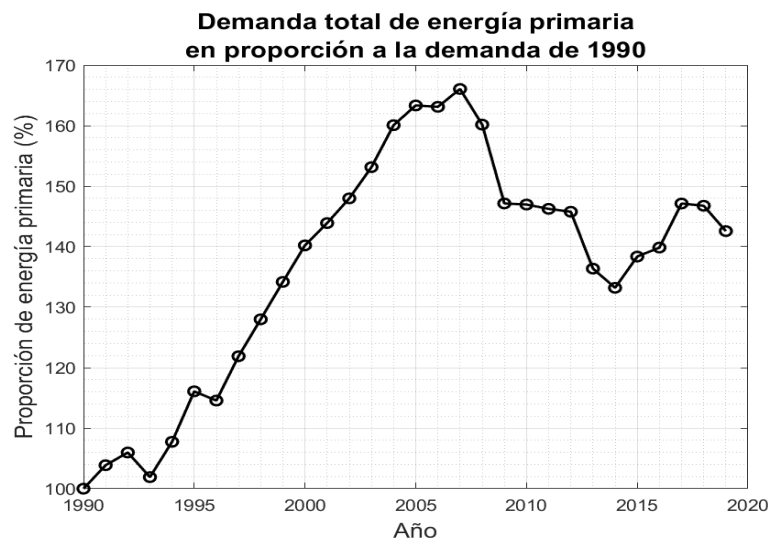


Figura 1.1: Representación gráfica de la relación entre la demanda total de energía primaria anual de 1990 hasta 2019 en España. *Fuente obtención de datos: Ministerio para la transición ecológica y el reto demográfico de España.*

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 la energía consumida no es completamente aprovechada, llamada calor residual. En 2015, la industria en España consumió aproximadamente 220 TWh de energía, desperdiciándose unos 22 TWh según los cálculos de las estimaciones realizadas en [17].

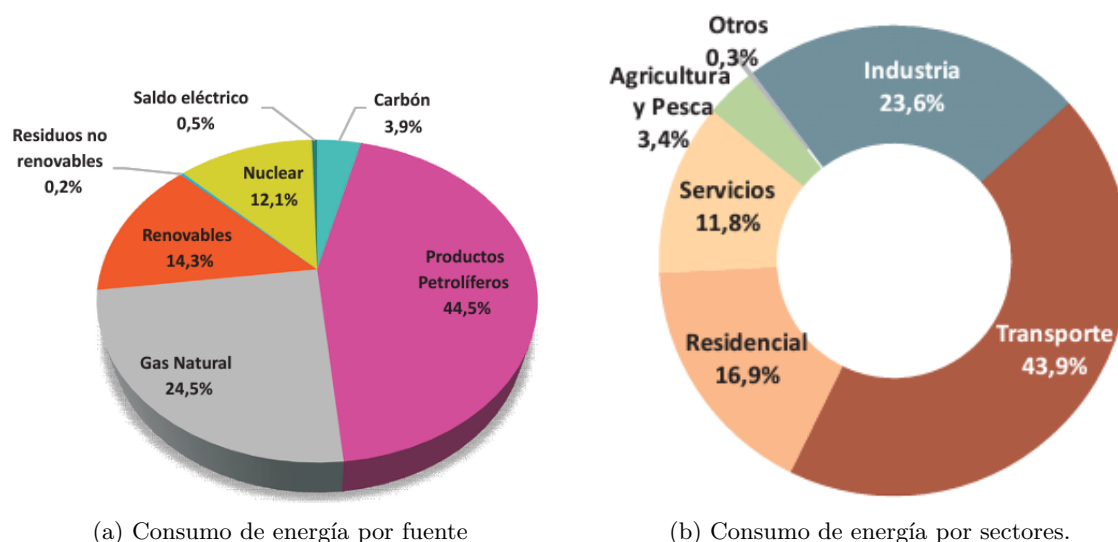


Figura 1.2: Desglose del consumo de energía primaria en España 2019 por fuente de energía(a). Consumo de energía final por sectores en el año 2019 en España(b). Fuente: Ministerio para la transición ecológica y el reto demográfico de España.

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, termoiónicos, entre otros.

La conversión termo-eléctrica por vías mecánicas es la más conocida y es altamen-

te 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.

