

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

Instituto de Ingeniería

Maestría y Doctorado en Ciencias e Ingeniería



Desarrollo de un modelo físico y numérico del transporte electro-térmico en celdas unitarias Peltier basadas en interfaces metal-semiconductor

**TESIS**

**Para obtener el grado de:**

Doctor en Ciencias

**Presenta:**

Daniel Omar Baez Nuñez

**Director:**

Dr. Carlos Villa Angulo

**Codirector:**

Dr. Iván Olaf Hernández Fuentes

Mexicali, B.C. Enero 2026

# Dedicatoria

La presente tesis se la dedico a Stephania Tarin por su apoyo incondicional en los retos que se han presentado en la vida diaria como en lo profesional y por la motivación que me brindó día tras día para poder lograr este objetivo.

A mis padres por toda la formación de valores que me han brindado y por dar ejemplo de responsabilidad y perseverancia en el trabajo además de todo el apoyo y consejos recibidos de ellos en los momentos buenos, así como en los malos.

A mis compañeros, colegas y amigos del laboratorio de física aplicada y bioinformática por todos los buenos momentos vividos, los momentos de tristeza y desesperación, pero lo más importante es que nos convertimos en una gran familia.

# Agradecimientos

Al Dr. Carlos Villa y Dr. Olaf Hernández por creer en mí y darme la oportunidad de formar parte de su equipo de trabajo, por compartir sus conocimientos y enseñanzas, realmente agradezco su orientación y guía a lo largo de estos años y gracias por ser un ejemplo de dedicación y amor al trabajo. Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico que me otorgó durante estos años y permitió que pudiera dedicar todo mi tiempo a la realización de este gran proyecto.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>6</b>
1.1. Planteamiento del problema . . . . .	7
1.2. Justificación . . . . .	8
1.3. Hipótesis . . . . .	10
1.4. Objetivo general . . . . .	11
1.5. Objetivos específicos . . . . .	11
<b>2. Marco Teórico</b>	<b>13</b>
2.1. Dispositivos termoeléctricos y efecto Peltier . . . . .	13
2.2. Materiales termoeléctricos basados en $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . . . . .	15
2.3. Interfaces metal–semiconductor en dispositivos termoeléctricos . . . . .	17
2.4. Contactos óhmicos y Schottky en la literatura . . . . .	19
2.5. Modelos previos de transporte electro–térmico . . . . .	23
2.6. Comparativa con trabajos previos y aportaciones del presente estudio . . . . .	25
<b>3. Fundamentos físicos del transporte termoeléctrico</b>	<b>27</b>
3.1. Efectos Seebeck, Peltier y Thomson . . . . .	27
3.2. Transporte de portadores en semiconductores tipo $N$ y tipo $P$ . . . . .	30
3.3. Energía libre, potencial químico y nivel de Fermi . . . . .	32
3.4. Conducción eléctrica y térmica . . . . .	34
3.5. Disipación Joule y generación de calor . . . . .	36
<b>4. Materiales y estructura de la celda unitaria Peltier</b>	<b>38</b>
4.1. Selección de materiales semiconductores . . . . .	38
4.2. Metales de contacto y alineación energética . . . . .	39
4.3. Resumen de materiales . . . . .	41

4.4.	Construcción General de una Celda Peltier Tipo N–P . . . . .	43
4.5.	Componentes Fundamentales . . . . .	43
4.6.	Conexión Eléctrica y Térmica . . . . .	44
4.7.	Ensamblaje de un Módulo Completo . . . . .	44
4.8.	Estructura física de la celda unitaria . . . . .	45
4.9.	Configuración eléctrica y térmica . . . . .	47
4.10.	Identificación de interfaces A, B, C y D . . . . .	49
<b>5.</b>	<b>Formación de contactos óhmicos y Schottky</b>	<b>52</b>
5.1.	Formación de contactos óhmicos y Schottky y regiones de depleción . . . . .	52
5.2.	Clasificación de contactos en la celda unitaria . . . . .	54
5.3.	Impacto de los contactos en la corriente . . . . .	56
<b>6.</b>	<b>Modelo físico de transporte en las interfaces</b>	<b>59</b>
6.1.	Cálculo de la corriente en la interfaz . . . . .	59
6.2.	Proceso para el Cálculo de la corriente . . . . .	60
6.3.	Descripción secuencial del algoritmo para el Cálculo de la corriente . . . . .	64
<b>7.</b>	<b>Modelo térmico y balances de energía</b>	<b>69</b>
7.1.	Fundamento del balance energético local . . . . .	69
7.2.	Efecto Peltier en interfaces metal–semiconductor . . . . .	71
7.3.	Fundamento y Análisis de las Ecuaciones de Balance de Energía . . . . .	72
7.4.	Origen de las Ecuaciones de Balance . . . . .	73
7.5.	Análisis Físico de los Términos . . . . .	73
7.6.	Interpretación Física Integrada de los Fenómenos en las Interfaces . . . . .	74
7.7.	Construcción de los Balances para las Interfaces . . . . .	75
<b>8.</b>	<b>Algoritmo auto-consistente para el cálculo de la corriente</b>	<b>78</b>
8.1.	Cálculo electrostático de la corriente . . . . .	78
8.2.	Implementación del balance térmico . . . . .	80
8.3.	Acoplamiento electro–térmico . . . . .	81
8.4.	Descripción del programa de MATLAB . . . . .	83

<b>9. Resultados</b>	<b>91</b>
9.1. Resultados . . . . .	91
9.1.1. Dimensionamiento físico del dispositivo y parámetros de operación . . . . .	93
<b>10. Conclusión</b>	<b>96</b>

# Capítulo 1

## Introducción

Los dispositivos termoeléctricos permiten la conversión directa entre energía eléctrica y energía térmica mediante el aprovechamiento de fenómenos termoeléctricos fundamentales, tales como los efectos Seebeck y Peltier. A diferencia de los sistemas de refrigeración convencionales, estos dispositivos no requieren partes móviles ni fluidos de trabajo, lo que les confiere ventajas importantes en términos de confiabilidad, compactación y control preciso de la temperatura. Debido a estas características, las celdas termoeléctricas han encontrado aplicaciones en sistemas de refrigeración de estado sólido, control térmico de dispositivos electrónicos y aprovechamiento de gradientes térmicos para la generación de energía eléctrica [1, 3, 4].

El funcionamiento de una celda termoeléctrica de efecto Peltier se basa en el transporte de portadores de carga a través de materiales semiconductores con diferentes propiedades eléctricas y térmicas. Cuando una corriente eléctrica atraviesa el dispositivo, los portadores intercambian energía con la red cristalina, dando lugar a la absorción o liberación de calor en las interfaces entre materiales. En este contexto, el desempeño del dispositivo depende de manera crítica de la eficiencia con la que se transportan las cargas eléctricas y de la forma en que se distribuyen los potenciales eléctricos y térmicos a lo largo de la estructura.

En particular, las interfaces metal–semiconductor desempeñan un papel fundamental en el comportamiento global del dispositivo, ya que en ellas se establecen las condiciones de frontera para el transporte de carga. La naturaleza del contacto, ya sea óhmico o Schottky, determina la existencia de barreras de potencial que pueden modificar la densidad de corriente eléctrica y generar pérdidas energéticas adicionales. Estas pérdidas no solo afectan el comportamiento eléctrico del sistema, sino que también impactan directamente la transferencia de calor asociada al efecto Peltier, influyendo en la magnitud y estabilidad del gradiente de temperatura generado.

Bajo este enfoque, resulta necesario analizar de manera detallada el comportamiento eléctrico de las interfaces metal–semiconductor y su influencia sobre el desempeño termoeléctrico del dispositivo. La comprensión de estos fenómenos permite establecer una base sólida para el desarrollo de modelos físicos que describan de forma más precisa el transporte de carga y energía en celdas termoeléctricas, así como para la optimización de su diseño y operación.

## 1.1. Planteamiento del problema

Los descubrimientos más importantes se relacionaron con las propiedades de los materiales. En 1911, Altenkirch derivó la eficiencia termoeléctrica, ahora conocida simplemente como  $ZT$ , o la figura de mérito termoeléctrica.

La figura de mérito está dada por el coeficiente de Seebeck, la conductividad eléctrica y la conductividad térmica. Estos tres parámetros de transporte dependen entre sí en función de la estructura de la banda, la concentración de portadores y muchos otros factores. En particular, el coeficiente de Seebeck y la conductividad eléctrica generalmente varían de manera recíproca, lo que dificulta cualquier mejora en la figura de mérito  $ZT$ . Además, la conductividad eléctrica y el coeficiente de Seebeck están inversamente relacionados, por lo que generalmente no es posible aumentar el factor de potencia termoeléctrica por encima de un valor óptimo particular para un material a granel.

Los primeros trabajos en termoeléctrica dieron como resultado valores muy pequeños de  $ZT$  porque los materiales que se usaban (principalmente metales) no poseían propiedades termoeléctricas ideales; los metales poseen alta conductividad eléctrica y alta conductividad térmica. La mayoría de los materiales tradicionales presentan una correlación entre la conductividad eléctrica y térmica. Un material que conduce bien la electricidad, como un metal, también conduce bien el calor, y un material que aísla el calor, como el vidrio o la cerámica, también aísla la electricidad.

Uno de los problemas centrales que restringe el logro de materiales con una alta figura de mérito es la dependencia del coeficiente de Seebeck y la conductividad eléctrica, donde aumentar el coeficiente de Seebeck conduce a la disminución de la concentración de portadores y luego a la disminución de la conductividad eléctrica. Además, las dificultades para minimizar las pérdidas de calor durante la determinación de la conductividad térmica se consideran uno de los principales problemas.

Recientemente, el número de investigaciones sobre películas termoeléctricas ha incrementado enormemente. La razón principal es la predicción en el incremento de la figura de mérito termoeléctrica ( $ZT$ ) de las estructuras de baja dimensión y/o nanoestructuradas. Por ejemplo, en un arreglo heteroestructurado de baja dimensión (SL) tal como el mostrado en la Figura 1, puede obtenerse una reducción de la conductividad térmica horizontal  $\lambda_{\perp}$  a las interfaces de los materiales A y B, que incrementará el enfriamiento termoeléctrico. También un incremento en la  $ZT$  puede obtenerse paralelo a las interfaces de los materiales debido al estancamiento de las heteroestructuras. De igual manera, se han publicado reducciones en  $\lambda_{II}$ . También es inminente que, hasta el día de hoy, el compuesto Telurio de Bismuto (V–VI) es el sistema de materiales más usado en la implementación de dispositivos termoeléctricos. Los parámetros de desempeño de estos dispositivos tales como el gradiente de temperatura  $\Delta T$  y la densidad de flujo de calor están relacionados con las propiedades termoeléctricas de los materiales. A pesar de que no existe un límite teórico en la figura de mérito termoeléctrica, por un periodo de alrededor de 50 años los dispositivos fabricados no han podido exceder un  $ZT \approx 1$ . En este periodo diferentes tecnologías de fabricación tales como electroplating, deposición química, MBE o MOCVD han sido empleadas y se ha comprobado que el incremento en las eficiencias está limitado por la calidad obtenida en los materiales. Algo importante a notar es que en este periodo muy pocos trabajos intentan aprovechar las potenciales ventajas ofrecidas por las estructuras de baja dimensión.

En la mayoría de los materiales, la conductividad eléctrica y la térmica van de la mano. La clave es crear materiales semiconductores con estructuras especiales en las cuales existan diminutos patrones que sirvan para alterar el comportamiento termoeléctrico de estos. Dichas estructuras pueden incluir la incorporación de nanopartículas o nanocables en una matriz de otro material. Estas estructuras nanométricas interfieren con el flujo de calor, pero permiten a la electricidad fluir libremente. De esta forma, usar estructuras de baja dimensión y/o nanopartículas permite controlar de manera independiente estas características.

## 1.2. Justificación

El desarrollo y optimización de dispositivos termoeléctricos basados en el efecto Peltier se encuentran limitados no solo por las propiedades intrínsecas de los materiales semiconductores, sino también por los fenómenos físicos que tienen lugar en las interfaces metal–semiconductor. En la mayoría de los modelos tradicionales, el análisis del desempeño termoeléctrico se centra

en parámetros efectivos de volumen, tales como el coeficiente de Seebeck, la conductividad eléctrica y la conductividad térmica, asumiendo que las interfaces actúan como conexiones ideales sin impacto significativo en el transporte de carga o en la redistribución de energía térmica. Sin embargo, diversos estudios han mostrado que esta aproximación resulta insuficiente cuando se busca describir con precisión el comportamiento real de los dispositivos, ya que las interfaces introducen discontinuidades energéticas y resistencias efectivas que modifican de manera sustancial la corriente eléctrica y los balances de energía locales [1, 3].

Desde un punto de vista físico, el transporte de carga a través de una interfaz metal-semiconductor implica necesariamente un reajuste de la energía de los portadores al cruzar una región con propiedades electrónicas distintas. En contactos de tipo Schottky, este reajuste se manifiesta mediante la formación de una barrera de potencial y de una región de depleción caracterizada por campos eléctricos intensos, mientras que en contactos óhmicos el flujo de portadores ocurre con una resistencia mínima. Estas diferencias afectan directamente la magnitud de la corriente que puede circular por el dispositivo y determinan la contribución local de fenómenos como la disipación Joule y el intercambio térmico asociado al efecto Peltier [6, 7, 8]. Por lo tanto, ignorar la física interfacial conduce a descripciones incompletas del funcionamiento termoelectrico.

Adicionalmente, el efecto Peltier es un fenómeno esencialmente interfacial, ya que la absorción o liberación de calor ocurre cuando los portadores atraviesan una discontinuidad material. La magnitud de este intercambio térmico depende de la corriente eléctrica y de las propiedades energéticas de la interfaz, lo que implica que cualquier modificación en el transporte de carga inducida por la presencia de barreras o resistencias interfaciales repercute directamente en el gradiente de temperatura generado. En este contexto, la corriente eléctrica no puede considerarse una magnitud impuesta de manera independiente, sino el resultado de un equilibrio entre el potencial aplicado, la estructura electrostática de la interfaz y las propiedades del material semiconductor [4, 1].

A pesar de esta relevancia, gran parte de la literatura aborda el estudio de contactos metal-semiconductor desde una perspectiva predominantemente electrónica, enfocándose en la caracterización de la altura de barrera, los mecanismos de transporte y la relación corriente-voltaje, sin integrar de forma explícita el acoplamiento con el comportamiento térmico del dispositivo. Por otro lado, los modelos termoelectricos macroscópicos suelen incorporar las interfaces mediante parámetros efectivos constantes, lo que impide capturar la redistribución local de energía

y su impacto en el desempeño global. Esta separación entre el análisis eléctrico y el térmico limita la capacidad de los modelos para describir de manera realista la operación de dispositivos termoeléctricos basados en contactos metal–semiconductor [3, 2].

En este sentido, se justifica la necesidad de desarrollar un enfoque que integre de manera explícita la física de las interfaces metal–semiconductor con el transporte electro–térmico. Un tratamiento autoconsistente que considere simultáneamente la ecuación de Poisson, la estadística de portadores y los mecanismos de transporte permite determinar la corriente eléctrica como una magnitud emergente del sistema, en lugar de asumirla como un parámetro externo. Este enfoque hace posible analizar cómo la altura de la barrera Schottky, el dopaje del semiconductor, el potencial aplicado y la temperatura influyen conjuntamente en la corriente y, en consecuencia, en la redistribución de energía térmica en la interfaz [10, 11, 12].

Por todo lo anterior, la presente investigación se justifica en la necesidad de profundizar en el papel que desempeñan las interfaces metal–semiconductor en el funcionamiento de dispositivos termoeléctricos, adoptando un enfoque fundamental y autoconsistente que permita describir de manera rigurosa el acoplamiento entre transporte de carga y transferencia de energía. Al centrar el análisis en la física interfacial y en la determinación coherente de la corriente eléctrica, este trabajo contribuye a una comprensión más completa de los factores que limitan el desempeño termoeléctrico y proporciona una base sólida para el análisis y optimización de dispositivos basados en el efecto Peltier.

### 1.3. Hipótesis

La eficiencia térmica y la estabilidad del gradiente de temperatura en una celda termoeléctrica de efecto Peltier dependen de manera crítica de las propiedades eléctricas de las interfaces metal–semiconductor que la conforman. En particular, se plantea como hipótesis que la presencia de contactos Schottky en dichas interfaces introduce barreras de potencial que modifican la distribución espacial del campo eléctrico, las concentraciones de portadores de carga y la densidad de corriente eléctrica, generando pérdidas energéticas adicionales que reducen el desempeño termoeléctrico del dispositivo.

Bajo esta premisa, se postula que un modelo auto–consistente que acople la ecuación de Poisson, la estadística de portadores y los mecanismos de transporte eléctrico permite describir de forma más precisa el comportamiento real de las corrientes en las interfaces metal–semiconductor,

en comparación con modelos simplificados. Asimismo, se espera que la optimización de los parámetros físicos de la interfaz, tales como el tipo de contacto, la altura de la barrera Schottky, el nivel de dopaje y el voltaje aplicado, conduzca a una reducción de las pérdidas resistivas y a una mejora significativa en la transferencia de calor asociada al efecto Peltier, favoreciendo la generación de un gradiente de temperatura más eficiente y estable.

## 1.4. Objetivo general

Desarrollar un modelo físico y numérico auto-consistente que permita analizar y describir el transporte electro-térmico en una celda unitaria Peltier basada en interfaces metal-semiconductor, incorporando explícitamente la formación de contactos óhmicos y Schottky, el cálculo de la corriente eléctrica a través de barreras interfaciales y los balances energéticos locales asociados al efecto Peltier, la disipación Joule y la conducción térmica, con el propósito de comprender la generación del gradiente de temperatura y establecer criterios de diseño que permitan reducir el consumo de corriente eléctrica sin sacrificar el desempeño térmico de los dispositivos termoelectrónicos.

## 1.5. Objetivos específicos

1. Analizar los fundamentos físicos del efecto termoelectrónico y su relación con el transporte de carga y energía en materiales semiconductores, con énfasis en dispositivos Peltier basados en uniones metal-semiconductor.
2. Estudiar la alineación energética entre metales y semiconductores tipo  $N$  y tipo  $P$ , con el fin de identificar la formación de contactos óhmicos y Schottky en la celda unitaria Peltier.
3. Clasificar las interfaces de la celda unitaria en función de su comportamiento eléctrico y térmico, estableciendo su papel en la limitación de la corriente y en la redistribución local de energía.
4. Desarrollar un modelo electrostático para describir la formación de barreras Schottky y regiones de depleción, mediante la resolución de la ecuación de Poisson en las interfaces metal-semiconductor.
5. Formular un modelo de transporte de corriente a través de contactos Schottky basado en

mecanismos de emisión termoiónica, incorporando la dependencia con la temperatura y el voltaje aplicado.

6. Implementar balances energéticos locales en cada interfaz de la celda unitaria, considerando explícitamente las contribuciones del efecto Peltier, la disipación Joule y la conducción térmica.
7. Desarrollar un algoritmo numérico auto-consistente que acople el cálculo electrostático de la corriente con el balance térmico interfacial, permitiendo determinar simultáneamente la corriente de operación y las temperaturas locales.
8. Analizar la influencia de las propiedades interfaciales y de los parámetros geométricos en la formación del gradiente de temperatura y en el consumo de corriente eléctrica del dispositivo.
9. Evaluar el impacto de las interfaces Schottky en la generación de calor y en la eficiencia térmica de la celda unitaria Peltier, identificando las regiones dominantes de disipación energética.
10. Establecer criterios de diseño para dispositivos termoeléctricos basados en estructuras de baja dimensión e interfaces metal–semiconductor, orientados a la reducción del consumo de corriente eléctrica sin comprometer el desempeño térmico.

## Capítulo 2

# Marco Teórico

### 2.1. Dispositivos termoelectricos y efecto Peltier

Los dispositivos termoelectricos son sistemas de estado sólido capaces de convertir directamente energía eléctrica en energía térmica, y viceversa, sin la intervención de partes móviles ni ciclos termodinámicos convencionales [1, 3]. Su principio de funcionamiento se basa en la interacción entre el transporte de portadores de carga y el transporte de energía térmica dentro de materiales con propiedades electrónicas específicas. Esta característica los convierte en elementos clave para aplicaciones de enfriamiento localizado, control térmico de precisión y generación de energía a partir de gradientes de temperatura [4, 2].

El efecto Peltier constituye el fenómeno fundamental que permite el funcionamiento de los dispositivos termoelectricos cuando operan como bombas de calor [1, 3]. Dicho efecto se manifiesta cuando una corriente eléctrica atraviesa la interfaz entre dos materiales distintos, produciendo la absorción o liberación de calor en la región de contacto. La magnitud y el signo de este intercambio térmico dependen de las propiedades termoelectricas de los materiales involucrados y del sentido de la corriente. A nivel macroscópico, el efecto Peltier permite establecer regiones frías y calientes dentro de un dispositivo mediante el control del flujo de corriente eléctrica.

Desde el punto de vista físico, el efecto Peltier surge como consecuencia del cambio en la energía libre de los portadores de carga al atravesar una discontinuidad material [4]. Cuando un electrón o un hueco cruza una interfaz entre dos materiales con diferentes coeficientes termoelectricos, debe ajustar su energía al nuevo entorno electrónico. Este ajuste energético se logra mediante el intercambio de energía con la red cristalina, ya sea en forma de absorción de fonones —lo que produce enfriamiento local— o de emisión de fonones —lo que genera calentamiento—

to. Por tanto, el efecto Peltier no es un fenómeno volumétrico, sino esencialmente interfacial, estrechamente ligado a la física de los contactos entre materiales [1].

