

Energia i societat

Nous materials per a la societat del futur

F Xavier Álvarez

(email: xavier.alvarez@uab.cat)

Andrés Cantarero, Carla de Tomás, Daniel Möller, Aitor Lopeandia, Javier Rodriguez, David Jou



Tailoring electronic and phononic properties of nanomaterials: towards ideal THERMoelectricity

A CONSOLIDER-INGENIO 2010 project (grant agreement CSD2010-00044)

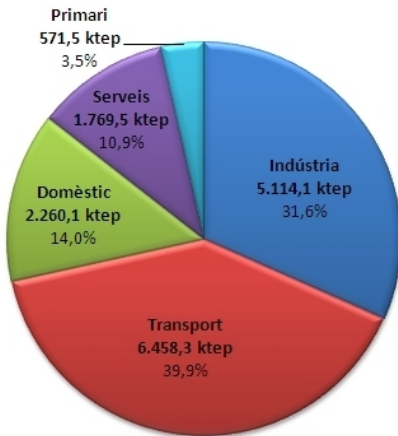
Contingut

- 1 Eficiència contra potència
- 2 Nova relació amb l'energia
- 3 Reciclatge de l'energia
- 4 Una mica de termodinàmica
- 5 Termoelectrics
- 6 Nanotecnologia
- 7 Nanociència
- 8 Fonònica
- 9 Simulacions

D'on venim?



D'on venim?



D'on venim?



D'on venim?

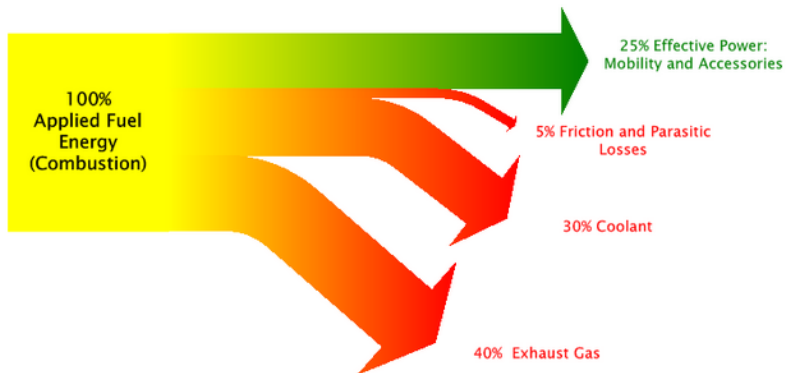


D'on venim?



D'on venim?