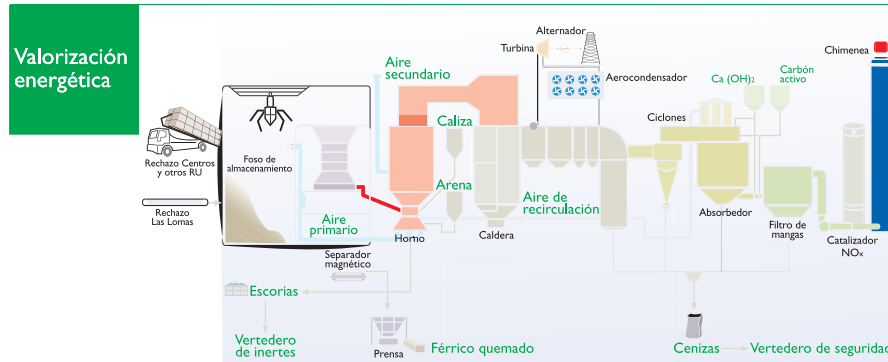


Figura 1.3: Planta de valorización energética del Centro Las Lomas del Parque Tecnológico de Valdemingómez, donde se aprovecha los gases a alta temperatura para producir vapor de agua en la caldera para mover unas turbinas conectadas a generadores para producir electricidad. *Fuente: Ayuntamiento de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

El problema principal con un sistema de este tipo son las partes móviles, las cuales tienen que estar en constante mantenimiento, para disminuir el mantenimiento se puede pasar a un sistema de recuperación de calor residual directo, ya sea con un dispositivo termoelectrónico, termoiónico o termofotovoltaico. Además de no presentar partes móviles o tener que tratar con fluidos, estos sistemas se pueden utilizar para varias aplicaciones, por ejemplo la espacial, donde la presión atmosférica es nula y la fuerza gravitacional total no es aproximadamente constante, o en la automoción donde se puede aprovechar las altas temperaturas de los motores para alimentar las luces o los circuitos electrónicos del vehículo.

Los dispositivos termoelectrónicos 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.

Los dispositivos termoelectrónicos 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 %, aunque hasta el momento la efi-

ciencia ha llegado como máximo hasta aproximadamente 15 %, 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 la emisión termoiónica se produce un flujo de electrones entre el emisor metálico a alta temperatura y un receptor a menor temperatura, separados por el vacío. Al aumentar la temperatura del emisor, los electrones libres se excitan hasta tal punto que la energía es lo suficientemente grande como para que se desprendan del material, la densidad de corriente está determinada por la ley de Richardson, donde $J = A \cdot T^2 \cdot e^{\frac{-W}{kT}}$, 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 transferencia 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 por encima por la de un cuerpo negro según Planck.

La eficiencia de las TPVs 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 Wcm^{-2} [23].

Los dispositivos que aprovechan los efectos de campo cercano presentan la dificultad de mantener la separación de manera constante por lo tanto se han fabricado y probado en varias ocasiones espaciadores de alturas desde un par de micras hasta unos pocos de cientos de nanómetros, con diferentes geometrías y materiales. Por ejemplo, en [5] 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 termo-fotovoltaico, 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.

- Modelar el emisor y la célula del sistema TPV para que los gradientes térmicos por conducción no lleguen a los bordes.
- 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.

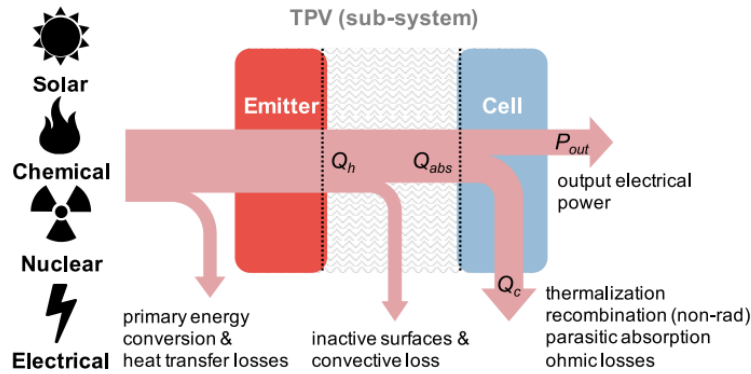


Figura 2.1: Flujo de conversión de la energía térmica en energía eléctrica. *Fuente:* [1]

El emisor se encuentra a una alta temperatura lo cual produce que se transmite el calor en forma de radiación que al llegar a la célula es reflejada, transmitida o absorbida, la porción de radiación absorbida excita a los electrones produciendo un par electrón-hueco si solo si 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 [1].