Un dispositivo termoeléctrico elemental se construye típicamente a partir de dos ramas semiconductoras: una de tipo  $n$  y otra de tipo  $p$  [3, 10]. En la rama tipo  $n$ , los electrones actúan como portadores mayoritarios, mientras que en la rama tipo  $p$  los huecos dominan el transporte de carga. Estas dos ramas se conectan eléctricamente en serie y térmicamente en paralelo, lo que permite que el mismo flujo de corriente atraviese ambas regiones mientras el calor puede redistribuirse entre ellas. Esta configuración maximiza la contribución termoeléctrica total y constituye la base estructural de los módulos Peltier comerciales y de investigación [1].



Figura 2.1: Módulo de efecto Peltier comercial

El comportamiento global de un dispositivo termoeléctrico está determinado por la superposición de varios mecanismos de transporte [3]. Además del efecto Peltier, intervienen de manera simultánea la conducción térmica a lo largo de los materiales, la disipación de energía por efecto Joule asociada al paso de corriente, y en algunos casos el efecto Thomson cuando existe un gradiente térmico a lo largo de un mismo material [1]. La interacción entre estos mecanismos define la distribución espacial de temperatura y limita el desempeño del dispositivo, especialmente cuando se busca mantener gradientes térmicos elevados.

En este contexto, la eficiencia de un dispositivo termoeléctrico no depende únicamente de las propiedades intrínsecas de los materiales semiconductores, sino también de la naturaleza de las interfaces metal–semiconductor que permiten la inyección y extracción de corriente [6, 7]. Las interfaces introducen discontinuidades energéticas que afectan tanto el transporte eléctrico como

la redistribución local de calor. Contactos de tipo óhmico favorecen un flujo de corriente eficiente y una transferencia térmica controlada, mientras que contactos Schottky pueden imponer barreras de potencial que limitan la corriente y generan regiones de disipación Joule significativa [9, 8].

Por esta razón, el análisis detallado de los dispositivos termoeléctricos modernos requiere un enfoque que integre la física del efecto Peltier con la descripción electrostática y energética de las interfaces. En particular, en una celda unitaria Peltier, el gradiente térmico resultante no surge únicamente de las ramas semiconductoras, sino de la redistribución localizada de energía en cada interfaz metal–semiconductor [11, 12]. Este trabajo adopta dicha perspectiva interfacial como eje central del análisis, permitiendo describir de manera rigurosa cómo el efecto Peltier, acoplado al transporte de carga y a los balances energéticos locales, determina el comportamiento térmico global del dispositivo.

## 2.2. Materiales termoeléctricos basados en $\text{Bi}_2\text{Te}_3$

La selección adecuada de los materiales termoeléctricos es un aspecto crítico en el diseño y optimización de dispositivos basados en el efecto Peltier, ya que de ella dependen directamente la magnitud del gradiente térmico alcanzable, la eficiencia de conversión y la estabilidad del dispositivo. Entre los distintos compuestos estudiados en la literatura, el telururo de bismuto ( $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ) se ha consolidado como el material de referencia para aplicaciones termoeléctricas cercanas a la temperatura ambiente, debido a la combinación favorable de sus propiedades electrónicas y térmicas.

El desempeño de un material termoeléctrico se evalúa comúnmente mediante el factor de mérito adimensional

$$ZT = \frac{S^2\sigma T}{\kappa},$$

donde  $S$  es el coeficiente Seebeck,  $\sigma$  la conductividad eléctrica,  $\kappa$  la conductividad térmica total y  $T$  la temperatura absoluta. Un valor elevado de  $ZT$  requiere simultáneamente un alto coeficiente Seebeck, una elevada conductividad eléctrica y una baja conductividad térmica. Esta combinación representa un compromiso físico complejo, ya que  $\sigma$  y  $\kappa$  suelen estar correlacionadas a través del transporte de portadores. El  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  destaca precisamente por lograr un equilibrio cercano al óptimo entre estos parámetros en el rango de temperaturas de interés.

El  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  es un semiconductor de banda estrecha con una estructura cristalina laminar de

tipo romboédrico, lo que favorece una anisotropía marcada en sus propiedades de transporte. Esta estructura contribuye a una baja conductividad térmica de la red, ya que la propagación de fonones se ve limitada por la naturaleza estratificada del material. Al mismo tiempo, presenta una movilidad de portadores suficientemente alta como para mantener valores elevados de conductividad eléctrica cuando se encuentra adecuadamente dopado.

Una ventaja fundamental del  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  es su versatilidad para ser dopado tanto tipo  $n$  como tipo  $p$ . Mediante la incorporación controlada de elementos donadores, como el selenio, se obtiene  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $n$ , en el cual los electrones actúan como portadores mayoritarios. Por otro lado, el dopaje con elementos aceptores, como el antimonio, conduce a  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $p$ , donde los huecos dominan el transporte de carga. Esta posibilidad de obtener ambos tipos de conducción a partir del mismo material base resulta particularmente ventajosa, ya que permite construir dispositivos termoelectrónicos con simetría estructural y propiedades térmicas comparables en ambas ramas.

El uso del mismo material base para las ramas tipo  $n$  y tipo  $p$  reduce diferencias indeseadas en la conductividad térmica, en la expansión térmica y en la respuesta mecánica del dispositivo. Esto simplifica el análisis del transporte de calor y minimiza tensiones internas asociadas a gradientes térmicos, mejorando la estabilidad estructural de la celda unitaria. Desde el punto de vista del modelado físico, esta elección facilita la comparación directa entre el comportamiento de electrones y huecos, aislando el efecto del tipo de portador dominante sin introducir variaciones adicionales debidas al material.

En términos electrónicos, el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  presenta afinidades electrónicas y posiciones del nivel de Fermi que resultan compatibles con metales comúnmente utilizados como contactos en dispositivos termoelectrónicos. Esta característica es particularmente relevante en el contexto de las interfaces metal-semiconductor, ya que la alineación energética entre el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  y los metales determina la formación de contactos óhmicos o Schottky. En consecuencia, la selección de este material no solo responde a criterios de desempeño termoelectrónico en volumen, sino también a su comportamiento interfacial bajo polarización eléctrica.

Adicionalmente, el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  exhibe una estabilidad química y estructural adecuada para operar de manera continua bajo gradientes térmicos moderados, condición indispensable en dispositivos Peltier. Su uso extensivo en módulos comerciales y en estudios académicos ha permitido establecer un amplio marco de referencia experimental y teórico, lo que facilita la validación de modelos y la comparación de resultados.

En el presente trabajo, el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  se emplea como material base tanto para la rama tipo  $n$

como para la rama tipo  $p$  de la celda unitaria Peltier. Esta elección permite centrar el análisis en el papel que desempeñan las interfaces metal–semiconductor y los mecanismos locales de transporte electro–térmico, manteniendo constantes las propiedades fundamentales del material en volumen. De esta forma, el estudio se enfoca en cómo la interacción entre portadores, barreras energéticas y balances de energía en las interfaces determina el comportamiento térmico global del dispositivo.

### 2.3. Interfaces metal–semiconductor en dispositivos termoeléctricos

Las interfaces metal–semiconductor desempeñan un papel fundamental en el funcionamiento de los dispositivos termoeléctricos, ya que constituyen las regiones donde se acoplan de manera directa el transporte de carga y la transferencia de energía térmica [1, 3]. A diferencia de los materiales en volumen, cuyo comportamiento puede describirse mediante propiedades efectivas promedio, las interfaces representan zonas localizadas con fuertes discontinuidades energéticas, electrostáticas y térmicas. Estas discontinuidades condicionan tanto la magnitud de la corriente eléctrica que puede circular por el dispositivo como la redistribución local de calor asociada al efecto Peltier y a la disipación Joule.

En un dispositivo termoeléctrico basado en semiconductores tipo  $n$  y tipo  $p$ , la inyección y extracción de portadores requiere inevitablemente la presencia de contactos metálicos. Al establecer contacto entre un metal y un semiconductor, los niveles de energía de ambos materiales se reorganizan hasta alcanzar el equilibrio termodinámico, lo que implica la alineación de los niveles de Fermi [6, 10]. Este proceso de alineación genera un curvado de bandas en el semiconductor cercano a la interfaz y da origen a una región espacial en la que las propiedades eléctricas y energéticas difieren significativamente de las del material en volumen.

La naturaleza del contacto metal–semiconductor depende principalmente de la relación entre la función de trabajo del metal y las propiedades electrónicas del semiconductor, como la afinidad electrónica y la posición del nivel de Fermi [6, 7]. En función de esta alineación, la interfaz puede comportarse como un contacto óhmico o como un contacto Schottky. En un contacto óhmico, la barrera de potencial para los portadores mayoritarios es despreciable, lo que permite un flujo de corriente casi lineal y una baja resistencia de contacto. En contraste, un contacto Schottky se caracteriza por la formación de una barrera de potencial significativa que limita el paso de

portadores y da lugar a un comportamiento no lineal en la relación corriente–voltaje [9, 8].

Desde el punto de vista termoelectrico, esta distinción es de especial relevancia. En interfaces óhmicas, el intercambio de energía entre portadores y red cristalina está dominado por el efecto Peltier asociado a la discontinuidad del coeficiente termoelectrico entre materiales, sin que exista una acumulación adicional de energía eléctrica [1]. Por el contrario, en interfaces Schottky, la presencia de una región de depleción con un campo eléctrico intenso introduce una resistencia efectiva elevada, lo que incrementa la disipación Joule local. Esta disipación se suma al efecto Peltier y modifica de manera sustancial el balance energético en la interfaz [6, 8].

Las interfaces metal–semiconductor también influyen directamente en la continuidad de la corriente a lo largo del dispositivo. En una celda termoelectrica, los portadores deben atravesar de manera secuencial todas las interfaces presentes. Dado que la corriente debe ser continua en régimen estacionario, la interfaz con mayor resistencia efectiva actúa como un cuello de botella que limita la corriente global del sistema [11, 12]. En este sentido, incluso si la mayor parte del dispositivo presenta contactos óhmicos y transporte eficiente, la presencia de una sola interfaz Schottky dominante puede condicionar el punto de operación completo del dispositivo termoelectrico.

Además de su impacto eléctrico, las interfaces metal–semiconductor son responsables de una redistribución localizada del calor. Cuando los portadores cruzan una interfaz, su energía libre se ajusta al nuevo entorno electrónico, lo que implica la absorción o liberación de energía térmica [4]. Este proceso se manifiesta como enfriamiento o calentamiento local, dependiendo del signo del coeficiente Peltier efectivo en la transición. En consecuencia, el gradiente térmico global del dispositivo no se genera de manera uniforme a lo largo de las ramas semiconductoras, sino que emerge como resultado de la superposición de contribuciones localizadas en cada interfaz [1, 3].

En dispositivos termoelectricos reales, estas interfaces no pueden considerarse idealizadas ni despreciarse en el análisis. Factores como la altura de la barrera Schottky, el ancho de la región de depleción, la intensidad del campo eléctrico y la dependencia con la temperatura afectan simultáneamente el transporte eléctrico y térmico [9, 8]. Por ello, una descripción rigurosa del comportamiento del dispositivo requiere un tratamiento detallado de las interfaces metal–semiconductor, incorporando modelos electrostáticos y de transporte que permitan capturar su influencia en la corriente y en los balances de energía [10, 11].

En el presente trabajo, las interfaces metal–semiconductor se consideran como elementos activos del dispositivo termoelectrico y no como simples conexiones eléctricas. Este enfoque

interfacial permite analizar de manera integrada la formación de contactos óhmicos y Schottky, el transporte de portadores a través de barreras energéticas y la redistribución local de calor. A partir de esta perspectiva, se establece el marco físico que sustenta el desarrollo del modelo electro-térmico y del algoritmo auto-consistente empleados para describir el comportamiento de la celda unitaria Peltier [6, 11, 12].

## 2.4. Contactos óhmicos y Schottky en la literatura

El estudio de los contactos óhmicos y Schottky en interfaces metal-semiconductor ha sido un tema central en la física de semiconductores desde los primeros desarrollos de dispositivos electrónicos de estado sólido [6, 7]. La literatura ha demostrado que la naturaleza del contacto no solo determina la facilidad de inyección de portadores, sino que también condiciona el comportamiento eléctrico, térmico y energético de los dispositivos en los que se integra [10, 11]. En el contexto de los dispositivos termoelectricos, esta distinción adquiere una relevancia adicional, ya que los contactos influyen simultáneamente en el transporte de carga y en la transferencia local de calor [1, 3].

Los contactos óhmicos han sido ampliamente estudiados como interfaces ideales para la inyección y extracción eficiente de portadores [6]. Desde un punto de vista clásico, un contacto óhmico se caracteriza por una relación corriente-voltaje aproximadamente lineal y por una resistencia de contacto despreciable en comparación con la resistencia del semiconductor en volumen [7]. La literatura establece que este tipo de contacto se forma cuando la alineación energética entre el metal y el semiconductor permite que los portadores mayoritarios atraviesen la interfaz sin enfrentar barreras de potencial significativas [10]. En estas condiciones, la región interfacial no limita el flujo de corriente y su contribución a la disipación energética es mínima.

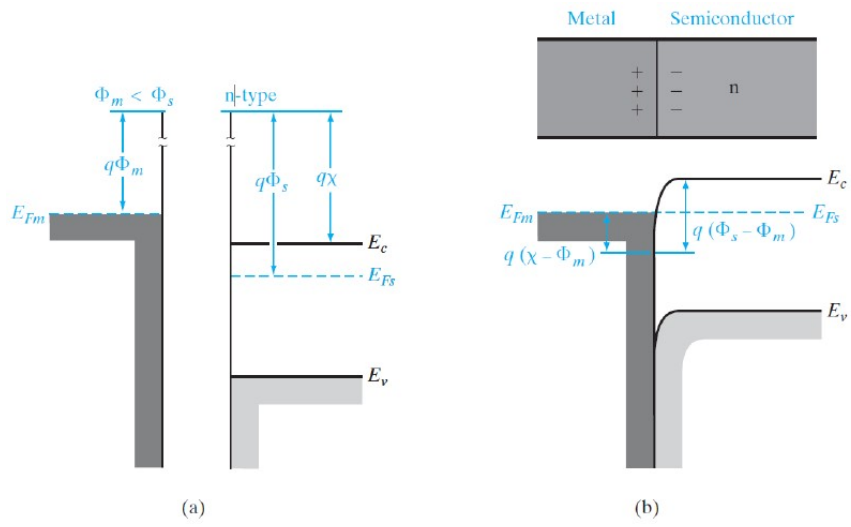


Figura 2.2: Contactos óhmicos metal–semiconductor: (a)  $\Phi_m < \Phi_s$  para un semiconductor tipo  $n$ ; (b) diagrama de bandas en equilibrio térmico para la unión.

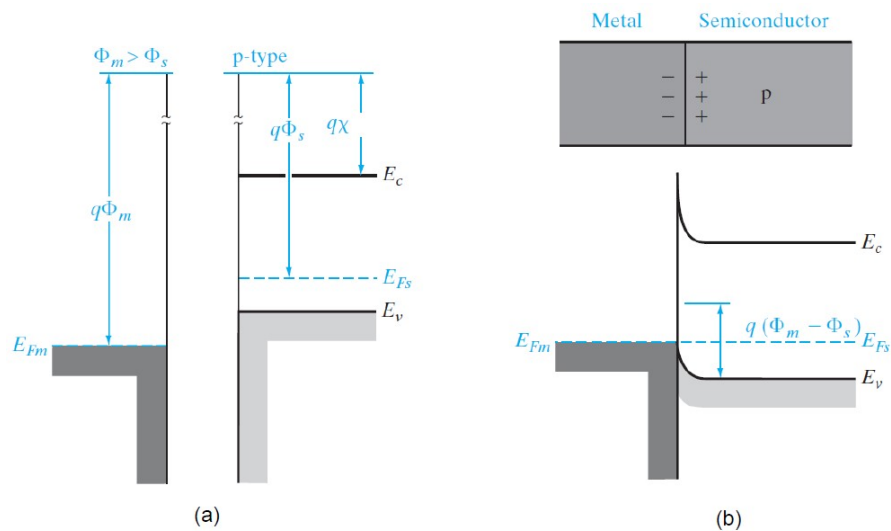


Figura 2.3: Contactos óhmicos metal–semiconductor: (a)  $\Phi_m > \Phi_s$  para un semiconductor tipo  $p$ ; (b) diagrama de bandas en equilibrio térmico para la unión.

En contraste, los contactos Schottky han sido objeto de extensos estudios debido a su comportamiento rectificante y a la presencia de una barrera de potencial en la interfaz [9, 8]. La formación de dicha barrera se atribuye a la diferencia entre la función de trabajo del metal y la afinidad electrónica del semiconductor, lo que da lugar a un curvado de bandas y a la aparición de una región de depleción pobre en portadores móviles [6, 7]. La altura de la barrera Schottky y el ancho de la región de depleción determinan la probabilidad de que los portadores crucen la interfaz, lo que se traduce en una relación corriente–voltaje no lineal dominada por mecanismos como la emisión termoiónica y, en ciertos regímenes, el tunelamiento [9].

La literatura clásica sobre contactos Schottky ha establecido modelos bien definidos para describir el transporte de corriente a través de estas interfaces [6]. En particular, el modelo de emisión termoiónica ha sido ampliamente utilizado para explicar la dependencia exponencial de la corriente con la altura de la barrera y la temperatura [9]. Estudios posteriores han incorporado efectos adicionales, como la reducción de la barrera inducida por el campo eléctrico, la presencia de estados interfaciales y la dependencia con el dopaje del semiconductor [8]. Estos desarrollos han permitido una descripción cada vez más precisa del comportamiento eléctrico de los contactos Schottky en una amplia gama de materiales y condiciones de operación.

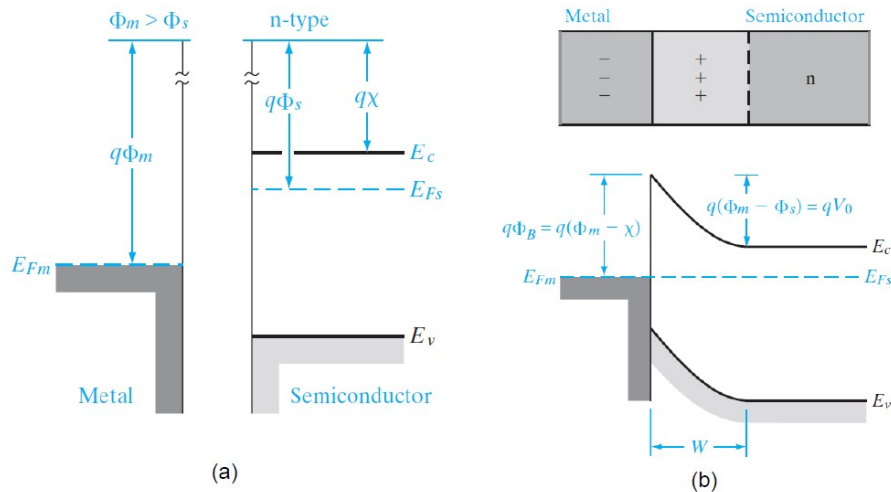


Figura 2.4: Barrera de Schottky formada por el contacto entre un semiconductor tipo  $n$  y un metal de mayor función de trabajo: (a) diagramas de bandas del metal y del semiconductor antes del contacto; (b) diagrama de bandas en equilibrio térmico para la unión metal–semiconductor.

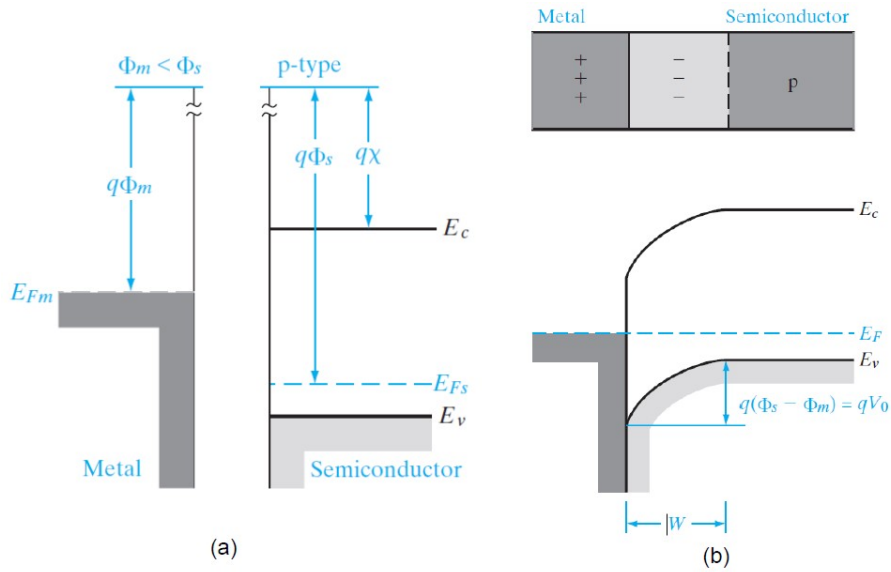


Figura 2.5: Barrera de Schottky formada por el contacto entre un semiconductor tipo  $p$  y un metal de menor función de trabajo: (a) diagramas de bandas antes del contacto; (b) diagrama de bandas en equilibrio térmico para la unión metal–semiconductor.