Typical Energy Split in Gasoline Internal Combustion Engines



Problemes actuals



Problemes actuals



Problemes actuals



On anem



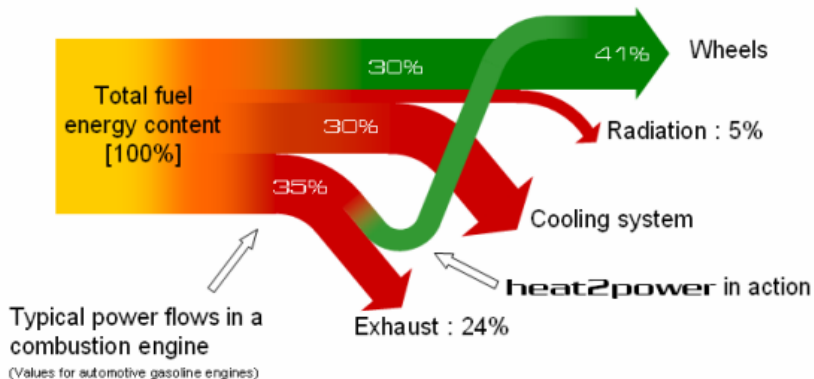
On anem



On anem



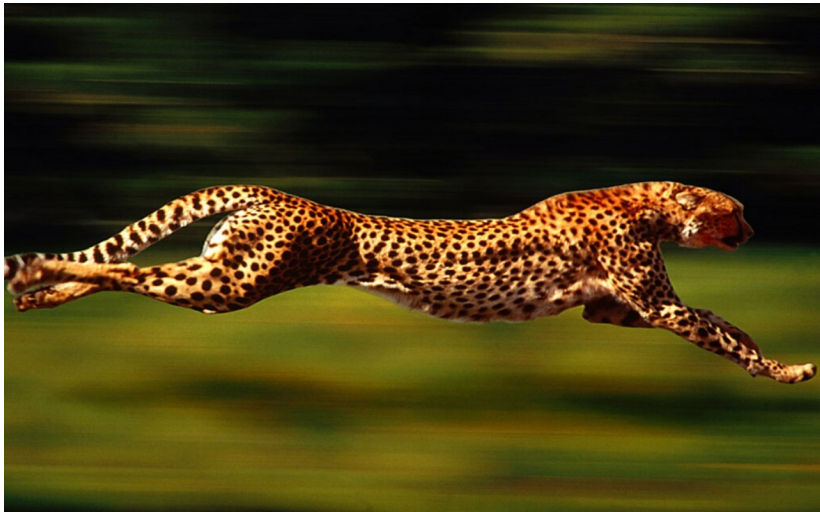
On anem



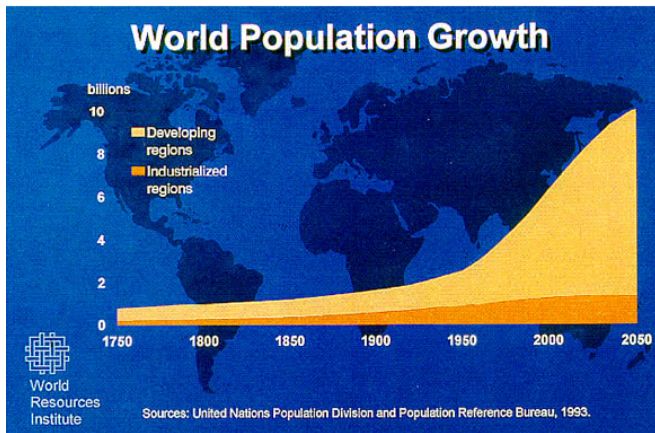
Energia + neta



Energia + lenta

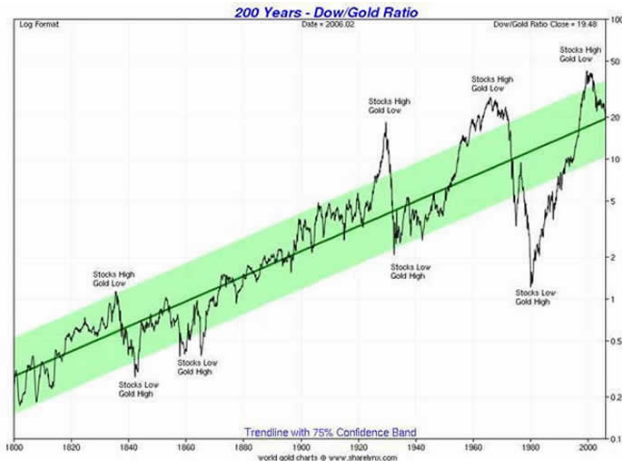


No més creixement ilimitat



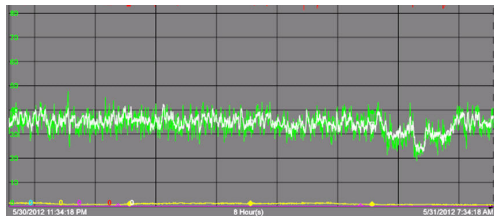
+ creixement = + potència = - eficiència