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 [11], cumpliéndose en 2004 40 años de investigación sin conseguirse potencias por encima de 500W [10]. 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 [21]. 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 [18].

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 [8], aplicación de filtros [22] y capas reflectantes para la recuperación de fotones y disminución de calentamiento [4], la combinación con un TEC para aumentar la densidad de potencia y eficiencia total del sistema generador [2, 4], y la disminución del espacio entre emisor y célula para aprovechar los efectos de la radiación de campo cercano [4, 6, 13].

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 energética 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 significativa cantidad de energía térmica por la densidad de corriente oscura [12]. Esta corriente se consigue disminuir al introducir una barrera entre las capas [15].

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 [19].

Habitualmente estas capas se usan en las TPVs y TICs, como por ejemplo se usan en [4, 6, 14]. Los filtros se utilizan para evitar la transmisión de radiación no deseada la célula, consiguiéndose un aumento de la eficiencia del 45 % al 75 %, estos filtros pueden ser de una o múltiples capas que la rugosidad de la interfaz degrada seriamente la eficiencia, lo que se puede mejorar con una poca cantidad de capas [22].

En [3] se estudian diferentes combinaciones de cerámicas para el emisor de una TPV a 2000°C y célula a 400°C, observando los flujos espectrales de calor, la po-

tencia total y el rendimiento, siendo la máxima potencia por metro cuadrado para el emisor de B_4C con unos 7.45 Wm^{-2} pero solo con una eficiencia del 11.74 %, a diferencia del BeO con una potencia de 3.19 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.

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 [4] utilizan un dispositivo termofotovoltaico de campo cercano mejorado con termoiónico (nTiPV) con un emisor de Tungsteno con una capa de LaB_6 a unos 2000K, que mejora el rendimiento de una TPV de un 10 % de eficiencia a un 30 % y un aumento de densidad de potencia de unos 10 Wm^{-2} a unos 70 Wm^{-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 reflejar los fotones de baja energía.

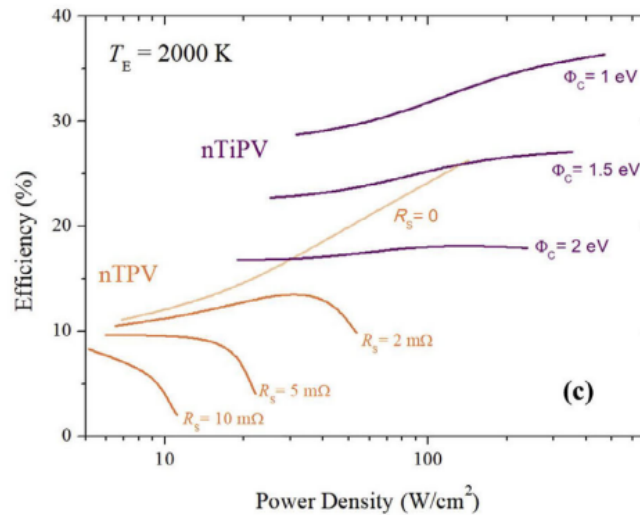


Figura 2.2: Relación entre densidad de potencia y eficiencia entre dispositivos nTPVs y nTiPVs. Fuente: [4]

Los dispositivos TPV que aprovecha el efecto de campo cercano se denotan como dispositivos NF-TPV, NF-TPV o nTPV, esto en combinación con el objetivo de disminuir la contaminación, aprovechar la energía desperdiciada en forma de calor y utilizar baterías más baratas con gran almacenamiento de energía ha impulsado bastante las investigaciones al respecto de la tecnología NF-TPV. Siendo el aumento de la eficiencia para igualar a la actual de campo lejano de 40 % [14] un objetivo interesante, en [6] se modeló la eficiencia de un NF-TPV basado en InAs con emisor a 700K y radiador de la célula a 300K, alcanzándose una 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.

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 [7] que proporciona varias ecuaciones para calcular la potencia radiada para varios grosores 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 función dieléctrica compleja de los materiales.

Una ventaja que presenta los NF-TPV es la frecuencia de resonancia (ω_{res}), que produce una mejora o aumento del flujo radiado a dicha frecuencia. En [8] utilizan 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 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 [20] que estudia la transferencia de calor entre dos placas de Si separadas 200nm por vacío y utilizando espaciadores de SiO₂ 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 la existencia de las resistencias de contacto entre cada interfaz, teniendo una gran importancia en [13] que estudia la radiación por campo cercano entre dos placas de cuarzo con pilares de pirámides truncadas de SiO₂ que están depositados sobre el sustrato inferior, descubriéndose 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.