En el ámbito de los dispositivos termoeléctricos, la literatura ha mostrado que los contactos óhmicos y Schottky no pueden evaluarse únicamente desde la perspectiva eléctrica [1, 3]. Diversos estudios han señalado que las interfaces metal–semiconductor son también regiones activas de intercambio térmico, donde el efecto Peltier local puede generar enfriamiento o calentamiento significativo [4]. En contactos óhmicos, la transferencia de energía asociada al paso de corriente está dominada por la discontinuidad del coeficiente Peltier entre materiales, mientras que en contactos Schottky la disipación Joule adicional en la región de depleción puede modificar sustancialmente el balance energético local [6, 8].

Trabajos más recientes han enfatizado que, en dispositivos termoeléctricos de alta eficiencia, las interfaces Schottky pueden convertirse en factores limitantes del desempeño global [2, 5]. La resistencia interfacial elevada reduce la corriente total que puede circular por el dispositivo, lo que a su vez limita la magnitud del efecto Peltier aprovechable. Además, el calentamiento localizado asociado a la disipación Joule en estas interfaces puede degradar el gradiente térmico deseado y disminuir la eficiencia del bombeo de calor [15, 14]. Por esta razón, una parte significativa de la literatura se ha orientado a la ingeniería de contactos, buscando minimizar barreras indeseadas o controlar su efecto mediante la selección adecuada de materiales y dopajes [6, 7].

En este contexto, algunos estudios han propuesto estrategias para transformar contactos Schottky en cuasi-óhmicos mediante dopajes elevados en la región interfacial, capas intermedias metálicas o tratamientos superficiales [6, 8]. Otros trabajos, sin embargo, han señalado que las

barreras Schottky no siempre son indeseables y que, en ciertos diseños, pueden utilizarse de manera controlada para modular el flujo de corriente y la distribución térmica [11, 12]. Esta visión ha abierto la posibilidad de considerar las interfaces no solo como elementos pasivos a optimizar, sino como componentes activos del diseño termoeléctrico.

En el presente trabajo, se adopta esta perspectiva avanzada reportada en la literatura, en la cual los contactos óhmicos y Schottky se analizan como elementos fundamentales que determinan el comportamiento electro-térmico del dispositivo. En lugar de suponer contactos ideales, se incorpora explícitamente la física de las barreras Schottky y de las regiones de depleción en el modelado de la celda unitaria Peltier [6, 10, 11]. Este enfoque permite conectar de manera directa los desarrollos teóricos clásicos con un análisis detallado de los balances de energía y del transporte de corriente en las interfaces, proporcionando una descripción más realista y completa del funcionamiento del dispositivo.

## 2.5. Modelos previos de transporte electro-térmico

El modelado del transporte electro-térmico en dispositivos termoeléctricos ha sido abordado en la literatura desde múltiples enfoques, con distintos niveles de complejidad y grados de acoplamiento entre los fenómenos eléctricos y térmicos. De manera general, estos modelos buscan describir la relación entre la corriente eléctrica, la transferencia de calor y la distribución de temperatura en materiales semiconductores sometidos a gradientes térmicos y campos eléctricos. Sin embargo, una característica común en muchos de los enfoques clásicos es el tratamiento simplificado o idealizado de las interfaces metal-semiconductor.

Los primeros modelos de transporte termoeléctrico se desarrollaron a partir de formulaciones macroscópicas basadas en ecuaciones constitutivas promedio. En estos enfoques, el dispositivo se describe como un medio continuo caracterizado por coeficientes efectivos, tales como el coeficiente Seebeck, la conductividad eléctrica y la conductividad térmica. El efecto Peltier se introduce como una fuente o sumidero de calor proporcional a la corriente eléctrica, mientras que la disipación Joule se considera distribuida de manera uniforme en el volumen del material. Este tipo de modelos ha sido ampliamente utilizado para estimar el desempeño global de módulos termoeléctricos y para evaluar parámetros como la potencia de enfriamiento o el coeficiente de desempeño.

Si bien los modelos macroscópicos han demostrado ser útiles para el diseño preliminar de

dispositivos, su principal limitación radica en que no capturan los fenómenos localizados que ocurren en las interfaces. En particular, al asumir contactos ideales, estos modelos ignoran la presencia de barreras de potencial, regiones de depleción y campos eléctricos intensos en las interfaces metal–semiconductor. Como consecuencia, la corriente calculada puede sobreestimarse y la distribución real de calor puede diferir significativamente de la predicha por el modelo.

Con el objetivo de mejorar la descripción del transporte eléctrico, diversos estudios han incorporado modelos microscópicos para el cálculo de la corriente en contactos Schottky. Estos enfoques se basan en la resolución de la ecuación de Poisson en la región interfacial, acoplada a las estadísticas de portadores, y emplean mecanismos como la emisión termoiónica para describir el cruce de la barrera. En estos modelos, la corriente depende de manera exponencial de la altura de la barrera Schottky y de la temperatura, lo que permite capturar con mayor fidelidad el comportamiento no lineal observado experimentalmente. No obstante, en muchos casos estos modelos se enfocan exclusivamente en la caracterización eléctrica de la interfaz, sin integrar de forma explícita los efectos térmicos asociados.

Por otro lado, algunos trabajos han propuesto modelos térmicos detallados que consideran balances de energía locales en regiones específicas del dispositivo. En estos enfoques, el efecto Peltier, la disipación Joule y la conducción térmica se combinan para describir la evolución de la temperatura en régimen estacionario. Sin embargo, con frecuencia la corriente eléctrica se introduce como un parámetro externo o se calcula a partir de suposiciones simplificadas, sin considerar que el propio transporte eléctrico puede estar limitado por las interfaces. Esta separación entre el análisis eléctrico y el térmico reduce la capacidad predictiva del modelo cuando se estudian dispositivos con contactos no ideales.

Modelos más recientes han intentado acoplar de manera parcial los fenómenos eléctricos y térmicos, incorporando dependencias con la temperatura en parámetros como la conductividad eléctrica o la altura de barrera. A pesar de estos avances, la literatura muestra que aún es común tratar las interfaces como regiones de transición sin estructura interna, en lugar de considerarlas como zonas activas donde se concentran procesos electrostáticos y energéticos complejos. Esta aproximación puede ser adecuada para dispositivos con contactos altamente optimizados, pero resulta insuficiente cuando se analizan configuraciones donde las barreras Schottky desempeñan un papel dominante.

En el contexto de las celdas unitarias Peltier, esta limitación es particularmente relevante. La corriente que atraviesa el dispositivo debe ser continua a lo largo de todas las interfaces,

por lo que la presencia de una barrera Schottky significativa puede imponer un límite global al transporte eléctrico. Al mismo tiempo, dicha barrera introduce una contribución adicional de disipación Joule y modifica el intercambio de calor por efecto Peltier. Ignorar este acoplamiento conduce a una descripción incompleta del gradiente térmico y del punto de operación real del dispositivo.

El enfoque adoptado en el presente trabajo se distingue de los modelos previos al integrar de manera explícita el transporte electrostático en las interfaces con los balances de energía locales. En lugar de calcular la corriente y la temperatura de forma independiente, se emplea un algoritmo auto-consistente que resuelve simultáneamente la ecuación de Poisson, la redistribución de portadores y el cálculo de la densidad de corriente en interfaces Schottky, y se acopla posteriormente con un balance energético que incluye los términos Peltier, Joule y de conducción térmica. Esta estrategia permite que la corriente obtenida sea coherente tanto con la física microscópica de las interfaces como con el gradiente térmico impuesto al dispositivo.

De esta manera, el modelo desarrollado en este trabajo supera las limitaciones de los enfoques tradicionales al considerar las interfaces metal–semiconductor como elementos activos que gobiernan el comportamiento electro–térmico global de la celda unitaria Peltier. Esta integración constituye la base conceptual sobre la cual se construyen los capítulos posteriores, dedicados al desarrollo detallado del modelo físico, del algoritmo numérico y del análisis de resultados.

## **2.6. Comparativa con trabajos previos y aportaciones del presente estudio**

El estudio de las interfaces metal–semiconductor en dispositivos termoelectricos ha sido abordado ampliamente en la literatura desde distintas perspectivas teóricas y experimentales [1, 3, 2]. En trabajos previos, el análisis del efecto Peltier y del transporte de carga suele realizarse bajo modelos simplificados que asumen contactos ideales o cuasi-ómicos, en los cuales las pérdidas energéticas asociadas a las interfaces se consideran despreciables o se incorporan mediante parámetros efectivos constantes [5, 15]. Bajo este enfoque, la densidad de corriente se modela generalmente como uniforme, sin considerar explícitamente la redistribución espacial del potencial eléctrico ni la modificación local de las concentraciones de portadores de carga en la región de contacto.

Asimismo, diversos estudios han analizado las uniones Schottky desde un punto de vista

puramente electrónico, centrándose en la determinación de la altura de barrera, el ancho de la zona de depleción y los mecanismos dominantes de transporte, tales como la emisión termoiónica o el túnel cuántico [6, 9, 8]. Sin embargo, en estos trabajos el análisis suele realizarse de forma desacoplada del comportamiento térmico del dispositivo, sin evaluar de manera directa el impacto de dichas interfaces sobre el gradiente de temperatura ni sobre la eficiencia termoeléctrica global [1, 3].

En contraste, el presente trabajo aporta un enfoque integral que acopla explícitamente la física de las interfaces metal–semiconductor con el desempeño termoeléctrico de una celda de efecto Peltier. A diferencia de los modelos tradicionales, se desarrolla un proceso auto–consistente que integra la ecuación de Poisson, la estadística de portadores y los mecanismos de transporte eléctrico, permitiendo calcular de forma iterativa la distribución espacial del potencial eléctrico, el campo eléctrico, las concentraciones de carga y la densidad de corriente en las interfaces [10, 11, 12].

Una contribución relevante de este estudio es la incorporación explícita del tipo de contacto (Schottky u óhmico) en el análisis de las pérdidas energéticas, evidenciando cómo la altura de la barrera Schottky, el nivel de dopaje y el voltaje aplicado influyen directamente en la magnitud de la corriente y, en consecuencia, en la transferencia de calor asociada al efecto Peltier [6, 8]. Este enfoque permite identificar condiciones bajo las cuales las interfaces dejan de ser elementos pasivos y se convierten en factores determinantes del gradiente de temperatura generado.

Finalmente, este trabajo no solo describe el comportamiento eléctrico de las interfaces, sino que establece una relación cuantitativa entre las corrientes calculadas mediante el modelo auto–consistente y el desempeño térmico del dispositivo [1, 3]. De esta manera, se proporciona una herramienta de análisis que puede emplearse para la optimización del diseño de celdas termoeléctricas, contribuyendo a una comprensión más profunda del papel que juegan las interfaces metal–semiconductor en la eficiencia y estabilidad de dispositivos de efecto Peltier.

## Capítulo 3

# Fundamentos físicos del transporte termoeléctrico

### 3.1. Efectos Seebeck, Peltier y Thomson

Los fenómenos termoeléctricos fundamentales que gobiernan el funcionamiento de los dispositivos Peltier son los efectos Seebeck, Peltier y Thomson. Estos tres efectos describen distintas manifestaciones del acoplamiento entre el transporte de carga eléctrica y el transporte de energía térmica en materiales conductores y semiconductores. Aunque pueden analizarse de manera independiente desde un punto de vista fenomenológico, en la práctica forman un conjunto inseparable que determina el comportamiento electro-térmico de los dispositivos termoeléctricos.

El efecto Seebeck se manifiesta cuando existe un gradiente de temperatura a lo largo de un material conductor o semiconductor, dando lugar a la generación de una diferencia de potencial eléctrico. Este fenómeno ocurre debido a que los portadores de carga en la región más caliente poseen una mayor energía térmica y tienden a difundirse hacia la región más fría, generando una redistribución de carga y, en consecuencia, un campo eléctrico interno. La magnitud de este efecto se caracteriza mediante el coeficiente Seebeck  $S$ , definido como la razón entre la diferencia de potencial generada y el gradiente de temperatura aplicado. En materiales termoeléctricos, el valor y el signo de  $S$  dependen del tipo de portador dominante, siendo negativo en semiconductores tipo  $n$  y positivo en semiconductores tipo  $p$ .

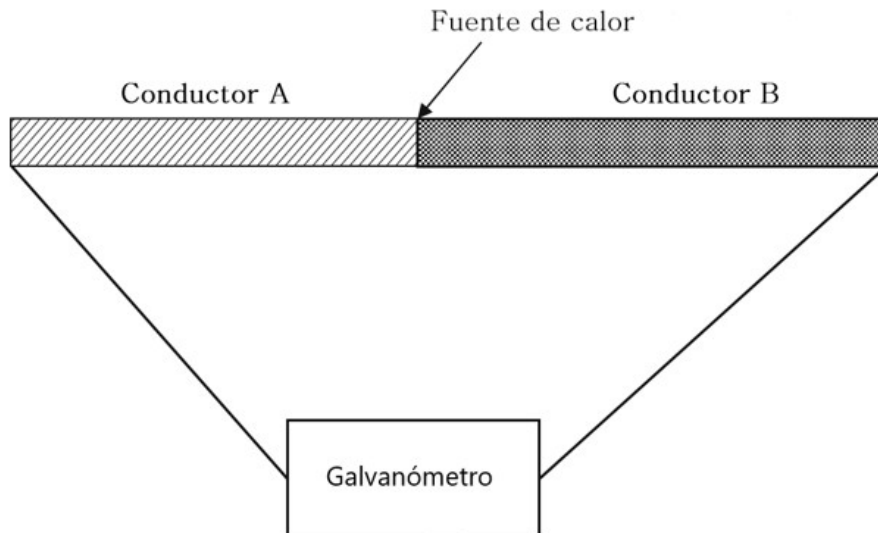


Figura 3.1: Experimento del efecto Seebeck

El efecto Peltier es el fenómeno inverso al efecto Seebeck y se presenta cuando una corriente eléctrica atraviesa la interfaz entre dos materiales distintos. En este caso, se produce una absorción o liberación de calor en la región de contacto, cuya magnitud es proporcional a la corriente eléctrica que circula. Este intercambio de calor se describe mediante el coeficiente Peltier  $\Pi$ , el cual relaciona el flujo de calor con la corriente. El signo del efecto Peltier depende de la dirección de la corriente y de las propiedades termoeléctricas de los materiales en contacto. A diferencia del efecto Seebeck, el efecto Peltier es intrínsecamente interfacial, ya que se origina en las discontinuidades energéticas presentes en las uniones entre materiales.

Desde una perspectiva microscópica, el efecto Peltier puede interpretarse como el resultado del cambio en la energía libre de los portadores de carga al cruzar una interfaz. Cuando un portador se desplaza desde un material hacia otro con diferente estructura electrónica, debe ajustar su energía para ocupar los estados disponibles en el nuevo entorno. Este ajuste energético se logra mediante el intercambio de energía con la red cristalina, en forma de absorción o emisión de fonones. Como consecuencia, la interfaz puede comportarse como una región de enfriamiento o calentamiento local, dependiendo del sentido del flujo de portadores y de la diferencia entre los coeficientes Peltier de los materiales involucrados.

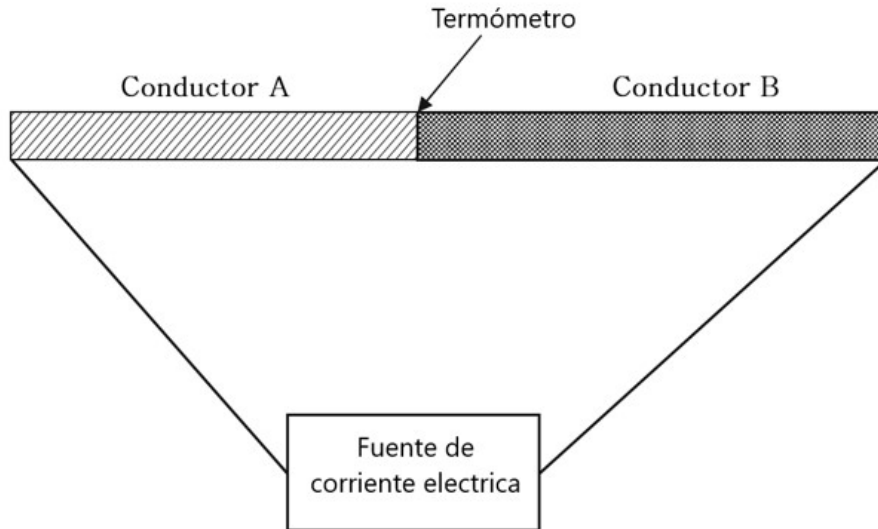


Figura 3.2: Experimento del efecto Peltier

El efecto Thomson describe la absorción o liberación continua de calor cuando una corriente eléctrica circula a lo largo de un material sometido a un gradiente de temperatura. A diferencia del efecto Peltier, que ocurre en interfaces, el efecto Thomson es un fenómeno volumétrico que se manifiesta dentro de un mismo material. Su magnitud está asociada a la variación del coeficiente Seebeck con la temperatura y se caracteriza mediante el coeficiente Thomson. En muchos análisis prácticos, este efecto puede ser pequeño en comparación con los efectos Peltier y Joule; sin embargo, su contribución puede volverse relevante cuando existen gradientes térmicos significativos a lo largo de las ramas semiconductoras.

En el contexto de los dispositivos termoeléctricos, estos tres efectos se encuentran íntimamente relacionados y no pueden considerarse de manera aislada. El efecto Seebeck establece la relación entre gradientes térmicos y campos eléctricos, el efecto Peltier gobierna el intercambio localizado de calor en las interfaces bajo el paso de corriente, y el efecto Thomson complementa la descripción energética cuando la temperatura varía espacialmente dentro de un mismo material. La interacción entre estos fenómenos, junto con la disipación Joule y la conducción térmica, determina la distribución de temperatura y el desempeño global del dispositivo.

En el presente trabajo, el análisis se centra principalmente en el efecto Peltier y en su interacción con los contactos metal–semiconductor, dado que estos constituyen las regiones donde se concentra la redistribución energética que da origen al gradiente térmico de la celda unitaria. No obstante, el efecto Seebeck y el efecto Thomson proporcionan el marco teórico general necesario para comprender el acoplamiento electro–térmico subyacente y serán considerados de manera

implícita en el desarrollo de los modelos y balances energéticos presentados en los capítulos posteriores.

### 3.2. Transporte de portadores en semiconductores tipo $N$ y tipo $P$

El transporte de portadores de carga en semiconductores constituye el mecanismo fundamental mediante el cual se manifiestan los efectos termoeléctricos en los dispositivos Peltier. En materiales semiconductores, la conducción eléctrica y la transferencia de energía están dominadas por la dinámica de los portadores mayoritarios, cuya naturaleza depende del tipo de dopaje del material. En semiconductores tipo  $N$ , los electrones son los portadores mayoritarios, mientras que en semiconductores tipo  $P$  el transporte está dominado por huecos. Esta diferencia tiene implicaciones directas en el signo del coeficiente Seebeck, en la dirección del flujo de energía y en el comportamiento interfacial del dispositivo.

En un semiconductor tipo  $N$ , el dopaje con átomos donadores introduce niveles energéticos cercanos a la banda de conducción, lo que incrementa significativamente la concentración de electrones libres. Como resultado, el nivel de Fermi se desplaza hacia la banda de conducción y los electrones participan activamente en el transporte eléctrico y térmico. Bajo la aplicación de un campo eléctrico, los electrones adquieren una velocidad de deriva que da lugar a una corriente eléctrica. De manera simultánea, estos portadores transportan energía asociada tanto a su energía cinética como a su energía potencial electrostática, contribuyendo al acoplamiento entre los flujos eléctrico y térmico.

En los semiconductores tipo  $P$ , el dopaje con aceptores genera niveles energéticos cercanos a la banda de valencia, favoreciendo la presencia de huecos como portadores mayoritarios. El nivel de Fermi se desplaza hacia la banda de valencia y el transporte de carga se describe de manera efectiva en términos del movimiento de huecos. Aunque los huecos no representan partículas físicas independientes, su descripción como portadores positivos resulta conveniente para analizar el transporte eléctrico y energético. Al igual que los electrones, los huecos responden a campos eléctricos y gradientes térmicos, contribuyendo a la corriente eléctrica y al flujo de energía en el material.

El transporte de portadores en semiconductores puede describirse, a nivel macroscópico, mediante la superposición de dos mecanismos principales: la deriva inducida por campos eléctricos

y la difusión asociada a gradientes de concentración. En presencia de un campo eléctrico, los portadores experimentan una fuerza que los acelera, dando lugar a una corriente de deriva proporcional a la movilidad y a la intensidad del campo. Por otro lado, cuando existen gradientes de concentración, los portadores tienden a difundirse desde regiones de mayor densidad hacia regiones de menor densidad, generando una corriente de difusión. En dispositivos termoelectricos, ambos mecanismos coexisten y se encuentran estrechamente acoplados a los gradientes de temperatura.

Desde el punto de vista energético, cada portador transporta una cantidad de energía que depende de su posición relativa respecto al nivel de Fermi y de las bandas de energía del semiconductor. Esta energía transportada es la responsable de los efectos termoelectricos observados. En particular, el signo del coeficiente Seebeck refleja si los portadores mayoritarios transportan energía desde regiones calientes hacia frías (caso típico de electrones en tipo  $N$ ) o en sentido opuesto (caso de huecos en tipo  $P$ ). Esta diferencia explica la necesidad de combinar ramas tipo  $N$  y tipo  $P$  en una celda termoelectrica, de modo que sus contribuciones se sumen en lugar de cancelarse.