Economia sostenible



Sostenibilitat econòmica vs Creixement econòmic

Sostenibilitat = Equilibri



Rebuig



Reciclatge



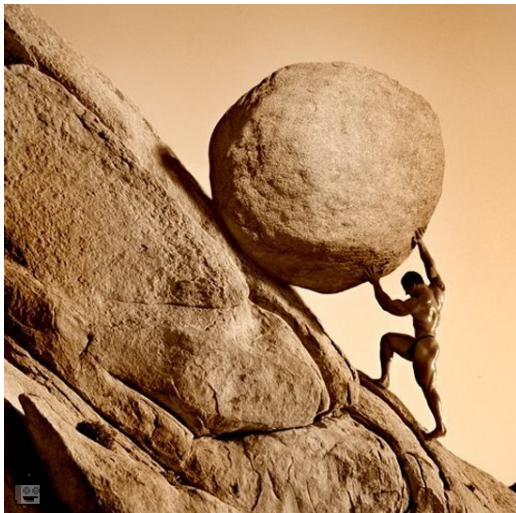
Reciclatge



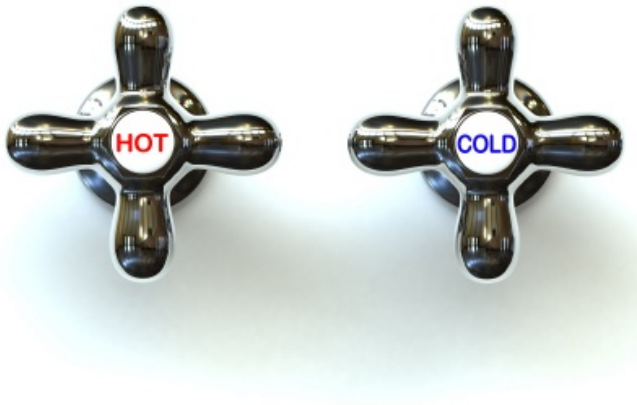
Reciclatge



Degradació de l'energia



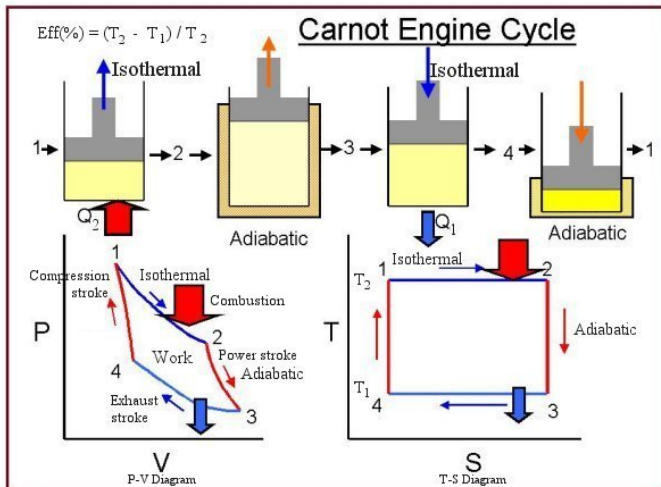
Degradació de l'energia



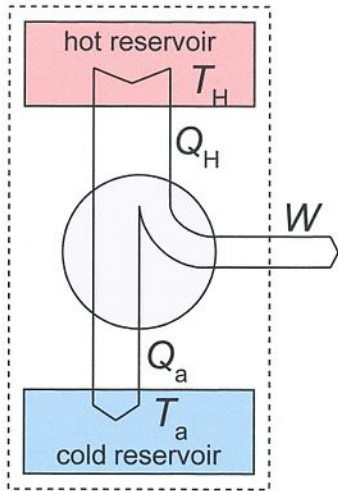
Reciclatge



Màquines tèrmiques



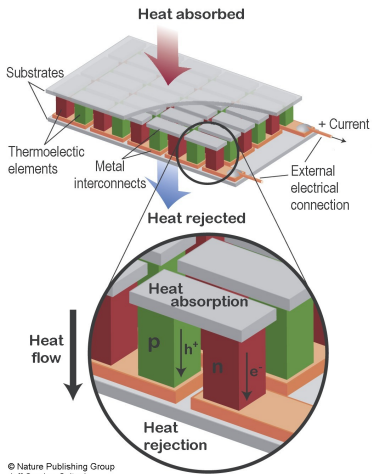
Eficiència



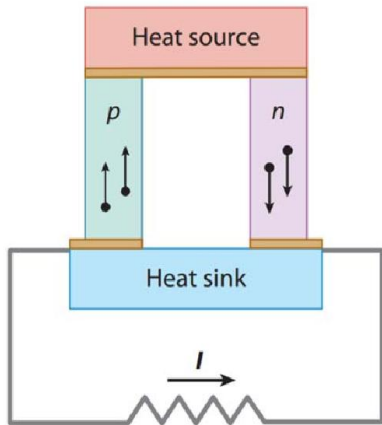
$$\eta = 1 - \frac{Q_a}{Q_H} \quad (1)$$

$$\eta = 1 - \frac{T_a}{T_H} \quad (2)$$

Termoelèctrics



Termoelèctrics



$$\eta = 1 - \frac{Q_a}{Q_H} \quad (3)$$

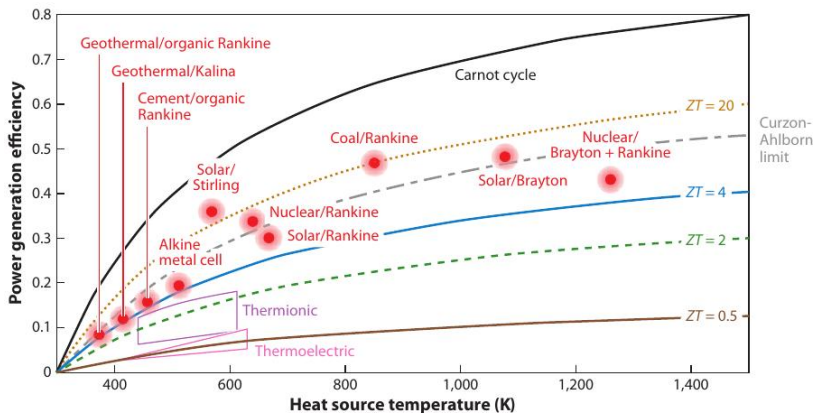
$$W = I \cdot R \quad (4)$$

Figura de mèrit

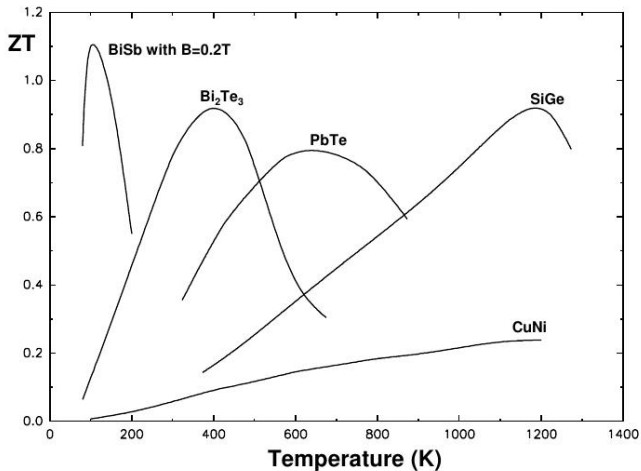
$$\eta = \left(1 - \frac{T_a}{T_H}\right) \frac{\sqrt{1 + ZT} - 1}{\sqrt{1 + ZT} + \frac{T_a}{T_H}} \quad (5)$$

$$ZT = \frac{\sigma S^2 T}{\kappa_p + \kappa_e} \quad (6)$$

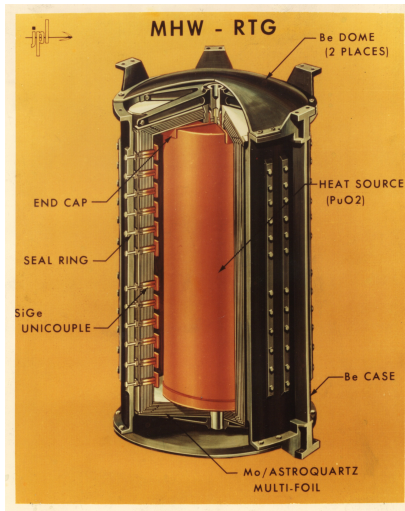
Eficiència Clàssica



Materials utilitzats



Aplicacions classiques



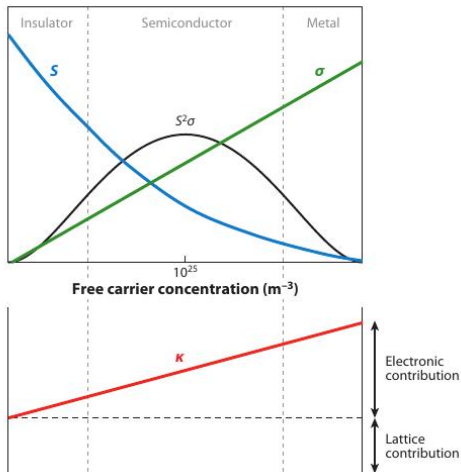
Formes de millorar el ZT

$$ZT = \frac{\sigma S^2 T}{\kappa_p + \kappa_e} \quad (7)$$

Reduir conductivitat termica (κ)