2.2.2. Radiación

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

Radiación propagación o campo lejano

La radiación de campo lejano cumple la regla de Planck sobre la emitancia monocromática de un cuerpo negro ($E_\lambda^{bb}(T)$) (ecuación 2.1), cuyo valor total 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.

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

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

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.

Para la radiación de propagación en campo cercano se denota se resuelve de otra manera, que en el caso más sencillo el emisor y el receptor son cuerpos planos y gruesos (figura 2.3), la ecuación que modela el flujo de calor por frecuencia de un emisor (nº1) a un receptor (nº3) separados por el vacío (nº2) es [7]:

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

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 [9].

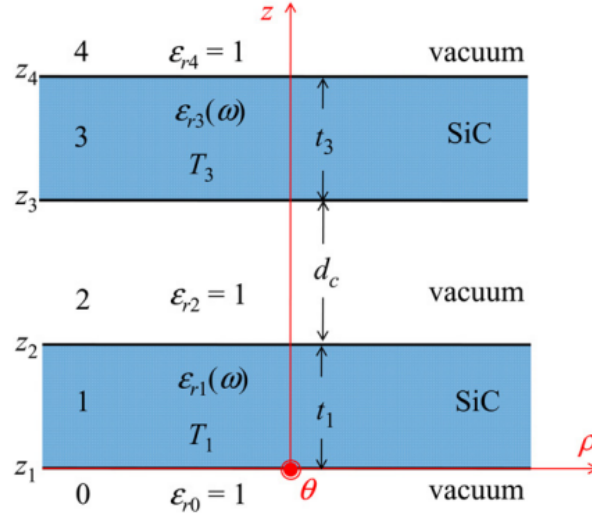


Figura 2.3: Esquemático de la representación geométrica para el flujo entre dos cuerpos separados por vacío. Fuente: [7]

La ecuación 2.4 es para dos placas gruesas separadas por un vacío y rodeadas por vacío, se obtiene de las ecuaciones presentadas en [9], 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

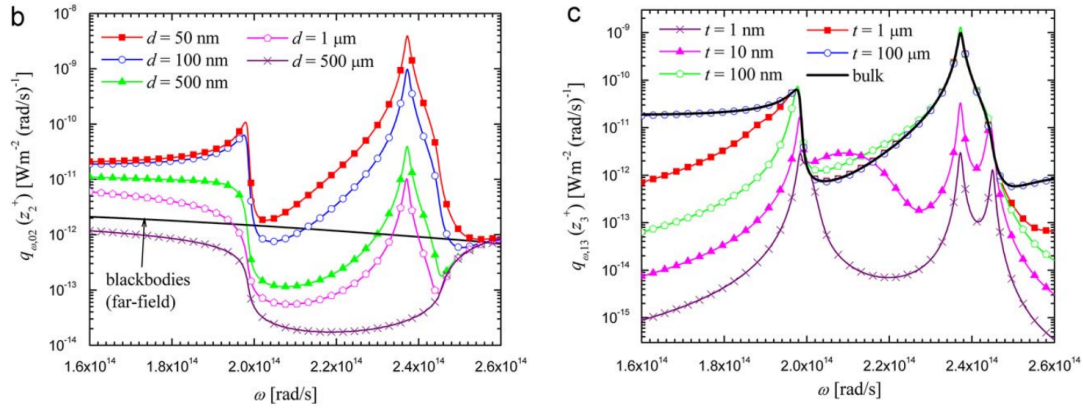
La radiación evanescente se transmite distancias muy pequeñas la cual puede ser aprovechada para la recuperación del calor residual, introduciéndose un algoritmo general para el análisis de un sistema unidimensional multi-capa basado en las funciones de dyadic Green y la amplitud para cada capa es calculada con una matriz de dispersión [9], obteniéndose para el caso de dos capas gruesas separadas por vacío una distancia d_c , el flujo de la radiación evanescente [7] 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 $100\mu m$ de grosor del emisor se puede considerar como una placa gruesa [9].