En el contexto de una celda unitaria Peltier, el transporte de portadores no ocurre de manera aislada en el volumen del semiconductor, sino que está fuertemente influenciado por las interfaces metal-semiconductor. Al aproximarse a una interfaz, los portadores experimentan cambios abruptos en el potencial electrostático y en la estructura de bandas, lo que modifica tanto su probabilidad de cruce como la energía que transportan. En semiconductores tipo  $N$ , los electrones deben superar o atravesar barreras energéticas al entrar en contacto con el metal, mientras que en semiconductores tipo  $P$  los huecos experimentan procesos análogos, pero con una interpretación energética inversa.

La diferencia en la naturaleza de los portadores también se refleja en la respuesta térmica del dispositivo. En interfaces donde los electrones o huecos deben ganar energía para adaptarse al nuevo entorno electrónico, el sistema absorbe energía del retículo cristalino, produciendo enfriamiento local. Por el contrario, cuando los portadores pierden energía al cruzar una interfaz, esta se libera en forma de calor, generando calentamiento. Este comportamiento, que depende del tipo de portador dominante, constituye la base microscópica del efecto Peltier y del perfil térmico característico de las celdas termoelectricas.

En este trabajo, el análisis del transporte de portadores en semiconductores tipo  $N$  y tipo  $P$  se emplea como fundamento para el desarrollo del modelo electrostático y energético de las

interfaces. Al considerar explícitamente la naturaleza de los portadores y su interacción con los campos eléctricos y las discontinuidades energéticas, se establece un marco físico coherente para describir el transporte de corriente, la redistribución local de energía y la formación del gradiente térmico en la celda unitaria Peltier.

### 3.3. Energía libre, potencial químico y nivel de Fermi

La descripción rigurosa del transporte de portadores en dispositivos termoeléctricos requiere el uso de magnitudes energéticas que permitan caracterizar el estado electrónico del sistema tanto en equilibrio como fuera de él. Entre estas magnitudes, la energía libre, el potencial químico y el nivel de Fermi desempeñan un papel central, ya que gobiernan la ocupación de estados electrónicos, la redistribución de portadores y el intercambio de energía cuando estos atraviesan regiones con propiedades electrónicas distintas.

El potencial químico  $\mu$  representa la energía libre asociada a la adición de un portador al sistema y constituye una medida fundamental del estado termodinámico de los electrones o huecos en un material. En un semiconductor en equilibrio térmico y químico, el potencial químico es uniforme en todo el sistema y coincide con el nivel de Fermi. Esta condición garantiza que no exista flujo neto de portadores en ausencia de campos eléctricos o gradientes de temperatura.

El nivel de Fermi  $E_F$  se define como la energía para la cual la probabilidad de ocupación electrónica es del 50% a una temperatura dada. En semiconductores, la posición del nivel de Fermi con respecto a las bandas de conducción y valencia depende del tipo y nivel de dopaje. En un semiconductor tipo  $N$ , el nivel de Fermi se encuentra cercano a la banda de conducción, reflejando la alta concentración de electrones libres. En un semiconductor tipo  $P$ , el nivel de Fermi se desplaza hacia la banda de valencia, indicando que los huecos son los portadores mayoritarios. Esta diferencia energética es la base del comportamiento asimétrico de electrones y huecos en el transporte termoeléctrico.

Cuando el sistema se encuentra fuera de equilibrio, por ejemplo bajo la aplicación de un campo eléctrico o en presencia de un gradiente térmico, el potencial químico deja de ser uniforme y puede variar espacialmente. En estas condiciones, resulta conveniente introducir el concepto de nivel de cuasi-Fermi, que describe el estado energético local de los portadores. El nivel de cuasi-Fermi permite tratar situaciones fuera de equilibrio manteniendo una descripción termodinámica coherente, especialmente en regiones donde existen fuertes variaciones del potencial

electrostático, como en las interfaces metal–semiconductor.

La energía total de un portador en el semiconductor puede expresarse como la suma de su energía química y su energía potencial electrostática. En este contexto, el nivel de Fermi local  $E_F(x)$  se relaciona con el potencial químico  $\mu(x)$  y el potencial electrostático  $\psi(x)$  mediante la expresión

$$E_F(x) = \mu(x) - q\psi(x),$$

donde  $q$  es la carga elemental. Esta relación muestra explícitamente cómo el curvado de bandas y los campos eléctricos internos modifican la energía efectiva de los portadores a lo largo del dispositivo.

En las interfaces metal–semiconductor, la alineación de los niveles de Fermi constituye el mecanismo fundamental que da origen a la formación de barreras de potencial y regiones de depleción. Al poner en contacto un metal y un semiconductor, los electrones se redistribuyen hasta que los niveles de Fermi de ambos materiales se igualan. Este proceso implica una transferencia de carga y genera un potencial electrostático interno que curva las bandas del semiconductor. La magnitud de este curvado y la posición resultante del nivel de Fermi determinan la altura de la barrera Schottky y la facilidad con la que los portadores pueden atravesar la interfaz.

Desde el punto de vista termoeléctrico, los cambios en la energía libre de los portadores al cruzar una interfaz son responsables del intercambio local de calor. Cuando un portador pasa de un material a otro con diferente estructura electrónica, su potencial químico se ajusta para satisfacer la condición de equilibrio local. Si este ajuste implica una disminución de la energía libre del portador, la energía excedente se transfiere a la red cristalina en forma de calor. Por el contrario, si el portador debe aumentar su energía libre para adaptarse al nuevo entorno, dicha energía se extrae del retículo, produciendo un enfriamiento local. Este mecanismo constituye la base microscópica del efecto Peltier en interfaces metal–semiconductor.

En el marco del presente trabajo, el potencial químico y el nivel de Fermi desempeñan un papel esencial en el desarrollo del modelo auto-consistente de las interfaces Schottky. La resolución simultánea de la ecuación de Poisson y de las distribuciones de portadores permite determinar la variación espacial del potencial electrostático y del nivel de Fermi, asegurando la coherencia entre la electrostática, el transporte de carga y los balances energéticos. De este modo, la energía libre de los portadores se incorpora de manera explícita en el análisis del transporte electro–térmico y en la descripción del gradiente térmico de la celda unitaria Peltier.

### 3.4. Conducción eléctrica y térmica

La conducción eléctrica y la conducción térmica constituyen dos mecanismos fundamentales de transporte en los dispositivos termoeléctricos y se encuentran intrínsecamente acoplados a través del movimiento de los portadores de carga. En una celda Peltier, ambos procesos coexisten y contribuyen de manera simultánea a la redistribución de energía, influyendo directamente en la corriente eléctrica que circula por el dispositivo y en el perfil de temperatura que se establece en régimen estacionario.

La conducción eléctrica en semiconductores se origina a partir del movimiento ordenado de los portadores de carga bajo la acción de un campo eléctrico. A nivel macroscópico, este proceso se describe mediante la ley de Ohm local, en la cual la densidad de corriente eléctrica  $\mathbf{J}$  es proporcional al campo eléctrico  $\mathbf{E}$ :

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E},$$

donde  $\sigma$  es la conductividad eléctrica del material. En semiconductores, la conductividad depende de la concentración de portadores y de su movilidad, las cuales están determinadas por el tipo de dopaje, la temperatura y los mecanismos de dispersión presentes en el material. Tanto en semiconductores tipo  $N$  como tipo  $P$ , el aumento de la concentración de portadores incrementa la conductividad eléctrica, aunque a costa de modificar otras propiedades relevantes para el desempeño termoeléctrico.

Desde el punto de vista energético, la conducción eléctrica está asociada inevitablemente a la disipación de energía en forma de calor, conocida como efecto Joule. Esta disipación se produce debido a la interacción de los portadores con la red cristalina y con impurezas, lo que conduce a la conversión de energía eléctrica en excitaciones vibracionales del retículo. El calor generado por efecto Joule puede expresarse, a nivel local, como

$$Q_{\text{Joule}} = I^2 R,$$

donde  $I$  es la corriente eléctrica y  $R$  la resistencia efectiva de la región considerada. En dispositivos termoeléctricos, este término representa una fuente de calor indeseada que compite con el efecto Peltier y limita la eficiencia del bombeo térmico.

La conducción térmica describe el transporte de calor impulsado por gradientes de tempera-

tura y se rige por la ley de Fourier. El flujo de calor  $\mathbf{q}$  está dado por

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T,$$

donde  $\kappa$  es la conductividad térmica y  $T$  la temperatura. En materiales termoeléctricos, la conductividad térmica incluye contribuciones tanto de la red cristalina como de los portadores de carga. Una conductividad térmica baja es deseable para mantener gradientes de temperatura elevados; sin embargo, reducirla sin afectar negativamente la conductividad eléctrica representa uno de los principales retos en el diseño de materiales termoeléctricos.

En una celda Peltier, la conducción térmica actúa como un mecanismo de redistribución de calor entre regiones con diferentes temperaturas. Mientras que el efecto Peltier introduce fuentes y sumideros localizados de calor en las interfaces, la conducción térmica tiende a suavizar las diferencias de temperatura a lo largo del dispositivo. Este efecto resulta especialmente relevante en régimen estacionario, donde el perfil térmico final se determina por el balance entre la generación y absorción local de calor y su propagación a través de los materiales.

La interacción entre conducción eléctrica y térmica es particularmente crítica en las interfaces metal–semiconductor. En regiones donde existen barreras Schottky, la resistencia efectiva aumenta debido a la presencia de la región de depleción, intensificando la disipación Joule local. Al mismo tiempo, el calor generado debe ser evacuado mediante conducción térmica hacia las regiones adyacentes, lo que modifica el perfil de temperatura y retroalimenta el comportamiento eléctrico de la interfaz. Este acoplamiento electro–térmico convierte a las interfaces en zonas activas que gobiernan el desempeño global del dispositivo.

En el marco del presente trabajo, la conducción eléctrica y la conducción térmica se incorporan de manera explícita en los balances de energía desarrollados para cada interfaz de la celda unitaria. La inclusión de los términos asociados al efecto Joule y a la conducción térmica, junto con el efecto Peltier, permite describir de forma coherente la redistribución de energía en el dispositivo. Esta formulación resulta esencial para capturar el comportamiento real de la celda Peltier, en la cual la corriente eléctrica y el gradiente térmico se determinan mutuamente a través de un proceso acoplado.

### 3.5. Disipación Joule y generación de calor

La disipación Joule constituye uno de los mecanismos fundamentales de generación de calor en los dispositivos termoeléctricos y representa una limitación inherente al transporte de corriente eléctrica en materiales reales. Este fenómeno se origina a partir de la interacción de los portadores de carga con la red cristalina, impurezas y defectos estructurales, procesos que convierten parte de la energía eléctrica suministrada al sistema en energía térmica. En una celda Peltier, la disipación Joule coexiste con el efecto Peltier y la conducción térmica, influyendo de manera directa en la distribución de temperatura y en la eficiencia global del dispositivo.

Desde un punto de vista macroscópico, el calor generado por efecto Joule puede expresarse como

$$Q_{\text{Joule}} = I^2 R,$$

donde  $I$  es la corriente eléctrica que circula por el dispositivo y  $R$  la resistencia eléctrica efectiva de la región considerada. Esta relación pone de manifiesto que la disipación Joule crece cuadráticamente con la corriente, lo que implica que incrementos moderados en la corriente pueden dar lugar a aumentos significativos en la generación de calor. En dispositivos termoeléctricos, este comportamiento establece un compromiso entre la magnitud del efecto Peltier aprovechable y las pérdidas térmicas asociadas al transporte de corriente.

En los semiconductores en volumen, la disipación Joule se distribuye de manera relativamente uniforme a lo largo del material, siempre que las propiedades eléctricas sean homogéneas. Sin embargo, en regiones donde existen variaciones abruptas en la conductividad eléctrica, como en las interfaces metal-semiconductor, la generación de calor puede concentrarse localmente. Este efecto es particularmente pronunciado en contactos Schottky, donde la presencia de una región de depleción pobre en portadores incrementa la resistencia eléctrica efectiva y da lugar a campos eléctricos intensos.

A nivel microscópico, la disipación Joule puede interpretarse como la transferencia de energía desde los portadores acelerados por el campo eléctrico hacia el retículo cristalino mediante procesos de dispersión. En regiones con campos eléctricos elevados, los portadores adquieren una energía cinética mayor antes de dispersarse, lo que incrementa la tasa de generación de fonones y, por tanto, el calentamiento local. Este mecanismo resulta especialmente relevante en las interfaces Schottky, donde el campo eléctrico máximo se concentra en la región de depleción.

Desde el punto de vista termoeléctrico, la disipación Joule actúa como una fuente de calor

que compite directamente con el efecto Peltier. Mientras que el efecto Peltier puede generar enfriamiento localizado en determinadas interfaces, el calor producido por efecto Joule tiende a elevar la temperatura y a reducir el gradiente térmico útil. Esta competencia es uno de los factores que limitan la eficiencia de los dispositivos Peltier, especialmente cuando se opera a corrientes elevadas o cuando las interfaces presentan resistencias significativas.

En una celda unitaria Peltier, la distribución espacial de la disipación Joule no es uniforme y depende de la naturaleza de cada interfaz. En contactos predominantemente óhmicos, la resistencia interfacial es baja y la contribución Joule resulta relativamente pequeña. Por el contrario, en contactos Schottky, la resistencia asociada a la barrera de potencial y a la región de depleción puede dominar la disipación total, convirtiendo a estas interfaces en fuentes térmicas localizadas. Esta generación de calor influye no solo en el perfil de temperatura, sino también en el transporte eléctrico, ya que la temperatura afecta a la movilidad de los portadores y a la altura efectiva de la barrera.

En el marco del presente trabajo, la disipación Joule se incorpora explícitamente en los balances de energía formulados para cada interfaz de la celda unitaria. Al considerar este término junto con el efecto Peltier y la conducción térmica, se obtiene una descripción coherente de la redistribución energética en régimen estacionario. Esta formulación permite identificar de manera clara el papel de las interfaces Schottky como regiones críticas de generación de calor y establecer su influencia en la corriente de operación y en el gradiente térmico global del dispositivo.

Con esta descripción se completa el conjunto de fundamentos físicos necesarios para el análisis electro-térmico de la celda unitaria Peltier. Los conceptos desarrollados en este capítulo constituyen la base sobre la cual se construyen los modelos interfaciales, el algoritmo auto-consistente y los balances de energía detallados en los capítulos siguientes.

## Capítulo 4

# Materiales y estructura de la celda unitaria Peltier

### 4.1. Selección de materiales semiconductores

La selección de los materiales semiconductores constituye una etapa fundamental en el diseño de una celda unitaria Peltier, ya que de ella dependen tanto el desempeño termoeléctrico global del dispositivo como la validez de los modelos físicos empleados para describir su comportamiento. En este trabajo, la elección de los materiales se realiza atendiendo a criterios termoeléctricos, electrónicos y estructurales, con el objetivo de garantizar un transporte eficiente de carga y una redistribución controlada de energía térmica en las interfaces.

Como se discutió en el capítulo anterior, el desempeño de un material termoeléctrico está gobernado por la combinación de un coeficiente Seebeck elevado, una alta conductividad eléctrica y una baja conductividad térmica. Estos requisitos se resumen en el factor de mérito adimensional  $ZT$ , el cual sirve como parámetro de referencia para evaluar la idoneidad de un material en aplicaciones termoeléctricas. Sin embargo, en el contexto de una celda unitaria Peltier, la selección del material no se limita a maximizar  $ZT$ , sino que también debe considerar la compatibilidad energética con los metales de contacto y el comportamiento interfacial resultante.

En este trabajo se selecciona el telururo de bismuto ( $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ) como material base tanto para la rama semiconductor tipo  $N$  como para la rama tipo  $P$ . Esta elección responde, en primer lugar, a que el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  presenta uno de los valores más altos de  $ZT$  en el rango de temperaturas cercano a la ambiente, lo que lo convierte en el material estándar para módulos Peltier comerciales y de investigación. Su estructura cristalina laminar favorece una baja conductividad térmica de la red,

mientras que su movilidad electrónica permite mantener una conductividad eléctrica adecuada bajo dopajes controlados.

La posibilidad de obtener  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $N$  y tipo  $P$  mediante dopaje selectivo constituye una ventaja adicional clave. En la rama tipo  $N$ , el material se dopa con donadores, desplazando el nivel de Fermi hacia la banda de conducción y favoreciendo a los electrones como portadores mayoritarios. En la rama tipo  $P$ , el dopaje con aceptores desplaza el nivel de Fermi hacia la banda de valencia, haciendo que los huecos dominen el transporte de carga. Esta simetría material permite construir una celda unitaria en la que ambas ramas presentan propiedades térmicas comparables, reduciendo asimetrías indeseadas en la conducción de calor.

El uso del mismo material base en ambas ramas también aporta ventajas desde el punto de vista mecánico y estructural. Al compartir coeficientes de expansión térmica similares, las ramas tipo  $N$  y tipo  $P$  experimentan deformaciones comparables bajo gradientes de temperatura, lo que disminuye tensiones internas y mejora la integridad del dispositivo. Este aspecto resulta particularmente relevante en dispositivos sometidos a ciclos térmicos repetidos, como ocurre en aplicaciones de enfriamiento activo.

Desde el punto de vista electrónico, el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  presenta afinidades electrónicas y posiciones del nivel de Fermi que permiten una alineación energética favorable con metales comúnmente utilizados como contactos. Esta característica resulta esencial para el análisis de las interfaces metal–semiconductor, ya que la formación de contactos óhmicos o Schottky depende directamente de la relación entre la función de trabajo del metal y las propiedades electrónicas del semiconductor. La elección de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  facilita así el estudio sistemático de distintos tipos de contacto dentro de una misma celda unitaria.

## 4.2. Metales de contacto y alineación energética

La selección de los metales de contacto en una celda unitaria Peltier es un aspecto crítico que influye de manera directa en la formación de las interfaces metal–semiconductor, en el transporte de corriente y en la redistribución local de energía térmica. En el presente trabajo, los metales de contacto se eligen no únicamente por su conductividad eléctrica y térmica, sino principalmente por su alineación energética con el semiconductor  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $N$  y tipo  $P$ , ya que esta alineación determina la naturaleza óhmica o Schottky de cada interfaz.

La estructura de la celda unitaria considerada se compone de contactos metálicos externos

de aluminio (Al) y de un metal intermedio de paladio (Pd), dando lugar a la configuración

$$\text{Al}(-) \mid \text{Bi}_2\text{Te}_3(N) \mid \text{Pd} \mid \text{Bi}_2\text{Te}_3(P) \mid \text{Al}(+).$$

Esta disposición permite generar de manera controlada distintos tipos de contacto dentro de una misma celda, lo que resulta fundamental para el análisis interfacial desarrollado en este trabajo.

El aluminio se selecciona como metal de contacto externo debido a su combinación favorable de propiedades electrónicas, térmicas y tecnológicas. Desde el punto de vista electrónico, el aluminio presenta una función de trabajo relativamente baja, del orden de  $\Phi_{\text{Al}} \approx 4,3$  eV. Esta característica favorece la formación de un contacto predominantemente óhmico con el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $P$ , ya que la alineación energética permite la inyección eficiente de huecos sin la aparición de una barrera de potencial significativa. En el caso del contacto con  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $N$ , la diferencia entre la función de trabajo del metal y la afinidad electrónica del semiconductor puede dar lugar a una barrera Schottky débil o a un contacto cuasi-óhmico, dependiendo del dopaje y de las condiciones interfaciales.

Además de su función electrónica, el aluminio presenta una alta conductividad eléctrica, lo que minimiza las pérdidas resistivas en los contactos externos, y una conductividad térmica elevada, que facilita la evacuación o absorción de calor en las superficies extremas del dispositivo. Estas propiedades hacen del aluminio un material adecuado para definir los terminales eléctricos y térmicos de la celda unitaria, donde se desea una transferencia eficiente de corriente y calor hacia el entorno.

El paladio se emplea como metal intermedio entre las ramas semiconductoras tipo  $N$  y tipo  $P$ . La elección de este metal responde principalmente a su función de trabajo relativamente alta, situada en el rango de  $\Phi_{\text{Pd}} \approx 5,2\text{--}5,6$  eV. Esta propiedad permite una alineación energética diferenciada con cada tipo de semiconductor. En la interfaz  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $N$ -Pd, la función de trabajo del paladio favorece la formación de un contacto cercano al régimen óhmico, facilitando el cruce de electrones. En contraste, en la interfaz Pd- $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $P$ , la alineación energética conduce a la formación de una barrera Schottky más pronunciada, que limita el transporte de huecos y genera una región de depleción significativa.

Desde el punto de vista térmico y estructural, el paladio presenta una buena estabilidad bajo gradientes de temperatura y actúa como una barrera de difusión efectiva entre el aluminio y el semiconductor. Esta función es particularmente importante para evitar reacciones químicas

no deseadas o la migración de especies metálicas hacia el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , lo cual podría degradar las propiedades interfaciales y alterar el comportamiento del dispositivo a largo plazo.