Augmentar conductivitat elèctrica (σ) o el Seebek (S)

Formes de millorar el ZT



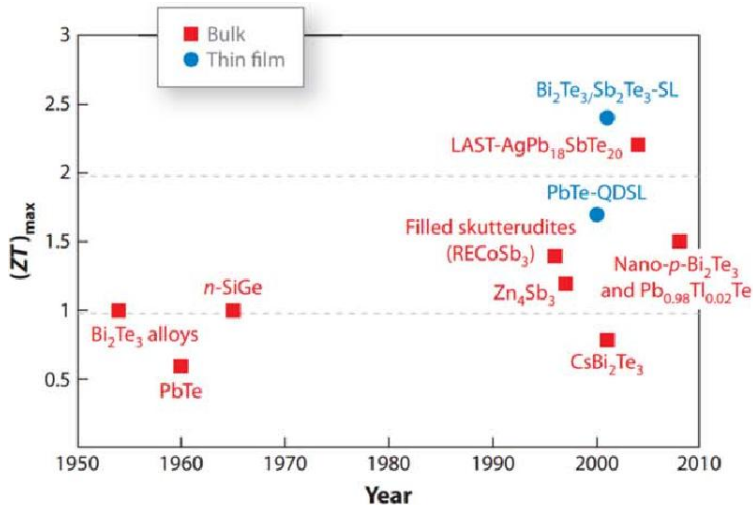
Com millorar?

Aleacions SiGe. No trencar l'estructura cristal·lina

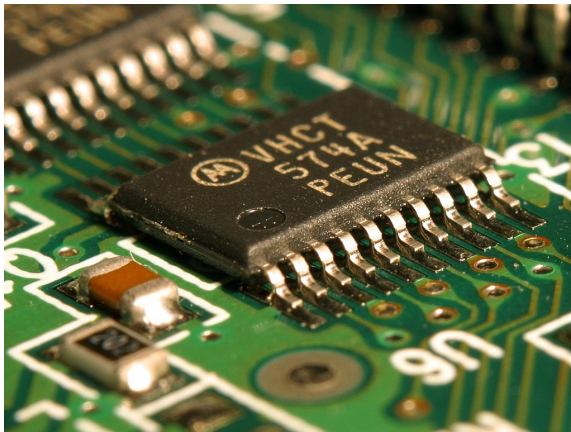
Com millorar?

Modular el dopatge

Cicle de Carnot. General



Escalabilitat



Noves aplicacions



Noves aplicacions



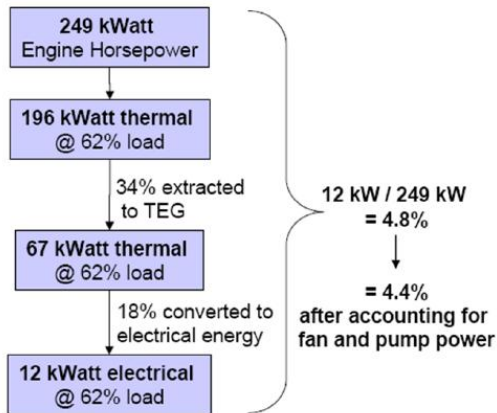
Noves aplicacions



Aplicacions futures

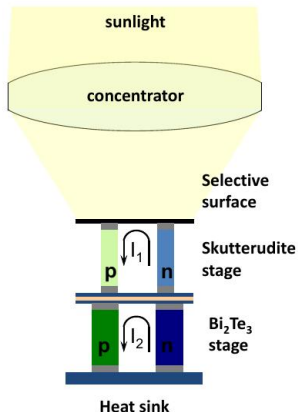


Aplicacions futures



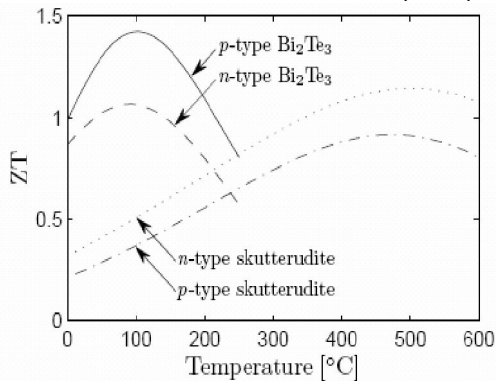
Aplicacions futures

Termosolar de concentració (MIT)



Aplicacions futures

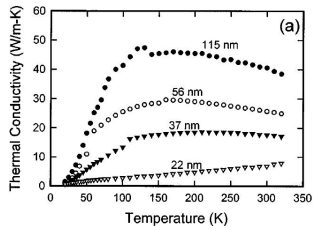
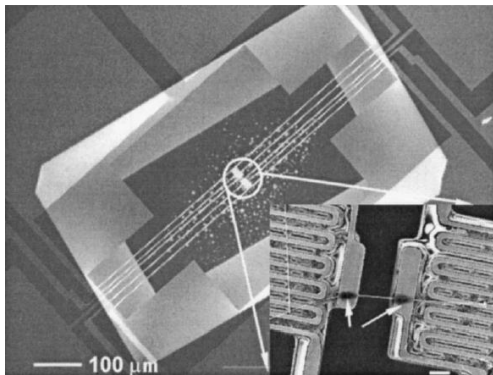
Termosolar de concentració (MIT)