2.2.3. Conducción

La transmisión de calor por conducción se dá a través de uno o varios cuerpos, producido por la diferencia de temperatura entre las caras opuestas del conjunto o



(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: [9]*

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 [16] comparan la desviación entre los experimentos y la teoría de la resistencia de contacto entre varios materiales, siguiendo el modelo teórico utilizado para la zona plástica una ecuación simplificada, que para dos aceros inoxidables 304 la diferencia entre experimentación y teoría disminuye con el aumento de la presión.

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 a utilizar para cada uno de los componentes del sistema TPV, incluyendo los criterios seguidos de su selección.

3.1.1. Nano-espaciador

El nano-espaciador es de Dióxido de Silicio (SiO_2), 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 [23].

3.1.2. Célula

La célula es en una primera instancia de Silicio (Si) para la realización de unas pruebas de simulación iniciales, se utiliza Silicio para dichas pruebas por ser muy 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 el emisor se utilizan 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 se ha utilizado para el aumento de potencia de radiación en campo cercano, aunque es mayor para una capa fina de SiC cercano a la frecuencia de resonancia [8].

Se tomaron en cuenta otros materiales que han sido descartados por varias razones, entre ellas ser muy caros, tener baja potencia de radiación de campo cercano respecto a una célula de Ge, entre otros. Dichos materiales son los siguientes:

- **Antimoniuro de Galio (GaSb):** Semiconductor con punto de fusión de 710°C que es menor a los 800°C que se encuentra el emisor, por lo cual no se puede utilizar porque empezará a pasar a estado líquido antes de llegar a la temperatura deseada.
- **Grafito:** es un material relativamente barato con 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 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 datos 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 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.

El 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 3.1: 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.

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 con la ayuda de un medio fluido.



Figura 3.2: 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 espaciador en formato CSV.
- Obtención de un modelo de simulación desde Autodesk Inventor,

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.

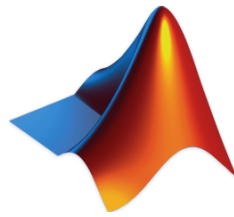


Figura 3.3: Icono de MATLAB

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 porque el código principal de cálculo de transferencia de calor por radiación de campo cercano proporcionado está desarrollado en MATLAB.

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 utilizando un código proporcionado que está escrito en MATLAB que cumple con las ecuaciones de campo cercano de [7] para dos placas planas gruesas y a partir de dicho código se desarrolla una aplicación en el App Designer de MATLAB para facilitar el proceso de calcular cualquier combinación de materiales para el emisor y la célula para ciertas distancias de separación. Se aprovecha la Toolbox Parallel Processing para realizar los cálculos con hilos y así disminuir los tiempos de simulación.

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 3.4), 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 y no influye en los cálculos. También muestra la gráfica de los resultados obtenidos de la simulación para cualquier combinación

excepto cuando se eligen varios materiales y un rango de distancias.

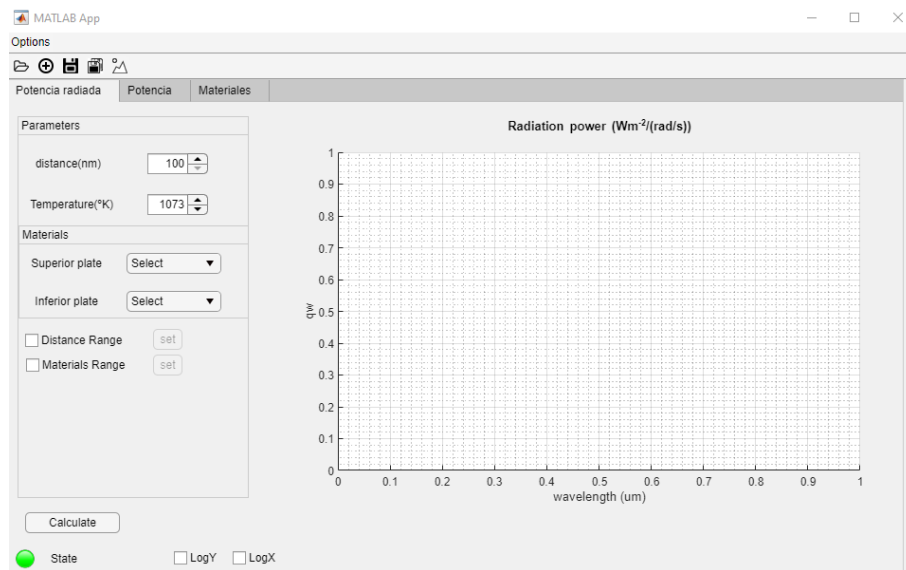
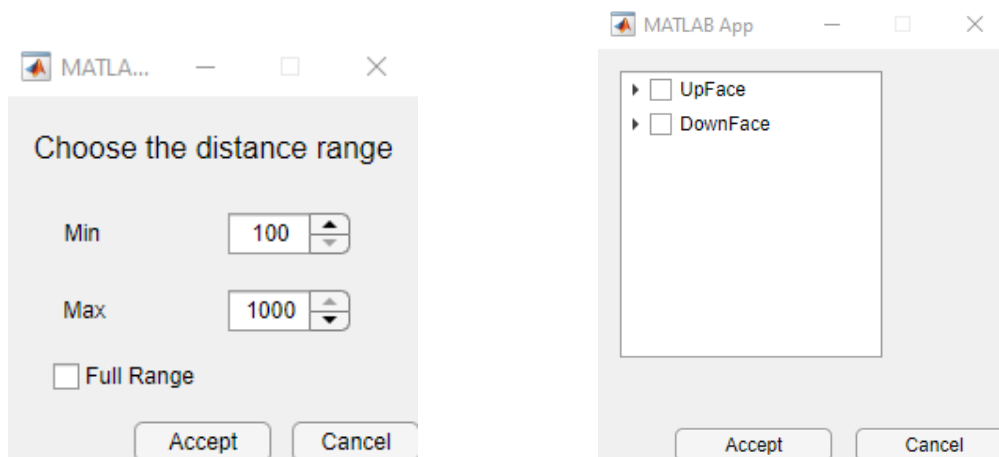