La combinación de aluminio como metal externo y paladio como metal intermedio permite diseñar una celda unitaria en la que coexisten interfaces predominantemente óhmicas e interfaces Schottky bien definidas. Esta coexistencia no es accidental, sino que constituye un elemento central del enfoque adoptado en este trabajo. Las interfaces óhmicas facilitan la inyección y extracción eficiente de corriente, mientras que las interfaces Schottky actúan como regiones de control que limitan la corriente y concentran procesos de redistribución energética, tales como la disipación Joule y el intercambio de calor por efecto Peltier.

En el marco del presente estudio, la alineación energética entre el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  y los metales seleccionados se analiza de manera explícita para cada interfaz de la celda unitaria. Esta selección controlada de metales sienta las bases para el estudio detallado de la estructura interfacial, la formación de barreras de potencial y su impacto en el transporte electro-térmico, aspectos que se desarrollan en las secciones siguientes.

### 4.3. Resumen de materiales

#### Semiconductores Tipo N y Tipo P

La elección del material base  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , tanto para la rama tipo N como para la rama tipo P, responde a que este compuesto presenta un equilibrio óptimo entre las propiedades fundamentales que definen la eficiencia termoeléctrica de un dispositivo Peltier. Dichas propiedades están resumidas en la llamada “Regla de Oro” de los materiales termoeléctricos:

1. **Alto coeficiente Seebeck ( $S$ )**  $\rightarrow$  genera la fuerza motriz termoeléctrica.
2. **Alta conductividad eléctrica ( $\sigma$ )**  $\rightarrow$  reduce las pérdidas por calentamiento Joule.
3. **Baja conductividad térmica ( $\kappa$ )**  $\rightarrow$  mantiene un gradiente de temperatura adecuado.

Usar el mismo material base para ambas ramas asegura que dicho equilibrio se conserve en toda la celda unitaria, generando un comportamiento térmico y eléctrico simétrico y facilitando el análisis de las interfaces. Además, el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  presenta una alta estabilidad estructural y excelentes propiedades de transporte electrónico a temperaturas cercanas a la ambiente, lo cual lo convierte en el material estándar para módulos Peltier comerciales y de investigación.

## Aluminio como Metal de Contacto Externo

La selección del **aluminio (Al)** como metal principal en los contactos externos del ánodo y cátodo de la celda unitaria se basa en una combinación de criterios electrónicos, térmicos, mecánicos y de compatibilidad con el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ . Su función de trabajo, conductividad y estabilidad lo convierten en un material altamente adecuado para garantizar un flujo eficiente de corriente y una correcta administración del calor en las superficies externas.

### Propiedades Electrónicas y Formación de Barreras

- **Función de trabajo del Al** ( $\Phi_{\text{Al}} = 4,3 \text{ eV}$ ):
  - Facilita la formación de **contacto Schottky con  $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-N}$**  ( $\chi_{\text{N}} \approx 4,5 \text{ eV}$ ), lo cual es relevante para definir cómo los electrones interactúan con esta interfaz.
  - Permite formar **contacto óhmico con  $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-P}$**  ( $\chi_{\text{P}} + E_{\text{g}} \approx 5,2 \text{ eV}$ ), reduciendo la resistencia de contacto y mejorando el flujo de carga.

### Propiedades de Transporte y Conducción

- **Alta conductividad eléctrica** ( $3,5 \times 10^7 \text{ S/m}$ ):
  - Minimiza las pérdidas óhmicas ( $Q_{\text{Joule}} = I^2 R$ ).
  - Contribuye a una distribución uniforme de corriente en las interfaces externas.
- **Buena conductividad térmica** ( $237 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ ):
  - Favorece la disipación de calor en la cara caliente.
  - Mejora la estabilidad térmica en los puntos de unión.

En conjunto, estas propiedades hacen del aluminio un material equilibrado y rentable para los contactos externos en la celda Peltier.

## Paladio como Metal Intermedio

El **paladio (Pd)** se utiliza como metal intermedio entre los semiconductores tipo N y tipo P debido a su excelente alineación energética con el  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , permitiendo formar contactos adecuados según la naturaleza de cada rama. Su **función de trabajo moderadamente alta** (5.2–5.6 eV) crea un comportamiento diferencial:

- **N–Pd**: contacto predominantemente óhmico.
- **Pd–P**: contacto con características Schottky controladas.

Además, el Pd presenta baja resistividad de contacto, alta estabilidad térmica y actúa como una barrera de difusión frente a metales como el Al. Estas propiedades garantizan interfaces más durables y con menor degradación bajo gradientes térmicos.

Su incorporación entre ambas ramas asegura una transición controlada entre materiales, minimizando reacciones no deseadas y mejorando la integridad estructural de la celda.

#### 4.4. Construcción General de una Celda Peltier Tipo N–P

Una **celda unitaria Peltier** es el elemento fundamental de un módulo termoeléctrico. Su propósito es generar o absorber calor como resultado del paso de corriente eléctrica (efecto Peltier), o bien generar voltaje a partir de un gradiente térmico (efecto Seebeck).

Cada celda está formada por dos ramas semiconductoras:

- una **rama tipo N**, donde los electrones son los portadores mayoritarios;
- y una **rama tipo P**, donde los portadores mayoritarios son los huecos.

Ambas ramas se encuentran **eléctricamente en serie** y **térmicamente en paralelo**, lo que permite aprovechar el transporte simultáneo de cargas y calor en el dispositivo.

#### 4.5. Componentes Fundamentales

1. **Semiconductor tipo N (n-leg)**: Habitualmente  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  dopado con Se u otros donadores. Los electrones participan activamente en el transporte termoeléctrico cuando se aplica una corriente.
2. **Semiconductor tipo P (p-leg)**:  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  dopado con Sb u otros aceptores. Los huecos complementan la conducción en la dirección opuesta a los electrones.
3. **Contactos metálicos**: Ubicados en los extremos superior e inferior de la celda. Los metales seleccionados (Al, Cu, Pd) deben garantizar baja resistencia eléctrica, buena adhesión y compatibilidad térmica. Dependiendo de la alineación de niveles energéticos, estos contactos pueden ser **óhmicos** o **Schottky**.

4. **Sustrato y aislamiento:** El conjunto N-P se monta sobre una placa cerámica ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{AlN}$ ,  $\text{SiO}_2$ ) que provee aislamiento eléctrico y soporte mecánico. Sobre esta cerámica se depositan pistas metálicas que interconectan las diferentes celdas del módulo.

#### 4.6. Conexión Eléctrica y Térmica

La celda está diseñada de forma que:

- El extremo superior de la rama N se conecta al extremo superior de la rama P mediante un metal puente.
- La corriente  $I$  fluye desde la rama P hacia la N por el contacto superior.
- Los extremos inferiores se enlazan con la siguiente celda, formando una conexión en serie.

A nivel térmico, ambas ramas actúan en paralelo, permitiendo que el calor se transporte desde la cara caliente hacia la fría a través de los dos semiconductores.

#### 4.7. Ensamblaje de un Módulo Completo

Un módulo termoelectrico se construye ensamblando múltiples celdas N-P:

- **En serie eléctricamente** para incrementar el voltaje total.
- **En paralelo térmicamente** para aumentar la capacidad de bombeo calorífico.

El módulo se encapsula entre dos placas cerámicas que actúan como superficies caliente y fría del dispositivo.

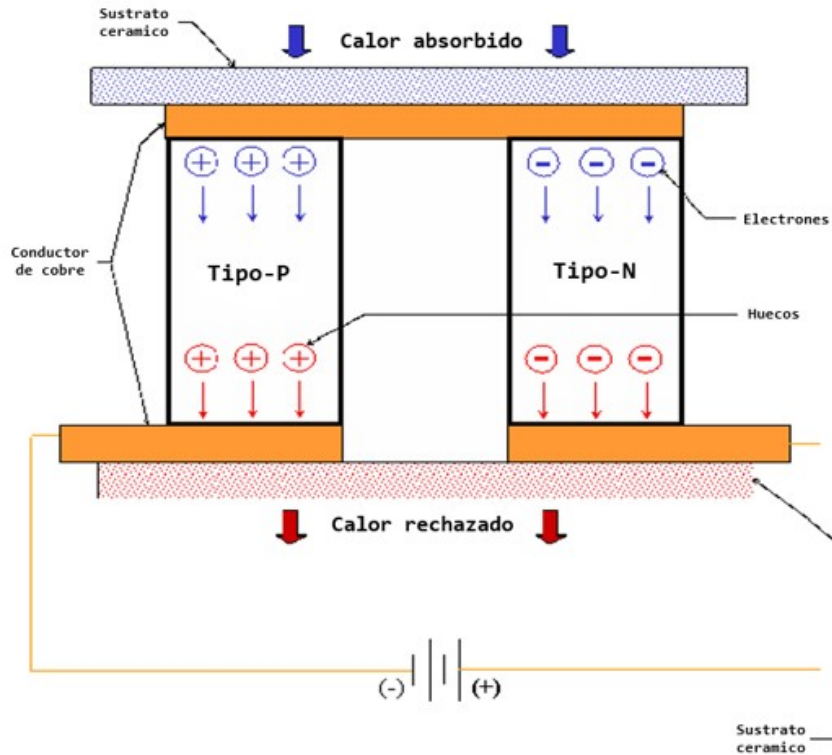


Figura 4.1: Celda unitaria de efecto Peltier

#### 4.8. Estructura física de la celda unitaria

La celda unitaria Peltier constituye el elemento básico a partir del cual se construyen los módulos termoeléctricos y su diseño físico determina de manera directa el comportamiento electro-térmico del dispositivo. En el presente trabajo, la celda unitaria se concibe como una estructura multicapa en la que se alternan materiales metálicos y semiconductores, de modo que se establezcan interfaces bien definidas con propiedades energéticas contrastantes. Esta configuración permite analizar de forma controlada el transporte de corriente y la redistribución local de calor asociada al efecto Peltier y a la disipación Joule.

La estructura física de la celda unitaria considerada se describe mediante la secuencia



donde los contactos de aluminio definen los terminales externos del dispositivo y el paladio actúa como metal intermedio entre las ramas semiconductoras tipo  $N$  y tipo  $P$ . Esta disposición da lugar a cuatro interfaces metal-semiconductor distintas, cada una con características electrónicas y térmicas específicas.

Desde el punto de vista geométrico, la celda unitaria está compuesta por dos columnas semiconductoras de  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , una tipo  $N$  y una tipo  $P$ , conectadas eléctricamente en serie y térmicamente en paralelo. Las dimensiones de las ramas semiconductoras, tales como su longitud y área transversal, se seleccionan de manera que el flujo de corriente sea uniforme y que el transporte de calor pueda describirse mediante un modelo unidimensional a lo largo del eje principal del dispositivo. Esta aproximación resulta adecuada para el análisis del gradiente térmico y de los balances energéticos en régimen estacionario.

Las interfaces que conforman la celda unitaria se identifican de la siguiente manera:

- **Interfaz A:** contacto entre el aluminio externo y el semiconductor  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $N$ .
- **Interfaz B:** contacto entre el semiconductor  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $N$  y el paladio.
- **Interfaz C:** contacto entre el paladio y el semiconductor  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $P$ .
- **Interfaz D:** contacto entre el semiconductor  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $P$  y el aluminio externo.

Estas cuatro interfaces representan las regiones activas donde se producen discontinuidades energéticas, redistribución de portadores y transferencias localizadas de calor.

El sentido de la corriente eléctrica se define desde el terminal de aluminio negativo hacia el terminal de aluminio positivo, atravesando de manera secuencial las interfaces A, B, C y D. En régimen estacionario, la continuidad de la corriente impone que la misma intensidad de corriente circule a través de todas las capas del dispositivo. Esta condición convierte a las interfaces con mayor resistencia efectiva en elementos limitantes del transporte eléctrico global.

Desde el punto de vista térmico, la estructura de la celda unitaria permite que el calor se transporte en paralelo a través de ambas ramas semiconductoras. Sin embargo, el intercambio de energía no es uniforme a lo largo del dispositivo, ya que el efecto Peltier introduce fuentes y sumideros de calor localizados en cada interfaz. Como resultado, el perfil térmico de la celda unitaria se caracteriza por regiones frías y calientes asociadas directamente a la naturaleza de los contactos metal-semiconductor.

La disposición física adoptada facilita además el análisis detallado de cada interfaz como un sistema individual, permitiendo formular balances de energía locales que incluyan los términos de efecto Peltier, disipación Joule y conducción térmica. Esta descomposición interfacial resulta esencial para comprender cómo la estructura global de la celda da lugar al gradiente térmico observado y cómo las propiedades de cada interfaz influyen en el punto de operación del dispositivo.

En el marco del presente trabajo, la estructura física de la celda unitaria no se considera únicamente como un soporte geométrico, sino como un elemento activo que condiciona el transporte electro-térmico. La identificación clara de las capas y de las interfaces permite establecer el vínculo entre la selección de materiales, la alineación energética y los modelos físicos desarrollados en los capítulos posteriores para describir el comportamiento de la celda Peltier.

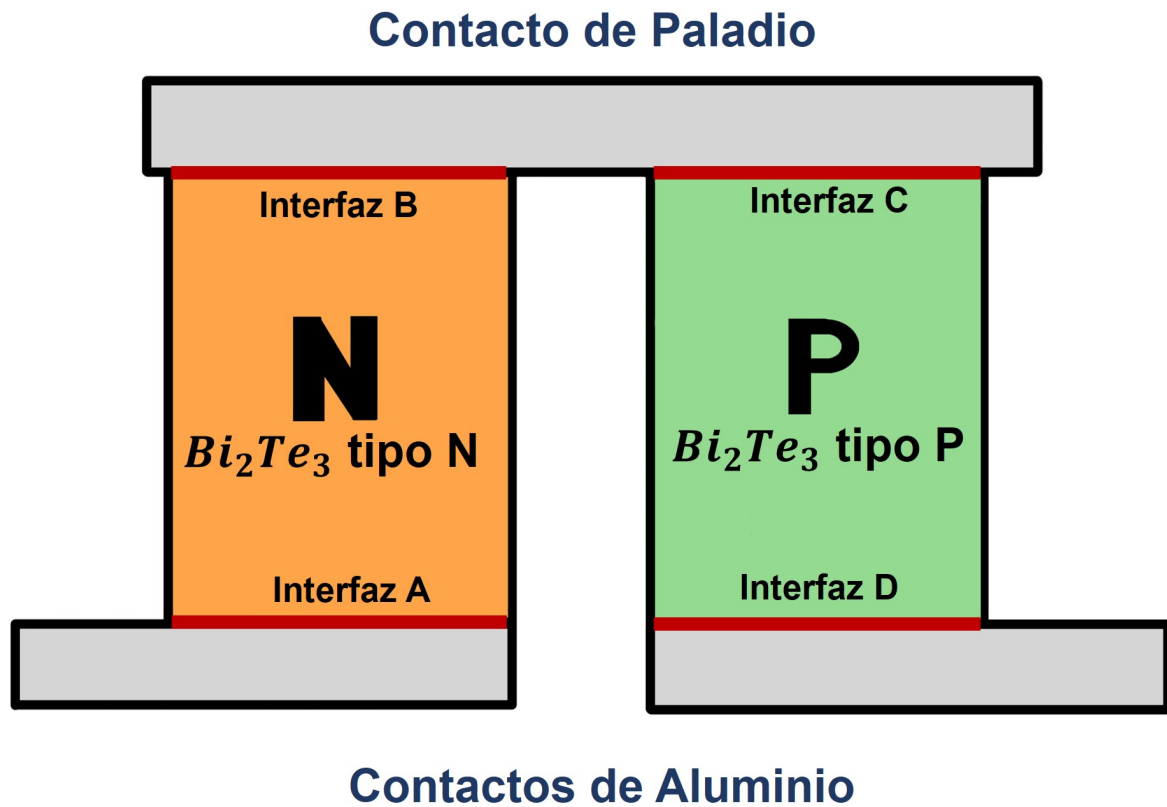


Figura 4.2: Estructura de la celda unitaria de efecto Peltier propuesta.

#### 4.9. Configuración eléctrica y térmica

La configuración eléctrica y térmica de la celda unitaria Peltier determina la forma en que se acoplan el transporte de carga y el transporte de energía dentro del dispositivo. Esta configuración es esencial para comprender tanto la continuidad de la corriente eléctrica como la formación del gradiente térmico característico del sistema. En el presente trabajo, la celda unitaria se diseña de manera que las ramas semiconductoras tipo *N* y tipo *P* se encuentren conectadas eléctricamente en serie y térmicamente en paralelo, configuración que maximiza el aprovechamiento del efecto Peltier.

Desde el punto de vista eléctrico, la conexión en serie implica que la misma corriente eléctrica

atraviesa de manera secuencial todas las capas de la celda unitaria. Al aplicar una diferencia de potencial entre los contactos externos de aluminio, la corriente fluye desde el terminal negativo, atraviesa el semiconductor tipo  $N$ , el metal intermedio de paladio, el semiconductor tipo  $P$  y finalmente alcanza el terminal positivo. En régimen estacionario, la condición de continuidad de la corriente exige que la intensidad de corriente sea idéntica en todas las interfaces y regiones del dispositivo, independientemente de las diferencias locales en conductividad o estructura energética.

Esta condición tiene implicaciones importantes para el análisis del transporte eléctrico, ya que cualquier interfaz que presente una resistencia efectiva elevada limitará la corriente global de la celda. En particular, las interfaces con comportamiento Schottky actúan como cuellos de botella eléctricos, determinando el punto de operación del dispositivo. Por el contrario, las interfaces predominantemente óhmicas facilitan la inyección y extracción de portadores, contribuyendo mínimamente a la caída total de potencial.

Desde el punto de vista térmico, la celda unitaria presenta una configuración en paralelo, en la cual el calor puede transportarse simultáneamente a través de ambas ramas semiconductoras. Esta disposición permite que el flujo térmico se distribuya entre los materiales según sus conductividades térmicas y los gradientes de temperatura locales. A diferencia del transporte eléctrico, el flujo de calor no es necesariamente uniforme a lo largo del dispositivo, ya que está fuertemente influenciado por la generación y absorción local de energía en las interfaces.

El efecto Peltier introduce fuentes y sumideros de calor localizados en cada interfaz metal-semiconductor, cuyo signo y magnitud dependen del coeficiente Peltier efectivo y del sentido de la corriente. Estas contribuciones localizadas rompen la uniformidad del transporte térmico y dan lugar a un perfil de temperatura no lineal a lo largo de la celda. Al mismo tiempo, la disipación Joule asociada al paso de corriente genera calor adicional, particularmente en las regiones con mayor resistencia eléctrica, como las interfaces Schottky.

La conducción térmica actúa como un mecanismo de redistribución de este calor, transfiriendo energía desde las regiones más calientes hacia las más frías. En régimen estacionario, el perfil térmico final resulta del balance entre el calor absorbido o liberado por efecto Peltier, el calor generado por disipación Joule y el flujo de calor por conducción hacia las regiones adyacentes y hacia el entorno. Este equilibrio determina la temperatura de cada interfaz y, en consecuencia, retroalimenta el comportamiento eléctrico del dispositivo a través de la dependencia de los parámetros de transporte con la temperatura.

La configuración eléctrica en serie y térmica en paralelo permite, por tanto, desacoplar parcialmente el análisis de la corriente y del flujo de calor, sin perder la coherencia física del sistema. Mientras que la corriente queda determinada por las propiedades eléctricas globales y por las interfaces más restrictivas, la distribución de temperatura se obtiene a partir de balances energéticos locales en cada interfaz. Esta aproximación resulta especialmente adecuada para el análisis interfacial adoptado en este trabajo.

En el marco del presente estudio, la configuración eléctrica y térmica de la celda unitaria se utiliza como base para formular los balances de energía individuales en las interfaces A, B, C y D. Al considerar explícitamente la conexión en serie de la corriente y la redistribución térmica en paralelo, se establece un modelo coherente que permite describir de manera rigurosa la formación del gradiente térmico y su relación con el transporte electro-térmico en la celda Peltier.

#### 4.10. Identificación de interfaces A, B, C y D

La identificación clara y sistemática de las interfaces metal-semiconductor que conforman la celda unitaria Peltier es un paso esencial para el desarrollo del modelo electro-térmico presentado en este trabajo. Cada interfaz representa una región activa donde se producen discontinuidades energéticas, redistribución de portadores y transferencias localizadas de calor. Por esta razón, las interfaces no se tratan como simples fronteras geométricas, sino como subsistemas con propiedades físicas propias que influyen de manera determinante en el comportamiento global del dispositivo.

De acuerdo con la estructura física definida previamente, la celda unitaria se compone de cuatro interfaces metal-semiconductor claramente diferenciadas, las cuales se denotan como interfaces A, B, C y D, siguiendo el orden secuencial del flujo de corriente eléctrica desde el terminal negativo hasta el terminal positivo. Esta nomenclatura permite establecer un marco de referencia consistente para el análisis eléctrico, térmico y energético del sistema.

La **interfaz A** corresponde al contacto entre el aluminio externo y el semiconductor  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo *N*. En esta interfaz, el aluminio actúa como electrodo de inyección de electrones hacia el semiconductor. La diferencia entre la afinidad electrónica del semiconductor y la función de trabajo del aluminio da lugar a la formación de una barrera Schottky significativa. En esta interfaz se desarrolla una región de depleción caracterizada por un campo eléctrico intenso y una baja concentración de portadores móviles. Como resultado, la interfaz A presenta una resistencia

eléctrica elevada y actúa como un elemento limitante del transporte de corriente. La disipación Joule en esta región es considerable y se manifiesta como una fuente térmica localizada que influye de manera importante en el perfil de temperatura de la celda.