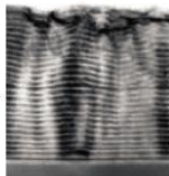
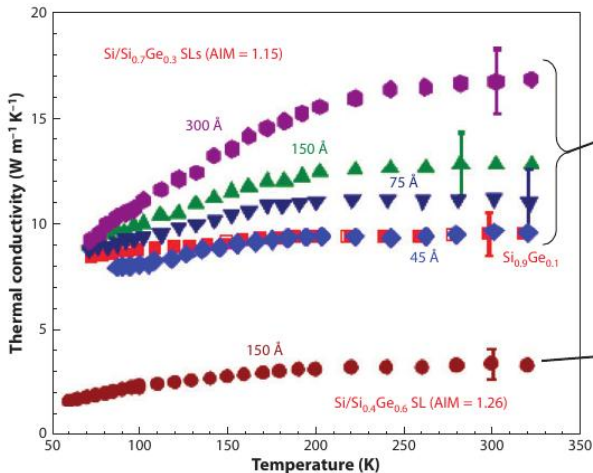
Aplicacions futures

- Baix cost de fabricació i manteniment
- Baix nivell de concentració
- Poc material necessari
- Permet l'enmagatzemament d'energia tèrmica

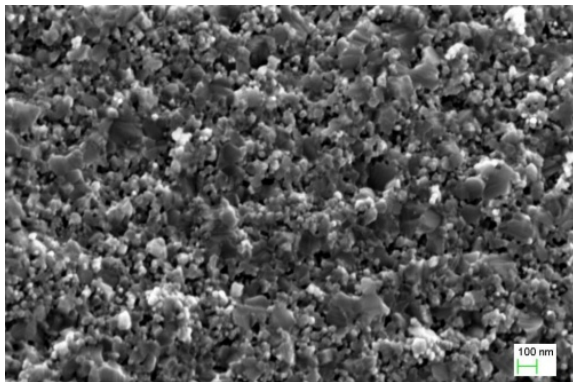
Estratègies de millora



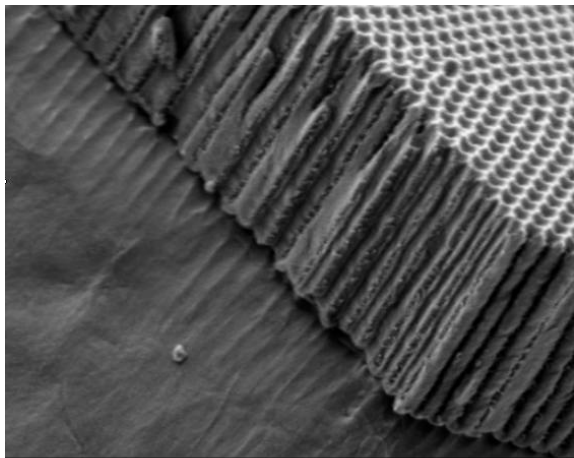
Estratègies de millora



Estratègies de millora



Estratègies de millora

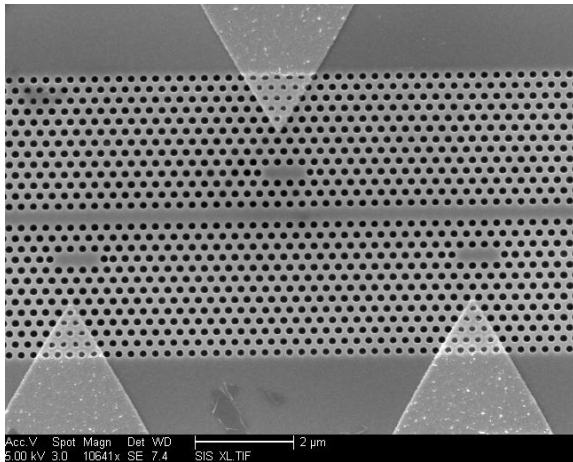


Mag = 82.53 K X

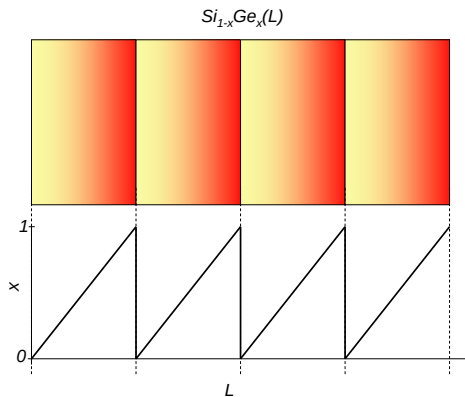


EHT = 1.00 kV
WD = 2 mm

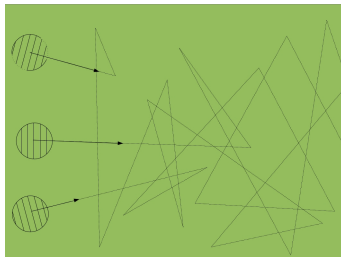
Estratègies de millora



Estratègies de millora



Límit difusiu

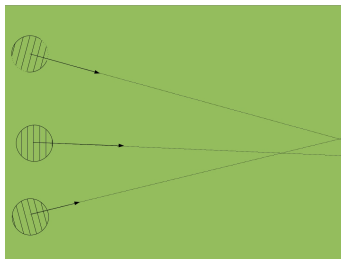


$$\rho = \text{const}; \kappa = \text{const} \quad (8)$$

Equació de difusió

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\lambda \nabla^2 T \quad (9)$$