Figura 3.4: Pestaña *Potencia Radiada* de la calculadora de campo cercano

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 3.5b). Para la selección del rango de distancias se abre una nueva ventana de una GUI donde se el paso entre para variar las distancias límites es 100nm, las distancias máxima y mínima son 1000nm y 100nm (figura 3.5a). Antes de realizar los cálculos se realiza una interpolación lineal de los valores de n y k de los materiales para que coincidan los puntos para cada longitud de onda.



(a) Ventana de selección de rango de distancias

(b) Ventana de selección de materiales

Figura 3.5: (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 3.6) 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 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, los de la potencia radiada o ambos se pueden guardar en un archivo excel.

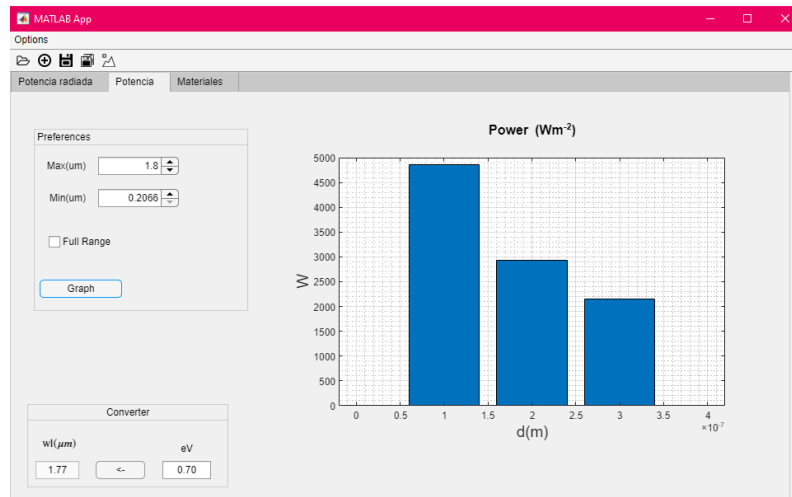


Figura 3.6: Pestaña de la Potencia

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 3.7.

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

Figura 3.7: 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, teniendo en cuenta que para el acero inoxidable se extrapolaron los datos de n y k desde $1.2 \mu\text{m}$ hasta los $1.8 \mu\text{m}$ que equivalen a 0.7 eV .

Cabe destacar que la aplicación sigue en fase de desarrollo y todavía no se ha terminado de agregar todas las funcionalidades deseadas, y arreglar los bugs.

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 la obtención de las propiedades de los materiales utilizados en las simulaciones de transmisión de calor por conducción según la escala utilizada en el modelado 3D del nano-espaciador, 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 deposición catódica 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 $3\mu m$ por ser la unidad mínima que se es capaz de depositar en la célula para disminuir las pérdidas por conducción.