La **interfaz B** se localiza entre el semiconductor  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $N$  y el metal intermedio de paladio. Debido a la alineación energética entre la función de trabajo del paladio y la afinidad electrónica del  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $N$ , este contacto presenta un comportamiento cercano al régimen óhmico. Como consecuencia, la resistencia interfacial es baja y la disipación Joule asociada es relativamente pequeña. Desde el punto de vista termoeléctrico, esta interfaz puede comportarse como una región de absorción de calor bajo el efecto Peltier, contribuyendo al enfriamiento localizado del dispositivo.

La **interfaz C** corresponde al contacto entre el paladio y el semiconductor  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $P$ . En este caso, la alineación energética favorece también la formación de un contacto de tipo Schottky, aunque con características distintas a las de la interfaz A debido a la naturaleza del portador dominante, que en este caso son los huecos. La región de depleción asociada a esta interfaz introduce una resistencia efectiva significativa y da lugar a una disipación Joule apreciable. Desde el punto de vista térmico, la interfaz C se comporta típicamente como una región de liberación de calor, contribuyendo al calentamiento local del dispositivo.

La **interfaz D** se sitúa entre el semiconductor  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $P$  y el aluminio externo que define el terminal positivo del dispositivo. La alineación energética en este contacto favorece un comportamiento predominantemente óhmico, permitiendo la extracción eficiente de huecos hacia el metal. Al igual que en la interfaz A, la resistencia interfacial es baja y la disipación Joule resulta reducida. Bajo el paso de corriente, esta interfaz puede actuar como una región de absorción de calor por efecto Peltier, constituyendo una segunda zona fría en la celda unitaria.

La identificación de las interfaces A, B, C y D permite descomponer el comportamiento global de la celda unitaria en contribuciones locales bien definidas. En régimen estacionario, la continuidad de la corriente impone que la misma intensidad de corriente atraviese todas las interfaces, mientras que el balance energético local determina si cada interfaz actúa como fuente o sumidero de calor. Esta descomposición interfacial resulta clave para el análisis desarrollado en los capítulos posteriores, donde se estudia en detalle la formación de contactos óhmicos y Schottky, el transporte electrostático en las regiones de depleción y los balances de energía que gobiernan la formación del gradiente térmico en la celda Peltier.

Con esta identificación se completa la descripción de la estructura y configuración de la celda

unitaria. Los conceptos y definiciones establecidos en este capítulo constituyen la base para el desarrollo del Capítulo 5, dedicado al análisis detallado de la formación de contactos óhmicos y Schottky y su impacto en el transporte de corriente y energía.

## Capítulo 5

# Formación de contactos óhmicos y Schottky

### 5.1. Formación de contactos óhmicos y Schottky y regiones de depleción

La formación de contactos óhmicos y Schottky en interfaces metal–semiconductor es un proceso gobernado por la alineación energética entre los niveles electrónicos del metal y del semiconductor, así como por el tipo de portador dominante en este último. En una celda unitaria Peltier, estos contactos no solo determinan la facilidad con la que los portadores pueden atravesar las interfaces, sino que también controlan la redistribución local de energía térmica y la corriente de operación del dispositivo. Por esta razón, el análisis de la naturaleza de cada interfaz constituye un elemento central del modelo electro–térmico desarrollado en este trabajo.

Cuando un metal y un semiconductor se ponen en contacto, los electrones se redistribuyen hasta alcanzar el equilibrio termodinámico, condición en la cual los niveles de Fermi de ambos materiales se igualan. Este proceso implica una transferencia de carga a través de la interfaz y da lugar a un potencial electrostático interno que curva las bandas del semiconductor en la región cercana al contacto. La forma y magnitud de este curvado determinan si el contacto resultante se comporta como óhmico o como Schottky.

En la celda unitaria considerada, cuya estructura es



se identifican cuatro interfaces metal–semiconductor con comportamientos diferenciados, consecuencia directa de la selección de materiales y de la alineación energética entre ellos.

La **interfaz A** (Al–Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> tipo *N*) presenta un comportamiento cercano al régimen óhmico. El aluminio posee una función de trabajo relativamente baja ( $\Phi_{\text{Al}} \approx 4,3$  eV), comparable con la afinidad electrónica del Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> tipo *N*. Esta alineación favorece el cruce de electrones —portadores mayoritarios en el semiconductor tipo *N*— sin la formación de una barrera de potencial significativa. Como resultado, el curvado de bandas es suave, la resistencia interfacial es baja y la disipación Joule asociada resulta mínima. Desde el punto de vista termoeléctrico, esta interfaz permite un intercambio energético dominado por el efecto Peltier y puede actuar como una región de absorción de calor bajo el paso de corriente.

La **interfaz B** (Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> tipo *N*–Pd) corresponde a un contacto Schottky bien definido. El paladio presenta una función de trabajo elevada ( $\Phi_{\text{Pd}} \approx 5,2$ – $5,6$  eV), significativamente mayor que la afinidad electrónica del semiconductor tipo *N*. Esta diferencia energética induce la formación de una barrera Schottky para los electrones, acompañada de una región de depleción extensa y de un campo eléctrico intenso en la interfaz. En consecuencia, esta interfaz introduce una resistencia eléctrica significativa que limita el transporte de corriente y actúa como un cuello de botella eléctrico en la celda unitaria. La disipación Joule asociada a esta región es considerable, lo que convierte a la interfaz B en una fuente térmica localizada.

La **interfaz C** (Pd–Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> tipo *P*) también se comporta como un contacto Schottky, aunque con características propias derivadas del tipo de portador dominante. En el semiconductor tipo *P*, los huecos son los portadores mayoritarios y la alineación energética entre el paladio y el Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> tipo *P* da lugar a una barrera efectiva para el transporte de huecos. Al igual que en la interfaz B, se forma una región de depleción con alta resistencia eléctrica y un campo eléctrico intenso. Esta interfaz contribuye de manera significativa a la disipación Joule y se manifiesta térmicamente como una región de liberación de calor, reforzando el carácter caliente de la zona central de la celda unitaria.

La **interfaz D** (Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> tipo *P*–Al) presenta un comportamiento predominantemente óhmico. En este caso, la función de trabajo del aluminio es menor que la energía característica asociada a la banda de valencia del semiconductor tipo *P*, lo que favorece la inyección y extracción eficiente de huecos sin la formación de una barrera de potencial significativa. El contacto resultante presenta baja resistencia interfacial y una disipación Joule reducida. Desde el punto de vista termoeléctrico, esta interfaz puede actuar como una región de absorción de calor por efecto

Peltier, constituyendo una segunda zona fría en la celda unitaria.

La coexistencia de contactos óhmicos (interfaces B y D) y contactos Schottky (interfaces A y C) no es accidental, sino una consecuencia directa de la selección de materiales y de la estructura física de la celda unitaria. Los contactos óhmicos garantizan una conexión eficiente con los terminales externos, minimizando pérdidas eléctricas y permitiendo un intercambio térmico controlado. Por su parte, los contactos Schottky regulan el flujo de corriente, concentran la disipación Joule y desempeñan un papel dominante en la redistribución local de energía térmica.

En el marco del presente trabajo, esta configuración interfacial se explota como un elemento fundamental del diseño, ya que permite analizar de manera integrada el transporte de carga, la formación de regiones de depleción y los balances energéticos locales. La identificación y justificación física de cada tipo de contacto sientan las bases para el desarrollo del modelo electrostático y del algoritmo auto-consistente que se presentan en los capítulos siguientes, donde se cuantifica el impacto de las barreras Schottky y de los contactos óhmicos en la corriente de operación y en el gradiente térmico de la celda unitaria Peltier.

## 5.2. Clasificación de contactos en la celda unitaria

Una vez analizado el proceso físico de formación de contactos óhmicos y Schottky y justificadas las características de cada interfaz a partir de la selección de materiales y de la estructura de la celda unitaria, resulta conveniente establecer una clasificación explícita de los contactos presentes en el dispositivo. Esta clasificación permite simplificar el análisis posterior del transporte electro-térmico y proporciona un marco de referencia claro para la formulación de los modelos matemáticos y de los balances de energía interfaciales.

La celda unitaria Peltier estudiada presenta una arquitectura en la que coexisten contactos de naturaleza óhmica y contactos de tipo Schottky. Esta coexistencia no responde a una idealización, sino que es consecuencia directa de la alineación energética entre los metales seleccionados y el semiconductor  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  dopado tipo  $N$  y tipo  $P$ . En función de esta alineación, cada interfaz se clasifica según su comportamiento eléctrico dominante y su impacto en el transporte de corriente.

Las interfaces B y D se clasifican como **contactos predominantemente óhmicos**. En estas interfaces, la barrera de potencial para los portadores mayoritarios es despreciable o lo suficientemente baja como para no limitar el transporte de corriente. Como resultado, la relación corriente-voltaje es aproximadamente lineal en el rango de operación considerado y la resistencia

interfacial es pequeña en comparación con la resistencia total del dispositivo. Desde el punto de vista térmico, estas interfaces se caracterizan por una contribución Joule reducida, lo que permite que el intercambio energético esté dominado por el efecto Peltier asociado a la discontinuidad de los coeficientes termoeléctricos entre materiales.

Por otro lado, las interfaces A y C se clasifican como **contactos Schottky**. En estas interfaces, la diferencia significativa entre la función de trabajo del metal y las propiedades electrónicas del semiconductor conduce a la formación de barreras de potencial bien definidas. La presencia de estas barreras da lugar a regiones de depleción extensas, con campos eléctricos intensos y una baja concentración de portadores móviles. En consecuencia, estas interfaces introducen una resistencia eléctrica efectiva elevada y presentan un comportamiento no lineal en la relación corriente–voltaje.

Desde la perspectiva del transporte eléctrico global, la clasificación anterior tiene implicaciones directas. En régimen estacionario, la continuidad de la corriente impone que la misma intensidad de corriente atraviese todas las interfaces de la celda unitaria. Bajo esta condición, las interfaces Schottky, al presentar una resistencia mayor, actúan como elementos limitantes que determinan el valor de la corriente de operación del dispositivo. En contraste, las interfaces óhmicas se adaptan pasivamente al valor de corriente impuesto, sin restringir de manera significativa el flujo de portadores.

La clasificación de los contactos también permite identificar de manera clara las regiones dominantes de generación y absorción de calor dentro de la celda. Las interfaces Schottky, al concentrar una parte importante de la caída de potencial, son responsables de una fracción significativa de la disipación Joule y se comportan como fuentes térmicas localizadas. Por el contrario, las interfaces óhmicas, al presentar bajas pérdidas resistivas, pueden actuar como regiones de absorción de calor por efecto Peltier, contribuyendo a la formación de zonas frías en el dispositivo.

Desde un punto de vista funcional, esta distribución de contactos da lugar a un perfil térmico característico en la celda unitaria, en el cual las regiones frías se asocian principalmente a las interfaces óhmicas externas, mientras que las regiones calientes se concentran en las interfaces Schottky internas. Esta organización espacial del intercambio energético es un rasgo distintivo de la celda unitaria analizada y constituye uno de los aspectos centrales del enfoque interfacial adoptado en este trabajo.

La clasificación de contactos establecida en esta sección proporciona la base conceptual pa-

ra el desarrollo de los modelos electrostáticos y de transporte que se presentan en las secciones siguientes. Al distinguir claramente entre contactos óhmicos y Schottky, es posible aplicar descripciones físicas diferenciadas a cada tipo de interfaz, lo que permite formular un modelo auto-consistente capaz de capturar tanto el comportamiento eléctrico como la redistribución energética en la celda unitaria Peltier.

### 5.3. Impacto de los contactos en la corriente

El transporte de corriente eléctrica en una celda unitaria Peltier no está determinado únicamente por las propiedades del semiconductor en volumen, sino que se encuentra fuertemente condicionado por la naturaleza de los contactos metal–semiconductor que conforman el dispositivo. En particular, la coexistencia de contactos óhmicos y Schottky introduce una jerarquía de resistencias interfaciales que define el valor de la corriente de operación en régimen estacionario. Comprender este impacto resulta esencial para describir de manera realista el comportamiento electro–térmico de la celda unitaria.

En régimen estacionario, la continuidad de la corriente impone que la misma intensidad de corriente atraviese todas las regiones del dispositivo, independientemente de las diferencias locales en conductividad o estructura energética. Bajo esta condición, la corriente global queda determinada por la región que presenta la mayor resistencia efectiva al transporte de portadores. En la celda unitaria analizada, esta resistencia dominante se asocia principalmente a las interfaces Schottky, mientras que las interfaces óhmicas contribuyen de manera marginal a la limitación del flujo de corriente.

En los contactos óhmicos, la ausencia de una barrera de potencial significativa permite que los portadores mayoritarios crucen la interfaz con facilidad. Como resultado, la caída de potencial en estas regiones es pequeña y la relación corriente–voltaje es aproximadamente lineal. Desde el punto de vista del transporte eléctrico, estas interfaces se adaptan al valor de corriente impuesto por el resto del dispositivo, sin imponer restricciones adicionales. Por esta razón, las interfaces óhmicas no determinan el valor de la corriente de operación, sino que facilitan la conexión eficiente entre el semiconductor y los terminales externos.

En contraste, las interfaces Schottky introducen barreras de potencial que deben ser superadas por los portadores para contribuir al transporte de corriente. La presencia de estas barreras da lugar a una región de depleción caracterizada por una baja concentración de portadores mó-

viles y un campo eléctrico intenso. La corriente a través de estas interfaces depende de manera no lineal de la altura de la barrera, de la temperatura y del voltaje aplicado, y suele describirse mediante modelos de emisión termoiónica. Como consecuencia, pequeñas variaciones en los parámetros interfaciales pueden producir cambios significativos en la corriente que atraviesa el dispositivo.

Dado que la celda unitaria contiene dos interfaces Schottky en serie, la corriente global queda determinada por la más restrictiva de ellas o por la combinación efectiva de ambas. En este contexto, las interfaces Schottky actúan como cuellos de botella eléctricos que fijan el punto de operación del dispositivo. Aun cuando las ramas semiconductoras presenten una conductividad elevada y las interfaces óhmicas sean altamente eficientes, la corriente no puede exceder el valor permitido por las barreras Schottky internas.

El impacto de los contactos en la corriente no se limita al ámbito eléctrico, sino que se encuentra estrechamente acoplado al comportamiento térmico del dispositivo. La disipación Joule asociada a la caída de potencial en las interfaces Schottky genera un aumento local de temperatura, lo que a su vez modifica parámetros clave como la movilidad de los portadores y la altura efectiva de la barrera. Este acoplamiento introduce una retroalimentación electro-térmica, en la cual la corriente influye en la temperatura y la temperatura modifica la corriente. En consecuencia, la corriente de operación debe determinarse de manera coherente con el estado térmico del dispositivo.

Desde el punto de vista del diseño, este comportamiento implica que la optimización del desempeño de la celda unitaria no puede basarse únicamente en la mejora de las propiedades del semiconductor en volumen. La ingeniería de contactos adquiere un papel central, ya que la reducción controlada de las barreras Schottky o la modificación de sus características puede incrementar significativamente la corriente disponible y, por ende, la magnitud del efecto Peltier aprovechable. No obstante, una disminución excesiva de la resistencia interfacial puede también alterar la distribución térmica y modificar el balance energético global.

En el marco del presente trabajo, el impacto de los contactos en la corriente se incorpora de manera explícita en el modelo electro-térmico mediante un enfoque auto-consistente. La corriente que atraviesa la celda unitaria se calcula a partir de las propiedades interfaciales de los contactos Schottky y se utiliza posteriormente como entrada para los balances de energía locales. De este modo, la corriente no se impone de manera arbitraria, sino que emerge como un resultado del acoplamiento entre la física interfacial y la redistribución térmica del dispositivo.

Esta visión integrada permite establecer una relación directa entre la naturaleza de los contactos metal–semiconductor, la corriente de operación y la formación del gradiente térmico en la celda unitaria Peltier. Sobre esta base se construyen los modelos cuantitativos desarrollados en los capítulos siguientes, dedicados al análisis electrostático detallado de las interfaces y a la implementación del algoritmo auto-consistente.

## Capítulo 6

# Modelo físico de transporte en las interfaces

### 6.1. Cálculo de la corriente en la interfaz

El cálculo preciso de las densidades de corriente eléctrica generadas en las interfaces metal – semiconductor es fundamental para optimizar el rendimiento de las placas termoeléctricas basadas en el efecto Peltier. Estas corrientes determinan directamente la transferencia de calor a través de los contactos y, por lo tanto, la eficiencia térmica total del dispositivo, especialmente en aplicaciones donde es necesario mantener un gradiente de temperatura ( $\Delta T$ ) constante y eficiente.

Las interfaces metal–semiconductor son regiones críticas dentro de los dispositivos Peltier, ya que en ellas se forman contactos que pueden ser de tipo Schottky u óhmico. Ambos tipos de contacto afectan de manera distinta el flujo de corriente y las pérdidas energéticas. Los contactos Schottky introducen una barrera de potencial que genera pérdidas por resistencia, afectando negativamente el gradiente térmico. En contraste, los contactos óhmicos permiten una transferencia de corriente más eficiente al minimizar la caída de potencial y las pérdidas energéticas asociadas.

El objetivo de este trabajo es analizar de manera cuantitativa la relación entre las densidades de corriente generadas en las interfaces y el gradiente de temperatura producido por el efecto Peltier. Para ello, se presentan las ecuaciones fundamentales que describen los fenómenos de transporte de carga y se implementa un algoritmo iterativo auto-consistente que permite caracterizar las propiedades eléctricas de la interfaz. Finalmente, se discuten las implicaciones

de estos resultados en la mejora de la eficiencia térmica y energética del dispositivo.

## 6.2. Proceso para el Cálculo de la corriente

El proceso auto - consistente para determinar los parámetros de caracterización de una interfaz Schottky comienza con el cálculo de las concentraciones de carga en equilibrio [10, 6]. En un semiconductor tipo  $n$ , la concentración de electrones en equilibrio ( $n_0$ ) es aproximadamente igual a la concentración de dopado ( $N_D$ ), mientras que la concentración de huecos en equilibrio ( $p_0$ ) se obtiene a partir de la concentración intrínseca ( $n_i$ ) mediante la relación:

$$p_0 = \frac{n_i^2}{N_D} \quad (6.1)$$

Esta ecuación representa el equilibrio entre portadores mayoritarios y minoritarios antes de aplicar cualquier perturbación externa. En el contexto del proceso iterativo, sirve como punto de partida para establecer las condiciones iniciales del sistema y definir el nivel de Fermi en equilibrio. Determinar estas concentraciones iniciales es esencial para poder evaluar posteriormente cómo se modifican cuando se aplica una polarización externa.

Posteriormente, se calcula la altura de la barrera Schottky ( $\Phi_B$ ), definida como la diferencia de energía entre el nivel de Fermi del metal ( $E_{FM}$ ) y el nivel de Fermi del semiconductor ( $E_{FS}$ ) [6, 7]. Matemáticamente, la altura de la barrera se expresa como:

$$\Phi_B = \Phi_M - \chi_S \quad (6.2)$$

donde  $\Phi_M$  es la función de trabajo del metal y  $\chi_S$  la afinidad electrónica del semiconductor. Esta relación describe la magnitud de la barrera de potencial que los electrones deben superar para pasar del semiconductor al metal. En el proceso iterativo, este parámetro controla la corriente termoiónica inicial, ya que una barrera más alta implica una menor probabilidad de emisión electrónica. Por tanto,  $\Phi_B$  es uno de los parámetros de entrada más críticos del modelo [9, 8].

Para iniciar el proceso iterativo, se propone un valor inicial para el potencial electrostático  $\psi(x)$ , que describe la distribución del potencial eléctrico en la zona de depleción. Este valor se ajusta iterativamente hasta alcanzar la convergencia, garantizando que se satisfagan las ecuaciones de Poisson y las condiciones de frontera [10, 11]. El potencial  $\psi(x)$  es el vínculo entre el

campo eléctrico y la densidad de carga, y su evolución determina la forma del perfil de energía en la interfaz.

El ancho de la región de depleción ( $W$ ) se calcula mediante:

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s(V_{bi} - V_a)}{qN_D}} \quad (6.3)$$

donde  $\varepsilon_s$  es la permitividad del semiconductor,  $V_{bi}$  el voltaje incorporado o de contacto,  $V_a$  el voltaje aplicado externamente y  $q$  la carga del electrón. Esta ecuación describe cómo la aplicación de una polarización directa o inversa modifica el espesor de la región libre de portadores [6, 10]. En el proceso iterativo,  $W$  delimita el rango espacial donde se resuelve la ecuación de Poisson. A medida que el algoritmo ajusta el potencial, el valor de  $W$  puede variar, alterando la distribución de carga y el campo eléctrico.

El campo eléctrico dentro de la zona de depleción se determina a partir del potencial electrostático y puede expresarse como una función lineal de la posición  $x$ :

$$E(x) = E_{\max} \left(1 - \frac{x}{W}\right) \quad (6.4)$$

donde  $E_{\max}$  es el campo máximo en la interfaz Schottky y se alcanza en  $x = 0$ . Este campo decrece linealmente hasta anularse en el borde de la región de depleción. En el contexto iterativo,  $E(x)$  permite evaluar la fuerza que actúa sobre los portadores y cómo esta influye en la redistribución de las cargas a medida que el sistema busca el equilibrio electrostático [10].