Límit bal·lístic



$$R = \text{const}; G = \text{const} \quad (10)$$

Equació d'ones

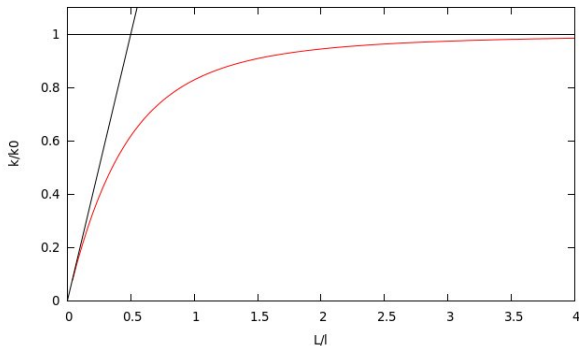
$$\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = -\frac{\lambda}{C_v \tau} \nabla^2 T \quad (11)$$

Conductivitat efectiva

Equació de Maxwell-Cattaneo

$$\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\lambda}{C_v \tau} \nabla^2 T \quad (12)$$

Conductivitat efectiva



$$\kappa = \kappa_0 \frac{L^2}{2\pi^2 \ell^2} \left(\sqrt{1 + \frac{4\pi^2 \ell^2}{L^2}} - 1 \right) \quad (13)$$

Conductivitat efectiva

In the diffusive regime

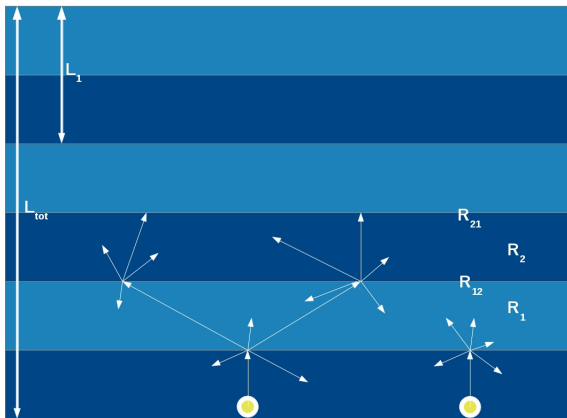
$$\kappa = \kappa_0 \quad (14)$$

In the ballistic regime

$$\kappa = \frac{\kappa_0}{\pi} \frac{L}{\ell} = \frac{c_v v}{3\pi} L \quad (15)$$

$$G = \frac{c_v v}{3\pi} \quad (16)$$

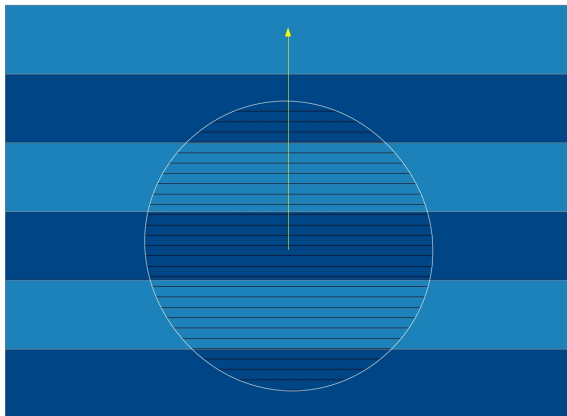
Superxarxa difusiva



$$R_{tot} = R_1 + R_2 + nR_B$$

(17)

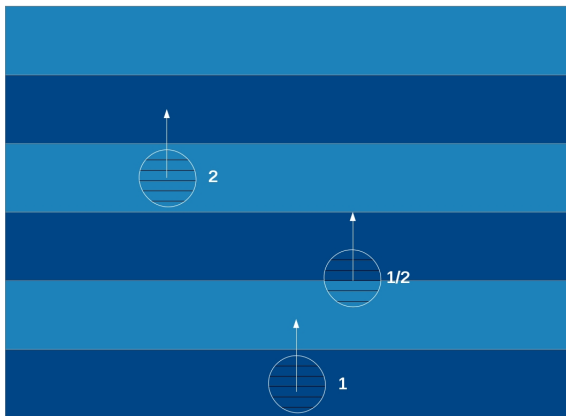
Superxarxa bal·lística



$$R_{\text{tot}} = R_1 + R_2 \quad (18)$$

$$G_{m12} = \frac{G_1 G_2}{G_1 + G_2} \quad (19)$$

Superxarxa



Coherent Phonon heat conduction in Superlattices

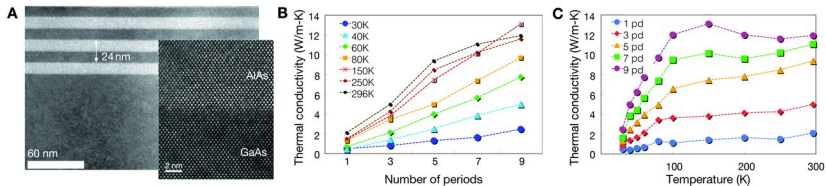


Figura: Luckyanova et al. Science 338 (6109), 2012

Situacions no estacionàries

L'equació de Guyer Krumhansl

$$\tau \frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \vec{q} = -\lambda \nabla T + \ell_C \ell_N \nabla^2 \vec{q} \quad (20)$$