Para el modelado 3D en Inventor se toma como distancia mínima el milímetro, correspondiente a 100nm de la realidad que es la distancia mínima de todos componentes del sistema, para el caso de altura mínima del nano-espaciador a simular.

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 la realidad del modelo 3D o del modelo a simular se utilizará el apóstrofe 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:

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

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.

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

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.

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

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

Para los casos que la resistencia de contacto es presentada como conductancia de contacto según un modelo matemático [16], 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 4.8a), 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 rugosidad de la superficie i (ecuación 4.8b), H_c es la micro-dureza Vickers del material más duro y P es la presión aplicada [16].

$$m = \sqrt{m_1^2 + m_2^2} \quad (4.8a)$$

$$\sigma = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2} \quad (4.8b)$$

Las ecuaciones son para la conductancia de contacto (h_c) entre dos aceros inoxidables 304(SS304), entonces para tener una mejor idea como la resistencia de contacto afecta a la conducción de calor se supone 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-SiO₂.

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

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

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.

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

$$h_c = k_s \cdot Cte \quad k_s = 2 \cdot \frac{k_1 \cdot k_2}{k_1 + k_2}$$

Donde Cte es una constante que es igual para el caso de los aceros y el caso SS-SiO₂. 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 $1,5 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$ y el valor de k_{SS} es de $15 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$, quedando la relación de conductancias de contacto como $h'_c/h_c = 0,1818$.

4.3. Procedimientos seguidos en la realización de las simulaciones de transmisión de calor y extracción de resultados

A continuación se describen los procedimientos seguidos en este trabajo para 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 la simulación.

4.3.1. Para la radiación de campo cercano

Hay cuatro casos de simulaciones de transmisión de campo cercano que se puede realizar, para este trabajo se realizó una simulación de la combinación de varios

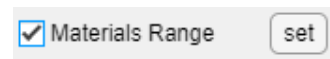
4.3. PROCEDIMIENTOS SEGUIDOS EN LA REALIZACIÓN DE LAS SIMULACIONES DE TRANSMISIÓN DE CALOR

materiales con un rango completo de distancias. Para realización de las simulaciones de transmisión de calor por campo cercano de este trabajo, obteniéndose la potencia radiada y 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).



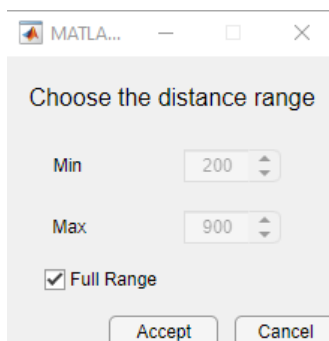
(a) Rango de distancias



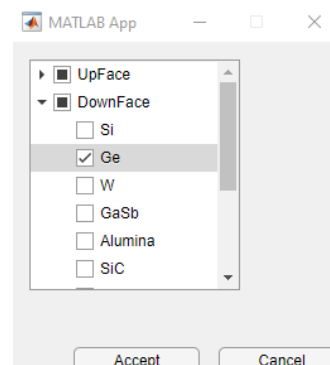
(b) Rango de materiales

Figura 4.1: (a) Cajetilla para la selección de la opción de simular un rango de distancias. (b) Cajetilla 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 cajetilla **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 simula, 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.

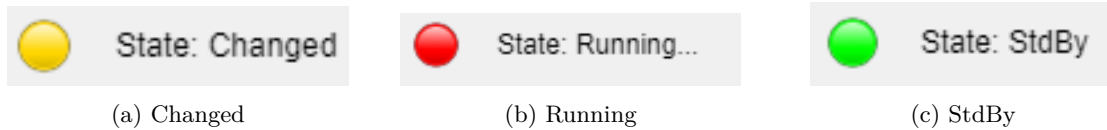


Figura 4.3: Indicadores del estado actual del sistema. (a) Indicador del estado **Changed** o estado de cambio, se activa cuando se produce algún cambio en los datos seleccionados para simular. (b) Indicador del estado **Running** o corriendo, se activa cuando estando en el estado **Changed** se hace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

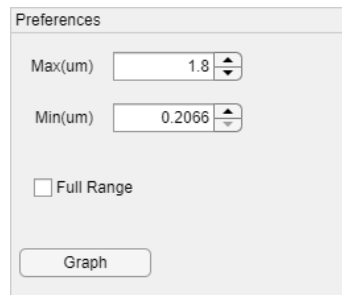


Figura 4.4: Preferencias para el cálculo de la potencia

El procedimiento seguido en este trabajo se encuentra detallado paos 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).