El potencial químico de los electrones ( $\mu(x)$ ) se relaciona con la concentración electrónica local y la densidad efectiva de estados en la banda de conducción ( $N_C$ ) mediante:

$$\mu(x) = k_B T \ln \left(\frac{n(x)}{N_C}\right) \quad (6.5)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura absoluta. Esta expresión cuantifica la energía disponible para los electrones a nivel local y permite determinar cómo la concentración de portadores cambia en respuesta al campo eléctrico [13]. Dentro del proceso iterativo,  $\mu(x)$  es recalculado en cada paso para reflejar las variaciones de  $n(x)$  y mantener la coherencia termodinámica del sistema.

El nivel de Fermi en el semiconductor bajo polarización se obtiene restando el potencial eléctrico local al potencial químico:

$$E_F(x) = \mu(x) - q\psi(x) \quad (6.6)$$

Este valor indica la posición energética promedio de los electrones en función de la posición y se emplea para determinar la distribución espacial de energía en la interfaz. Durante el proceso iterativo, la convergencia de  $E_F(x)$  garantiza que el sistema haya alcanzado un equilibrio electrostático entre el campo interno y las cargas móviles [10].

Las concentraciones de cargas fuera de equilibrio se expresan en función del potencial eléctrico mediante:

$$n(x) = n_0 \exp\left(\frac{q\psi(x)}{k_B T}\right) \quad (6.7)$$

$$p(x) = p_0 \exp\left(-\frac{q\psi(x)}{k_B T}\right) \quad (6.8)$$

Estas ecuaciones muestran la dependencia exponencial de las concentraciones de portadores con el potencial local [6]. Durante el proceso iterativo, se utilizan para recalculer la densidad de carga en cada punto del semiconductor, actualizando el término fuente de la ecuación de Poisson. Así, el algoritmo ajusta la distribución de  $\psi(x)$  hasta que las cargas calculadas satisfagan la neutralidad global.

El proceso iterativo continúa ajustando el potencial de Poisson hasta alcanzar la convergencia. El nuevo valor del potencial se actualiza según:

$$\psi_{n+1}(x) = \psi_n(x) + \Delta\psi(x) \quad (6.9)$$

donde  $\Delta\psi(x)$  representa la diferencia entre los valores actuales y previos del potencial. Esta ecuación constituye el núcleo del método auto-consistente, ya que asegura la compatibilidad entre el potencial, el campo eléctrico y las cargas calculadas [11, 12]. La convergencia se logra cuando  $|\Delta\psi(x)|$  tiende a cero en todo el dominio, lo que indica que las condiciones de equilibrio se cumplen.

Finalmente, la densidad de corriente en la interfaz Schottky ( $J$ ) se calcula considerando el flujo de electrones a través de la barrera, dado por:

$$J = A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\Phi_B}{k_B T}\right) \left[ \exp\left(\frac{qV_a}{k_B T}\right) - 1 \right] \quad (6.10)$$

donde  $A^*$  es la constante de Richardson [9]. Esta expresión representa la corriente termoiónica asociada a los electrones que logran superar la barrera de potencial [6, 8]. En el marco del proceso iterativo,  $J$  es el resultado final de la simulación y su valor depende de los parámetros obtenidos previamente, como la altura de barrera, el potencial eléctrico y la temperatura. Comparar el valor calculado de  $J$  con mediciones experimentales permite ajustar los parámetros del modelo y validar su precisión.

El valor de  $J$  obtenido permite correlacionar las propiedades eléctricas de la interfaz con la eficiencia térmica del dispositivo Peltier [1, 3]. De esta forma, el modelo no solo describe el transporte de carga, sino que también proporciona una herramienta predictiva para optimizar el diseño de materiales y contactos en sistemas termoeléctricos avanzados.

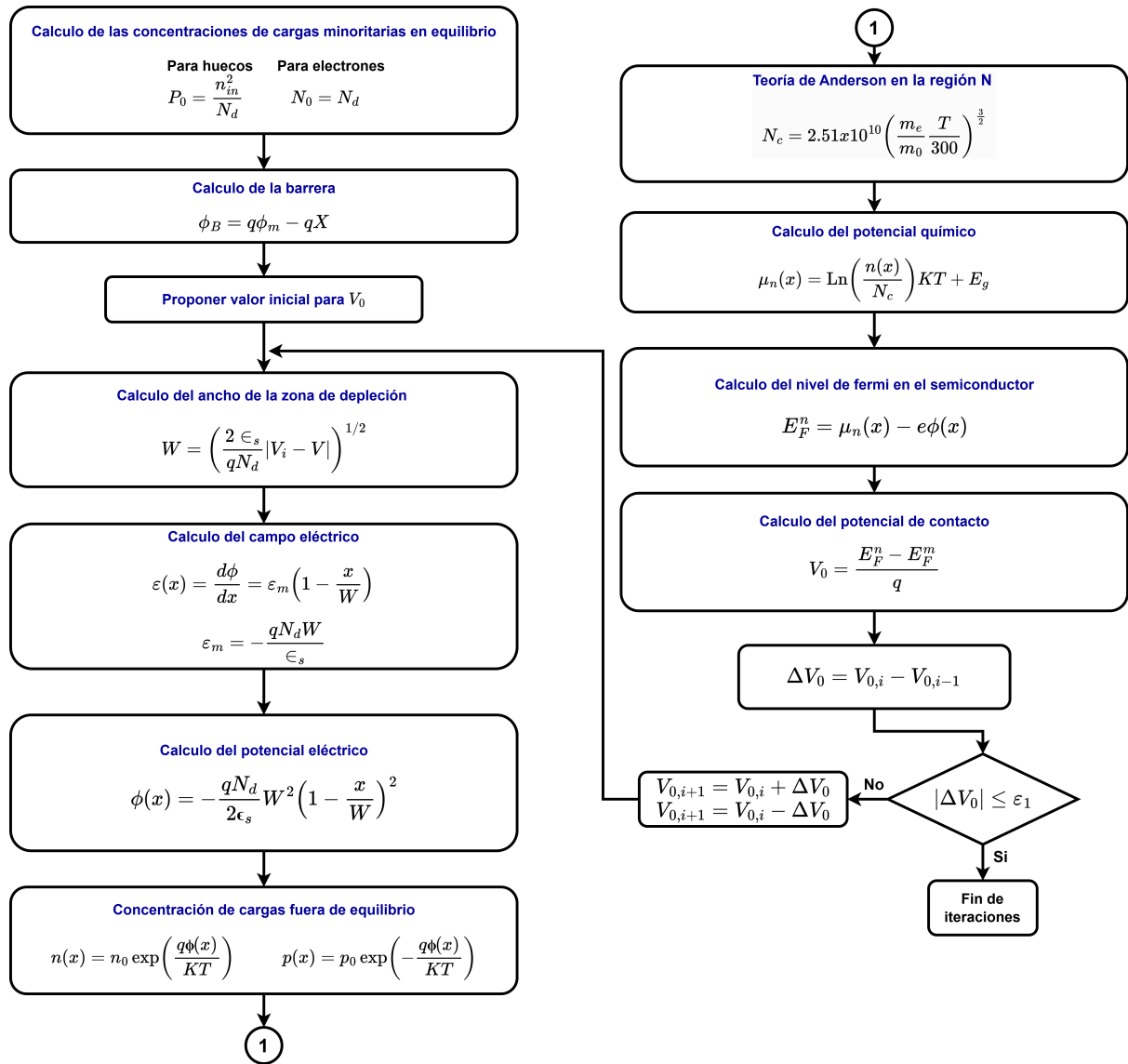


Figura 6.1: Algoritmo auto-consistente para el Cálculo de la densidad de corriente en una interfaz Schottky polarizada en directa.

### 6.3. Descripción secuencial del algoritmo para el Cálculo de la corriente

A continuación se presenta una descripción detallada y continua del procedimiento auto-consistente representado en el diagrama de flujo para determinar la densidad de corriente en una interfaz metal–semiconductor tipo Schottky. El texto mantiene la notación y el estilo del documento principal [10, 11, 12].

#### Cálculo de las concentraciones en equilibrio

El proceso inicia con el establecimiento de las condiciones de equilibrio del semiconductor, que sirven como punto de partida para el lazo iterativo. En un semiconductor tipo  $n$ , la concentración de electrones en equilibrio es aproximadamente igual a la concentración de dopado donador,  $n_0 \approx N_D$ , mientras que la concentración de huecos en equilibrio se determina mediante la relación  $p_0 = n_i^2/N_D$ , donde  $n_i$  es la concentración intrínseca. Estas cantidades definen el nivel de Fermi en equilibrio y permiten evaluar posteriormente cómo se modifican las concentraciones cuando el sistema es perturbado por la aplicación de un campo eléctrico interno [10, 6].

#### Altura de barrera Schottky

Una vez establecidas las concentraciones iniciales, se calcula la altura de la barrera Schottky, que determina la energía que deben superar los electrones para cruzar la interfaz. Esta se define como

$$\Phi_B = \Phi_M - \chi_S, \quad (6.11)$$

donde  $\Phi_M$  es la función de trabajo del metal y  $\chi_S$  la afinidad electrónica del semiconductor. La magnitud de  $\Phi_B$  influye directamente en el transporte de portadores y es un parámetro esencial en el cálculo de la corriente, ya que aparece de forma exponencial en la ecuación de emisión termiónica. Una barrera alta reduce la corriente, mientras que una barrera más baja facilita el paso de electrones, acercando el comportamiento al de un contacto óhmico [6, 7, 9, 8].

#### Propuesta del valor inicial del potencial de contacto $V_0$

En esta etapa se propone un valor inicial para el potencial de contacto  $V_0^{(0)}$ , que permite iniciar el proceso iterativo. Este potencial determina el curvado de bandas o *band bending* inicial en la región de depleción y define las distribuciones iniciales del campo eléctrico, el potencial

electrostático y las concentraciones de carga. A partir de este valor se evalúa la consistencia entre las condiciones de frontera y las propiedades del material [10, 11].

### Ancho de la zona de depleción

Con el potencial de contacto inicial, se calcula el ancho de la región de depleción,  $W$ , que delimita la zona libre de portadores móviles donde predomina el campo eléctrico interno. Este parámetro se determina mediante

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s(V_{bi} - V_a)}{qN_D}}, \quad (6.12)$$

donde  $\varepsilon_s$  es la permitividad del semiconductor,  $V_{bi}$  es el voltaje incorporado o de contacto,  $V_a$  el voltaje aplicado y  $q$  la carga elemental. Esta expresión refleja que un sesgo directo reduce el ancho de depleción, mientras que una polarización inversa lo incrementa. Durante las iteraciones,  $W$  puede ajustarse a medida que el potencial se actualiza, modificando la región activa donde se resuelve la ecuación de Poisson [6, 10].

### Campo eléctrico en la región de depleción

El siguiente paso consiste en determinar el campo eléctrico  $\mathcal{E}(x)$  en la zona de depleción, el cual define la fuerza que actúa sobre los portadores de carga. Su distribución se expresa como

$$\mathcal{E}(x) = \mathcal{E}_{\text{máx}} \left(1 - \frac{x}{W}\right) \quad (6.13)$$

$$\mathcal{E}_{\text{máx}} = -\frac{qN_D W}{\varepsilon_s}. \quad (6.14)$$

Este campo alcanza su valor máximo en la interfaz metal–semiconductor ( $x = 0$ ) y decrece linealmente hasta anularse en el borde de la región de depleción ( $x = W$ ). Su forma determina cómo varía el potencial electrostático y, en consecuencia, las concentraciones locales de portadores [10, 6].

## Potencial electrostático

Integrando el campo eléctrico se obtiene el potencial electrostático  $\varphi(x)$ , que describe el curvado de bandas en la interfaz:

$$\varphi(x) = -\frac{qN_D W^2}{2\varepsilon_s} \left(1 - \frac{x}{W}\right)^2. \quad (6.15)$$

El perfil de  $\varphi(x)$  refleja la energía que deben superar los electrones para moverse dentro de la región de depleción. Este potencial actúa como variable principal en la ecuación de Poisson y se actualiza en cada iteración hasta alcanzar la convergencia entre la distribución de carga y el campo eléctrico [10, 11].

## Concentraciones fuera de equilibrio

A partir del potencial  $\varphi(x)$  calculado, se determinan las concentraciones de portadores fuera de equilibrio, las cuales describen cómo se redistribuyen las cargas bajo el efecto del campo eléctrico. Estas se expresan como:

$$n(x) = n_0 \exp\left(\frac{q\varphi(x)}{k_B T}\right) \quad (6.16)$$

$$p(x) = p_0 \exp\left(-\frac{q\varphi(x)}{k_B T}\right) \quad (6.17)$$

Estas relaciones de tipo Boltzmann muestran que el número de electrones se incrementa en las regiones donde el potencial es más alto, mientras que la concentración de huecos disminuye. Las nuevas distribuciones de carga se utilizan como entrada para recalculer el campo y el potencial, cerrando así el ciclo de la ecuación de Poisson [6, 10].

## Parámetros dependientes de la temperatura

De manera paralela al cálculo electrostático, se evalúan los parámetros materiales que dependen de la temperatura. La densidad efectiva de estados en la banda de conducción se calcula mediante el modelo de Anderson:

$$N_C(T) = N_C(300 \text{ K}) \left(\frac{m_e^*}{m_0}\right)^{3/2} \left(\frac{T}{300 \text{ K}}\right)^{3/2}. \quad (6.18)$$

A partir de esta cantidad se obtiene el potencial químico electrónico local,

$$\mu_n(x) = k_B T \ln \left( \frac{n(x)}{N_C(T)} \right) + E_g, \quad (6.19)$$

y el nivel de Fermi en el semiconductor,

$$E_F^{(n)}(x) = \mu_n(x) - q\varphi(x). \quad (6.20)$$

Estos valores reflejan la energía media de los portadores y permiten determinar cómo la temperatura afecta la alineación de niveles entre el metal y el semiconductor [13, 10].

### Potencial de contacto y corrección iterativa

Una vez calculado el nivel de Fermi en el semiconductor, se determina el potencial de contacto  $V_0$  como

$$V_0 = \frac{E_F^{(n)} - E_F^{(m)}}{q}, \quad (6.21)$$

donde  $E_F^{(m)}$  es el nivel de Fermi del metal. Posteriormente se evalúa la diferencia entre el potencial actual y el anterior,

$$\Delta V_0 = V_{0,i} - V_{0,i-1}, \quad (6.22)$$

y se actualiza el valor según

$$V_{0,i+1} = V_{0,i} \pm \Delta V_0. \quad (6.23)$$

El signo se elige de forma que reduzca el error con respecto a las condiciones de frontera. Este proceso asegura que el sistema evolucione hacia una solución estable en la que el potencial y la carga sean coherentes [11, 12].

### Criterio de convergencia

El proceso iterativo continúa hasta que la variación del potencial de contacto cumple con el criterio de convergencia,

$$|\Delta V_0| \leq \varepsilon_1, \quad (6.24)$$

donde  $\varepsilon_1$  es una tolerancia predefinida. Si el criterio no se cumple, se repite el ciclo desde el cálculo del ancho de depleción, actualizando las distribuciones de campo, potencial y carga hasta alcanzar la estabilidad electrostática [11].

## Cálculo de la densidad de corriente

Una vez alcanzada la convergencia, se calcula la densidad de corriente total que atraviesa la interfaz mediante la ecuación de emisión termoiónica:

$$J = A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\Phi_B}{k_B T}\right) \left[ \exp\left(\frac{qV_a}{k_B T}\right) - 1 \right], \quad (6.25)$$

donde  $A^*$  es la constante de Richardson y  $V_a$  el voltaje aplicado. Esta ecuación combina los efectos de la temperatura, el potencial aplicado y la altura de barrera, proporcionando la corriente neta que circula a través de la interfaz Schottky [9, 6, 8].

## Resultados y aplicación en el dispositivo

El proceso completo entrega los valores de  $V_0$ ,  $W$ ,  $\mathcal{E}(x)$ ,  $\varphi(x)$ ,  $n(x)$ ,  $p(x)$  y  $J$ , que describen completamente el comportamiento de la interfaz. Estos resultados permiten relacionar la respuesta eléctrica con los balances de energía en el dispositivo Peltier, analizar las pérdidas por efecto Joule y evaluar la contribución de cada interfaz a la generación del gradiente térmico [1, 3]. Además, el modelo permite identificar si una interfaz se comporta como Schottky o tiende al régimen óhmico, facilitando la optimización de materiales y condiciones de polarización para mejorar la eficiencia termoeléctrica global del sistema.

## Capítulo 7

# Modelo térmico y balances de energía

### 7.1. Fundamento del balance energético local

El análisis del comportamiento térmico de una celda unitaria Peltier requiere la formulación de balances de energía que permitan describir de manera coherente la redistribución de calor asociada al transporte de corriente eléctrica. En este trabajo, el enfoque adoptado se basa en la construcción de balances energéticos locales en cada una de las interfaces metal–semiconductor, en lugar de emplear un balance térmico global promedio. Esta elección responde a la naturaleza interfacial de los fenómenos termoeléctricos y a la presencia de procesos localizados de generación y absorción de calor.

El principio fundamental que rige el balance energético local es la conservación de la energía. En régimen estacionario, la energía que entra a una región determinada debe ser igual a la energía que sale de ella, más la energía que se genera o se absorbe internamente. Aplicado a una interfaz metal–semiconductor, este principio implica que la suma de todas las contribuciones energéticas asociadas al paso de corriente y al flujo térmico debe anularse, de modo que la temperatura local permanezca constante en el tiempo.

En el contexto de una celda unitaria Peltier, las interfaces representan regiones en las que convergen múltiples mecanismos de intercambio energético. Por un lado, el efecto Peltier introduce una contribución localizada de calor asociada al cruce de portadores entre materiales con diferentes coeficientes termoeléctricos. Por otro lado, la disipación Joule genera calor como consecuencia de la caída de potencial eléctrica en regiones con resistencia efectiva finita, particularmente en contactos Schottky. Adicionalmente, la conducción térmica permite la transferencia de calor entre interfaces adyacentes, actuando como un mecanismo de redistribución energética

a lo largo del dispositivo.

El balance energético local en una interfaz puede expresarse de manera general como la suma de estas contribuciones. En ausencia de acumulación de energía interna, la condición de equilibrio térmico local se establece cuando el calor absorbido o liberado por efecto Peltier, el calor generado por disipación Joule y el flujo de calor por conducción térmica satisfacen una relación de balance. Esta formulación permite identificar si una interfaz actúa como fuente o sumidero de calor y cuantificar su contribución al perfil térmico global del dispositivo.

Una ventaja fundamental del enfoque local es que permite capturar la naturaleza no uniforme de la generación y absorción de calor en la celda unitaria. A diferencia de los modelos macroscópicos que distribuyen la disipación Joule de manera homogénea, el balance interfacial reconoce que la mayor parte de la caída de potencial y del calentamiento resistivo puede concentrarse en regiones específicas, como las interfaces Schottky. De igual manera, el efecto Peltier no se manifiesta de forma continua en el volumen, sino de manera localizada en las interfaces donde cambia la naturaleza del material o del portador dominante.

Desde el punto de vista del acoplamiento electro-térmico, el balance energético local introduce una retroalimentación esencial entre la corriente eléctrica y la temperatura. La corriente determina la magnitud de los términos Peltier y Joule, mientras que la temperatura local influye en los parámetros de transporte eléctrico, como la movilidad de los portadores y la altura efectiva de las barreras Schottky. En consecuencia, el estado térmico de cada interfaz no puede considerarse independiente del transporte eléctrico, sino que ambos deben resolverse de manera coherente.

En el marco del presente trabajo, los balances energéticos locales se formulan de manera explícita para cada una de las interfaces A, B, C y D de la celda unitaria. Esta descomposición permite analizar de forma detallada el papel que desempeña cada interfaz en la formación del gradiente térmico y en la determinación del punto de operación del dispositivo. Asimismo, proporciona la base para integrar los modelos de transporte electrostático y de corriente desarrollados en capítulos anteriores con la descripción térmica del sistema.

La formulación del balance energético local constituye, por tanto, el punto de partida para el análisis térmico de la celda unitaria Peltier. En las secciones siguientes se desarrollan de manera específica las contribuciones asociadas al efecto Peltier, a la disipación Joule y a la conducción térmica, y se aplican estos conceptos a cada interfaz con el fin de describir cuantitativamente la redistribución de energía en el dispositivo.

## 7.2. Efecto Peltier en interfaces metal–semiconductor

El efecto Peltier constituye uno de los mecanismos fundamentales de intercambio energético en una celda unitaria Peltier y se manifiesta de manera localizada en las interfaces metal–semiconductor cuando una corriente eléctrica atraviesa la unión entre materiales con propiedades termoeléctricas distintas. A diferencia de otros mecanismos de transferencia de calor, el efecto Peltier no depende de un gradiente térmico previo, sino que está directamente ligado al flujo de portadores de carga y a la discontinuidad del potencial termoeléctrico entre los materiales en contacto.

Desde un punto de vista macroscópico, el calor asociado al efecto Peltier en una interfaz puede expresarse como

$$Q_{\text{Peltier}} = \Pi I,$$

donde  $\Pi$  es el coeficiente Peltier efectivo de la interfaz e  $I$  es la corriente eléctrica que la atraviesa. El signo de esta contribución determina si la interfaz actúa como fuente o como sumidero de calor, dependiendo del sentido de la corriente y de la diferencia entre los coeficientes termoeléctricos de los materiales involucrados.