Combinat amb la conservació de l'energia

$$c_v \frac{dT}{dt} = -\nabla \cdot \vec{q} \quad (21)$$

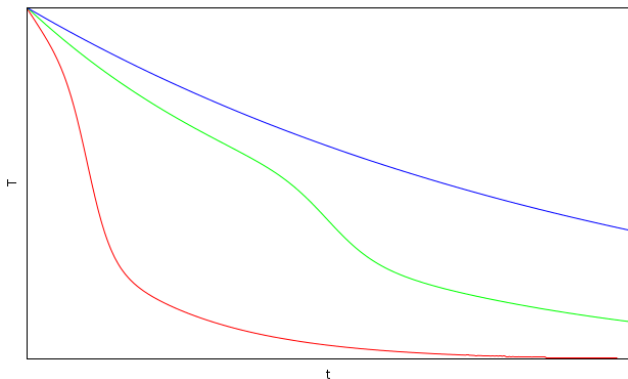
ens porta a

$$\tau \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = -\xi \nabla^2 T + \alpha \nabla \cdot \nabla^2 \vec{q} \quad (22)$$

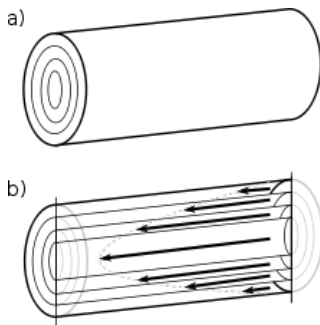
Situacions no estacionàries

$$\tau \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = -\xi \nabla^2 T + \alpha \nabla \cdot \nabla^2 \vec{q} \quad (23)$$

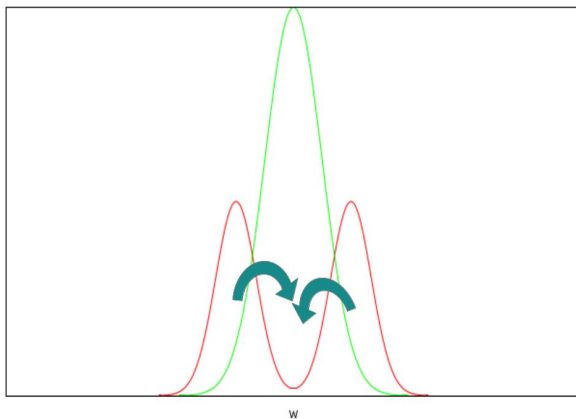
Front d'ona ($\partial^2/\partial t^2 \propto \nabla^2$) en un medi difusiu ($\partial/\partial t \propto \nabla^2$)