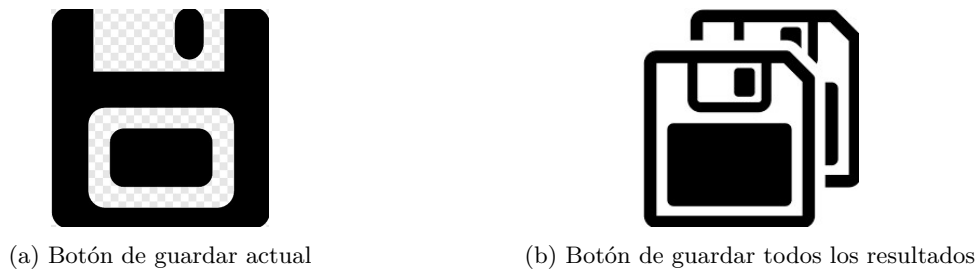


Figura 4.5: (a) Botón de guardar los resultados obtenidos de los cálculos o la simulación, dependiendo de la pestaña que se encuentre el usuario de la calculadora de campo cercano. (b) Botón de guardar todos los resultados obtenidos de los cálculos y simulación.

4.3. PROCEDIMIENTOS SEGUIDOS EN LA REALIZACIÓN DE LAS SIMULACIONES DE TRANSMISIÓN DE CALOR

4.3.2. Para la conducción térmica

Las simulaciones de transmisión de calor por conducción se realizaron todas en CFD, siguiendo un mismo conjunto de pasos. Dichos pasos son los siguientes:

- 1.
- 2.

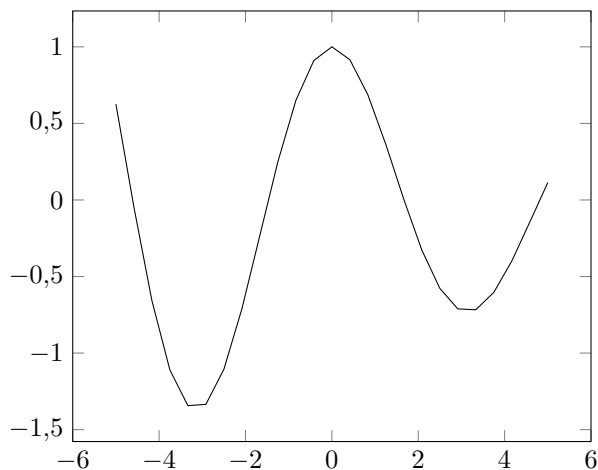
Capítulo 5

Resultados y discusión

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de las simulaciones de transmisión de calor por conducción y radiación, comparando varios casos de estudio de diferentes materiales de emisor y célula, como varias distancias de separación entre el emisor y la célula.

5.1. Resultados

5.2. Discusión



Capítulo 6

Conclusiones

Se presentan a continuación las conclusiones...

6.1. Conclusión

Una vez finalizado el proyecto...

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 pellentesque. 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] Tobias Burger, Caroline Sempere, Bosun Roy-Layinde, and Andrej Lenert. Present efficiencies and future opportunities in thermophotovoltaics. *Joule*, 4(8):1660–1680, 2020.
- [2] 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.
- [3] 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.
- [4] A. Datas and R. Vaillon. Thermionic-enhanced near-field thermophotovoltaics for medium-grade heat sources. *Applied Physics Letters*, 114(13):133501, 2019.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] 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.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] Guido Guazzoni and Selma Matthews. A retrospective of four decades of military interest in thermophotovoltaics. *AIP Conference Proceedings*, 738(1):3–12, 2004.

- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] 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.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] Wan Emilin Suliza Wan Abdul Rashid, Pin Jern Ker, Md Zaini Bin Jamaludin, 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.
- [19] 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.
- [20] 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.
- [21] David Wilt, Donald Chubb, David Wolford, Patrick Magari, and Chris Crowley. Thermophotovoltaics for space power applications. *AIP Conference Proceedings*, 890(1):335–345, 2007.
- [22] Hang Yu, Z. Ikonik, D. Indjin, and R.W. Kelsall. The effect of interface roughness on spectral efficiency of thermophotovoltaics with multi-layer filters. *Optik*, 257:168663, 2022.

- [23] 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.