Equació de Guyer - Krumhansl



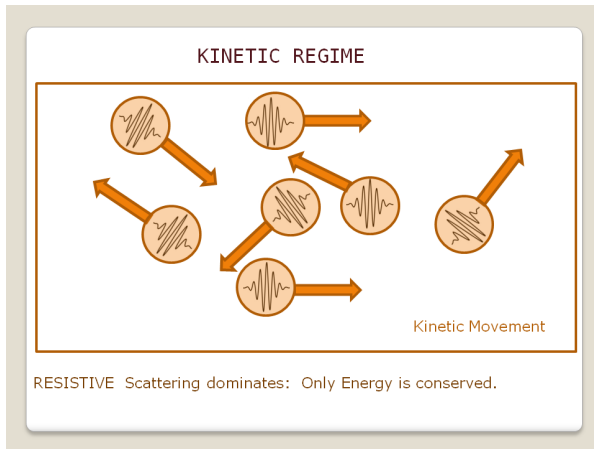
Equació de Guyer - Krumhansl



Equació de Guyer - Krumhansl

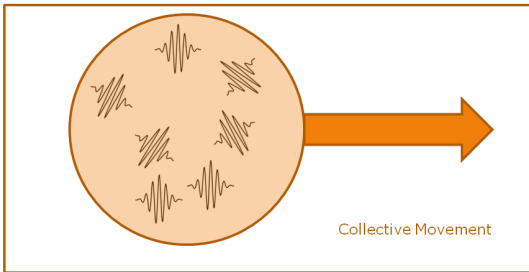
Modes en serie parallel

Equació de Guyer - Krumhansl



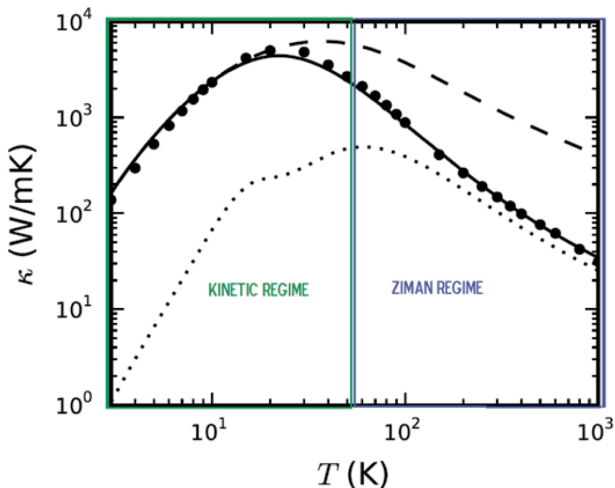
Equació de Guyer - Krumhansl

ZIMAN REGIME

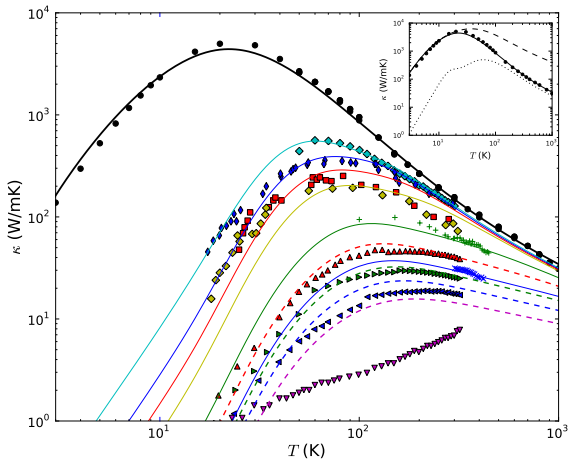


NORMAL Scattering dominates: Energy and Momentum conserved.

Equació de Guyer - Krumhansl



Equació de Guyer - Krumhansl



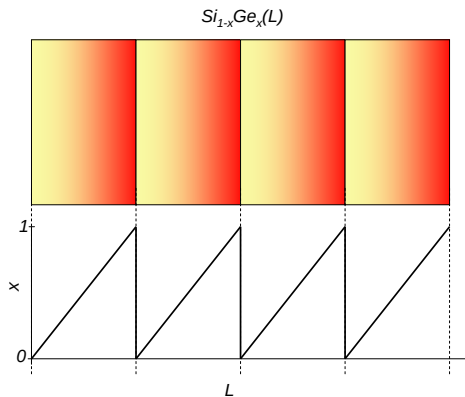
Equació de Guyer - Krumhansl

- La termodinàmica de no equilibri sembla la clau per a la comprensió dels sistemes a nanoescala
- El comportament col·lectiu sembla donar una tensió al sistema que determina la mida de les partícules (coherència)

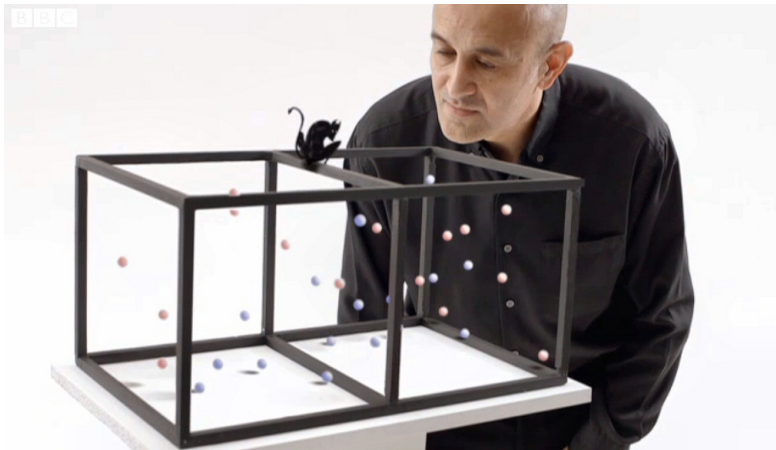
Equació de Guyer - Krumhansl



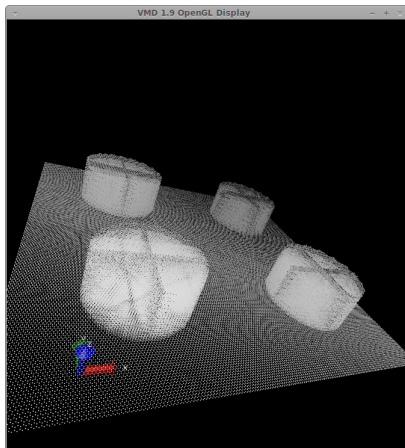
Rectificador tèrmic



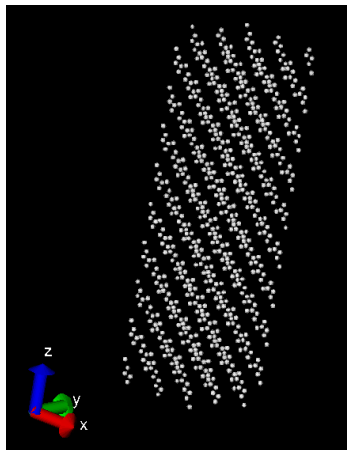
Rectificador



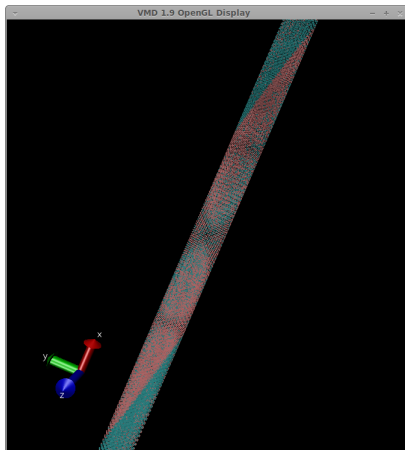
Nanopilars



Nanocables



Rectificador tèrmic



Millora del codi

- Els valors obtinguts no corresponen amb els experimentals
- Hi ha problemes en els integradors (termodinàmica)

Moltes gràcies de...

PhD Students

Carla de Tomás, Daniel Moller

Statistical Physics Group at UAB

David Jou, Javier Bafaluy

Material Science at UAB

Javier Rodriguez, Aitor Lopeandia, Pablo Ferrando, Gemma Garcia

University of Valencia

Andrés Cantarero