En interfaces metal–semiconductor, el coeficiente Peltier efectivo no es una propiedad intrínseca de un solo material, sino que surge de la diferencia entre los coeficientes Peltier del metal y del semiconductor. Esta diferencia refleja el cambio en la energía transportada por los portadores al cruzar la interfaz. Cuando un portador pasa de un material con mayor energía termoeléctrica promedio a otro con menor energía, el exceso de energía se libera en forma de calor; de manera análoga, si el portador requiere energía adicional para adaptarse al nuevo entorno electrónico, dicha energía se extrae del retículo cristalino, produciendo enfriamiento local.

Desde una perspectiva microscópica, el efecto Peltier puede interpretarse como el resultado del ajuste de la energía libre de los portadores al cruzar una discontinuidad material. En una interfaz metal–semiconductor, los portadores deben acomodarse a una nueva estructura de bandas y a un nuevo potencial químico. Este proceso implica un intercambio de energía con la red cristalina en forma de emisión o absorción de fonones. La magnitud de este intercambio depende del tipo de portador dominante, de la alineación energética de la interfaz y de la temperatura local.

En contactos óhmicos, donde no existe una barrera de potencial significativa, el efecto Peltier se manifiesta de manera directa y constituye la principal contribución energética asociada al paso

de corriente. En estas interfaces, la disipación Joule es mínima y el balance energético local está dominado por el término Peltier. Como resultado, los contactos óhmicos pueden actuar como regiones de enfriamiento o calentamiento localizado, dependiendo del sentido de la corriente y del signo del coeficiente Peltier efectivo.

En contraste, en contactos Schottky el efecto Peltier coexiste con otros mecanismos energéticos relevantes. La presencia de una barrera de potencial y de una región de depleción introduce una resistencia eléctrica efectiva elevada, lo que da lugar a una disipación Joule significativa. En estas interfaces, el efecto Peltier sigue contribuyendo al intercambio de energía, pero su impacto relativo puede verse atenuado o reforzado por el calentamiento resistivo. No obstante, el término Peltier continúa siendo esencial para describir el signo del intercambio energético y la dirección del flujo de calor en la interfaz.

En la celda unitaria analizada, el efecto Peltier se manifiesta en las cuatro interfaces metal–semiconductor, aunque con magnitudes y signos distintos. En las interfaces óhmicas externas, el efecto Peltier tiende a producir absorción de calor, contribuyendo a la formación de regiones frías. Por el contrario, en las interfaces Schottky internas, el efecto Peltier suele contribuir a la liberación de calor, reforzando el carácter caliente de la región central del dispositivo. Esta distribución interfacial del efecto Peltier es un elemento clave en la formación del perfil térmico característico de la celda unitaria.

En el marco del presente trabajo, el efecto Peltier se incorpora explícitamente en los balances energéticos locales formulados para cada interfaz. Al expresarlo como un término proporcional a la corriente eléctrica, se establece un vínculo directo entre el transporte de carga y la redistribución térmica. Esta formulación permite integrar de manera coherente el efecto Peltier con la disipación Joule y la conducción térmica, proporcionando una descripción completa del intercambio energético en la celda unitaria Peltier.

### **7.3. Fundamento y Análisis de las Ecuaciones de Balance de Energía**

El comportamiento térmico y eléctrico de una celda unitaria Peltier se determina a partir del intercambio de energía que ocurre en cada una de sus interfaces. Estas regiones son zonas activas donde los portadores de carga atraviesan discontinuidades energéticas entre materiales con propiedades distintas. El balance de energía en las interfaces permite cuantificar de forma

rigurosa cómo se redistribuye el calor debido al efecto Peltier, a la disipación Joule y a la conducción térmica. La formulación de estas ecuaciones parte del principio de conservación de la energía aplicado localmente, lo que exige que el flujo neto de energía que entra y sale de la interfaz sea nulo en estado estacionario.

## 7.4. Origen de las Ecuaciones de Balance

Cada interfaz metal–semiconductor constituye una frontera entre materiales cuyos niveles de energía, funciones de trabajo, coeficientes termoeléctricos y conductividades térmicas difieren sustancialmente. Cuando un portador atraviesa dicha frontera, su energía libre cambia abruptamente debido al alineamiento de bandas. Tales cambios tienen consecuencias térmicas: se absorbe o se libera calor según cómo evolucione la energía del portador.

El balance energético general empleado para describir este fenómeno es:

$$Q_{\text{neto}} = Q_{\text{Peltier}} + Q_{\text{Joule}} + \sum Q_{\text{conducción}},$$

donde cada término describe un mecanismo físico fundamental:

- $Q_{\text{Peltier}}$ : calor absorbido o liberado cuando los portadores cruzan la discontinuidad en el coeficiente de Peltier entre los materiales.
- $Q_{\text{Joule}}$ : calor generado por la resistencia eléctrica local, incluyendo la zona de depleción en interfaces Schottky.
- $Q_{\text{conducción}}$ : flujo de calor que entra o sale de la región debido al gradiente térmico.

El término  $Q_{\text{neto}} = 0$  en estado estacionario refleja que no hay acumulación interna de energía: toda entrada de energía debe compensarse con una salida.

## 7.5. Análisis Físico de los Términos

A continuación se interpreta cada término desde el punto de vista físico, enfatizando cómo surgen y cómo afectan la transferencia de calor en la interfaz.

### 1. Término Peltier

$$Q_{\text{Peltier}} = (\Pi_{\text{metal}} - \Pi_{\text{semiconductor}})I$$

Se origina porque los portadores atraviesan una discontinuidad en el potencial químico. La energía libre por portador cambia al cruzar la interfaz, lo que obliga al sistema a absorber o liberar calor para mantener el equilibrio termodinámico. El signo depende del sentido del transporte y de cómo se reacomodan los niveles energéticos entre banda de conducción, valencia y nivel de Fermi del metal.

## 2. Término Joule

$$Q_{\text{Joule}} = I^2 R_{\text{int}}$$

Este calor proviene de la energía disipada por el flujo de corriente a través de una resistencia local. En interfaces Schottky, donde la región de depleción presenta un campo eléctrico intenso y baja concentración de portadores, la resistencia efectiva aumenta drásticamente. Por ello, la disipación Joule se vuelve un componente crítico en las zonas A y C.

## 3. Término de conducción

$$Q_{\text{conducción}} = -kA \frac{\Delta T}{L}$$

Este término representa el flujo de calor entre la interfaz y las regiones vecinas. Depende directamente del gradiente de temperatura local y de la conductividad térmica del material. Su signo e intensidad determinan si la interfaz cede parte del calor generado o si recibe calor de zonas más calientes.

## 7.6. Interpretación Física Integrada de los Fenómenos en las Interfaces

El comportamiento térmico de las interfaces solo puede comprenderse plenamente si se consideran simultáneamente los cambios en la energía libre de los portadores, el campo eléctrico local, el alineamiento de bandas y la interacción con el retículo cristalino. En un metal, los estados disponibles cerca del nivel de Fermi son extremadamente densos, lo que facilita la rápida relajación de portadores. En un semiconductor, la energía de los electrones u hoyos está más asociada a la posición relativa del nivel de Fermi respecto a las bandas de conducción o valencia.

Cuando un portador cruza una interfaz, experimenta un cambio abrupto en su energía libre. Si este cambio requiere que el portador gane energía, dicha energía proviene del retículo cristalino mediante absorción de fonones, produciendo enfriamiento local. Si por el contrario, el portador

pierde energía, esta se entrega al retículo en forma de excitaciones vibracionales, lo que produce calentamiento.

En las interfaces Schottky, el campo eléctrico en la región de depleción aumenta la energía potencial electrostática del portador, alterando aún más su energía total. El proceso iterativo que determina la solución del potencial de Poisson, el ancho de depleción y la densidad de portadores fuera de equilibrio incorpora automáticamente estas variaciones energéticas. La energía absorbida o liberada por los portadores, combinada con la disipación Joule y el flujo por conducción, determina la contribución térmica neta de cada interfaz.

De este análisis surge una imagen clara: las interfaces no solo conectan materiales distintos, sino que actúan como **zonas activas de intercambio y redistribución de energía**, cuyo comportamiento depende fuertemente del tipo de contacto (óhmico o Schottky) y de la naturaleza del portador dominante (electrones o huecos).

## 7.7. Construcción de los Balances para las Interfaces

Las interfaces A, B, C y D son las fronteras donde se acoplan la conducción térmica, el efecto Peltier y la disipación Joule. A continuación se presentan los balances energéticos individuales para cada una de ellas, junto con la interpretación física de los términos involucrados.

### Interfaz A ( $\text{Al}-n\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ )

**Forma general en términos de flujos:**

$$Q_A = Q_{\text{Peltier},A} + Q_{\text{Joule},A} + Q_{\text{con}(A-B)} - Q_{\text{con}(A-D)}. \quad (7.1)$$

**Forma explícita:**

$$Q_A = (\Pi_{\text{Al}} - \Pi_N) I + I^2 R_{c,A} + k_{AB} A_{AB} \frac{T_B - T_A}{L_{AB}} - k_{AD} A_{AD} \frac{T_A - T_D}{L_{AD}}. \quad (7.2)$$

**Interpretación física:** En esta interfaz el efecto Peltier es positivo, indicando absorción de calor. La disipación Joule es pequeña debido a que el contacto Al- $n$  es predominantemente óhmico. El término de conducción  $Q_{\text{con}(A-B)}$  representa calor proveniente de la región B (más caliente), mientras que  $Q_{\text{con}(A-D)}$  describe la pérdida hacia D, que también es una región fría. En conjunto, esta interfaz actúa como una zona de **enfriamiento neto**.

### Interfaz B ( $n\text{-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Pd}$ )

**Balance general:**

$$Q_B = Q_{\text{Peltier},B} + Q_{\text{Joule},B} - Q_{\text{con}(B-A)} + Q_{\text{con}(B-C)}. \quad (7.3)$$

**Forma explícita:**

$$Q_B = (\Pi_N - \Pi_{\text{Pd}}) I + I^2 R_{c,B} - k_{BA} A_{BA} \frac{T_B - T_A}{L_{BA}} + k_{BC} A_{BC} \frac{T_C - T_B}{L_{BC}}. \quad (7.4)$$

**Interpretación física:** Aquí el efecto Peltier es negativo, indicando liberación de calor debido al cambio de material  $N \rightarrow \text{Pd}$ . El término Joule es considerable, ya que la interfaz presenta características Schottky y la región de depleción tiene resistencia elevada. La conducción desde B hacia A es una pérdida térmica, mientras que hacia C es una transferencia hacia una región más fría. Esta interfaz es una **fente térmica dominante**.

### Interfaz C ( $\text{Pd-}p\text{-Bi}_2\text{Te}_3$ )

**Balance general:**

$$Q_C = Q_{\text{Peltier},C} + Q_{\text{Joule},C} - Q_{\text{con}(C-B)} + Q_{\text{con}(C-D)}. \quad (7.5)$$

**Forma explícita:**

$$Q_C = (\Pi_{\text{Pd}} - \Pi_P) I + I^2 R_{c,C} - k_{CB} A_{CB} \frac{T_C - T_B}{L_{CB}} + k_{CD} A_{CD} \frac{T_C - T_D}{L_{CD}}. \quad (7.6)$$

**Interpretación física:** El cambio en portador dominante (electrones  $\rightarrow$  huecos) hace que el efecto Peltier sea nuevamente de calentamiento. La resistencia asociada a la interfaz Schottky produce un incremento de Joule significativo. El calor fluye por conducción tanto hacia B como hacia D, siendo esta una región más fría. La interfaz C se comporta como una **zona de generación térmica**.

## Interfaz D ( $p\text{-Bi}_2\text{Te}_3\text{-Al}$ )

### Balance general:

$$Q_D = Q_{\text{Peltier},D} + Q_{\text{Joule},D} + Q_{\text{con}(D-C)} - Q_{\text{con}(D-A)}. \quad (7.7)$$

### Forma explícita:

$$Q_D = (\Pi_P - \Pi_{Al}) I + I^2 R_{c,D} + k_{DC} A_{DC} \frac{T_C - T_D}{L_{DC}} - k_{DA} A_{DA} \frac{T_D - T_A}{L_{DA}}. \quad (7.8)$$

**Interpretación física:** El efecto Peltier aquí es positivo, lo que indica enfriamiento. La disipación Joule es pequeña debido al carácter óhmico del contacto P-Al. El flujo de calor desde C eleva la energía local, mientras que la pérdida hacia A reduce la temperatura. La interfaz D constituye la segunda **zona fría** del sistema.

## Interpretación Global

De los balances anteriores se concluye que las interfaces A y D actúan como sumideros de calor debido a la combinación de efecto Peltier positivo, baja disipación Joule y pérdidas por conducción hacia zonas más frías. Por el contrario, las interfaces B y C concentran la generación de calor, resultado del efecto Peltier negativo, la intensa disipación Joule asociada a las barreras Schottky y la conducción hacia zonas más frías.

Así, el gradiente térmico global de la celda surge como consecuencia directa de la redistribución de energía en las cuatro interfaces, cuya dinámica está gobernada por la interacción entre transporte eléctrico, discontinuidades energéticas y conducción térmica.

## Capítulo 8

# Algoritmo auto-consistente para el cálculo de la corriente

### 8.1. Cálculo electrostático de la corriente

El cálculo electrostático de la corriente constituye el primer bloque fundamental de la implementación numérica del modelo desarrollado en este trabajo. En esta etapa se determina la corriente eléctrica que atraviesa la celda unitaria Peltier a partir de la física de las interfaces metal-semiconductor, prestando especial atención a los contactos Schottky que actúan como elementos limitantes del transporte de portadores. Este cálculo se realiza de manera coherente con el enfoque auto-consistente descrito en el documento base y proporciona la entrada eléctrica necesaria para el posterior análisis térmico.

El análisis electrostático se centra en la descripción detallada de las interfaces Schottky, donde la presencia de una barrera de potencial y de una región de depleción domina el comportamiento de la corriente. Para cada interfaz Schottky, se considera la alineación de los niveles de Fermi entre el metal y el semiconductor en equilibrio, lo que da lugar a la formación de una barrera Schottky caracterizada por una altura efectiva  $\Phi_B$ . Esta altura depende de la función de trabajo del metal, de la afinidad electrónica del semiconductor y del tipo de dopaje del material.

Como punto de partida del proceso numérico, se propone un valor inicial para el potencial electrostático en la región de depleción. A partir de este valor, se resuelve la ecuación de Poisson en el semiconductor cercano a la interfaz, lo que permite determinar la distribución espacial del potencial eléctrico y del campo eléctrico. La resolución de la ecuación de Poisson se realiza bajo la aproximación de depleción, considerando que la región está prácticamente libre de portadores

móviles y que la carga espacial está dominada por los iones dopantes fijos.

Una vez obtenido el potencial electrostático, se procede al cálculo de las concentraciones de portadores fuera de equilibrio en función de la posición. Estas concentraciones se determinan a partir de las estadísticas de Fermi–Dirac, incorporando el efecto del potencial eléctrico local sobre el potencial químico de los portadores. Este paso es esencial para describir de manera coherente la redistribución de carga inducida por la barrera Schottky y por el voltaje aplicado a la interfaz.

Con la distribución del potencial y de los portadores, se calcula el ancho efectivo de la región de depleción y el campo eléctrico máximo en la interfaz. Estos parámetros determinan la probabilidad de cruce de los portadores a través de la barrera y, en consecuencia, la densidad de corriente asociada al contacto Schottky. En el presente trabajo, la corriente se evalúa empleando un modelo de emisión termiónica, en el cual la densidad de corriente depende exponencialmente de la altura de la barrera y de la temperatura local de la interfaz.

La densidad de corriente calculada para cada interfaz Schottky se utiliza para determinar la corriente total que atraviesa la celda unitaria. Dado que las interfaces Schottky se encuentran conectadas en serie, la corriente de operación debe ser la misma en todas ellas. En el caso de que existan diferencias entre las corrientes calculadas para distintas interfaces, el valor efectivo de la corriente se ajusta de manera auto-consistente, de modo que se satisfaga la condición de continuidad del flujo de portadores en todo el dispositivo.

El proceso descrito se implementa de forma iterativa, ajustando el potencial electrostático inicial hasta que se alcanza la convergencia en la solución de la ecuación de Poisson y en el valor de la corriente. El criterio de convergencia se establece cuando las variaciones relativas de la densidad de corriente entre iteraciones consecutivas son suficientemente pequeñas. Este procedimiento garantiza que la solución electrostática obtenida sea consistente con las condiciones de frontera y con el estado energético del sistema.

El resultado final de esta etapa es la obtención de una corriente eléctrica coherente con la física interfacial de los contactos Schottky y con las condiciones térmicas locales. Esta corriente constituye la salida principal del módulo electrostático y se utiliza posteriormente como entrada para el cálculo de los balances energéticos en las interfaces. De este modo, el cálculo electrostático de la corriente establece el vínculo entre la descripción microscópica de las barreras Schottky y el comportamiento térmico global de la celda unitaria Peltier.

## 8.2. Implementación del balance térmico

Una vez determinada la corriente eléctrica mediante el cálculo electrostático de las interfaces, el siguiente paso en la implementación numérica consiste en la evaluación del comportamiento térmico de la celda unitaria. Esta etapa se basa en la formulación y resolución de balances energéticos locales en cada una de las interfaces metal–semiconductor, con el objetivo de determinar las temperaturas interfaciales coherentes con la corriente de operación calculada.

El modelo térmico adoptado en este trabajo se fundamenta en el principio de conservación de la energía aplicado a regiones interfaciales discretas. En régimen estacionario, se asume que no existe acumulación de energía interna en ninguna interfaz, por lo que la suma de todas las contribuciones energéticas debe anularse. Bajo esta hipótesis “cuasi–estacionaria”, el balance térmico local permite describir de manera explícita la redistribución de calor asociada al paso de corriente y al transporte térmico entre interfaces adyacentes.

Para cada interfaz de la celda unitaria, el balance energético se construye incorporando tres contribuciones principales: el calor intercambiado por efecto Peltier, el calor generado por disipación Joule y el flujo de calor por conducción térmica. El término Peltier se evalúa como una contribución proporcional a la corriente eléctrica y al coeficiente Peltier efectivo de la interfaz, mientras que la disipación Joule se asocia a la caída de potencial eléctrica localizada y a la resistencia efectiva de la región interfacial. La conducción térmica se modela como un flujo de calor entre interfaces vecinas, impulsado por las diferencias de temperatura y gobernado por la conductividad térmica de los materiales.

En la implementación numérica, los balances energéticos se expresan como un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales, en las cuales las temperaturas interfaciales son las incógnitas principales. Las temperaturas de las interfaces externas se pueden fijar mediante condiciones de frontera térmicas, representando el contacto con disipadores “fríos.º ¸ calientes”, mientras que las temperaturas de las interfaces internas se determinan exclusivamente a partir del equilibrio energético local.

El flujo de calor por conducción entre interfaces se calcula suponiendo un transporte unidimensional a lo largo del eje principal de la celda unitaria. Esta aproximación es consistente con la geometría del dispositivo y permite relacionar el flujo térmico con la diferencia de temperaturas entre interfaces adyacentes y con las dimensiones geométricas de las ramas semiconductoras. De este modo, la conducción térmica actúa como un mecanismo de acoplamiento entre los balances

locales, asegurando la continuidad del flujo de calor a lo largo del dispositivo.

El sistema de ecuaciones térmicas se resuelve de manera iterativa utilizando como entrada la corriente eléctrica obtenida en el módulo electrostático. A partir de una estimación inicial de las temperaturas interfaciales, se evalúan los términos Peltier, Joule y de conducción, y se actualizan las temperaturas hasta que se satisface el balance energético en cada interfaz. Este procedimiento se integra de manera natural en el esquema auto-consistente global, permitiendo que el estado térmico del dispositivo evolucione en respuesta a la corriente eléctrica.

Es importante destacar que el modelo térmico no se considera independiente del modelo eléctrico. Las temperaturas interfaciales calculadas en esta etapa influyen directamente en los parámetros eléctricos utilizados en el cálculo de la corriente, como la movilidad de los portadores y la altura efectiva de las barreras Schottky. Por esta razón, la implementación del balance térmico se encuentra estrechamente acoplada al cálculo electrostático y forma parte integral del proceso iterativo descrito en la Sección 9.4.

El resultado de esta etapa es la obtención de un perfil de temperaturas interfaciales coherente con la corriente de operación y con los mecanismos de intercambio energético presentes en la celda unitaria. Este perfil térmico constituye una de las salidas principales del modelo y permite analizar la formación del gradiente de temperatura, así como identificar las interfaces que actúan como fuentes o sumideros de calor. Sobre esta base se construye el análisis de resultados presentado en los capítulos posteriores.

### **8.3. Acoplamiento electro-térmico**

El acoplamiento electro-térmico constituye el núcleo del modelo numérico desarrollado en este trabajo, ya que permite describir de manera coherente la interacción entre el transporte de corriente y la redistribución de energía térmica en la celda unitaria Peltier. A diferencia de enfoques desacoplados, en los que la corriente eléctrica y el perfil térmico se calculan de manera independiente, el presente modelo integra ambos fenómenos mediante un esquema auto-consistente, en el cual cada uno influye directamente sobre el otro.

Desde el punto de vista físico, el acoplamiento surge debido a que la corriente eléctrica determina la magnitud de los términos energéticos asociados al efecto Peltier y a la disipación Joule, mientras que la temperatura local influye en los parámetros eléctricos que gobiernan el transporte de portadores. En particular, la temperatura afecta la movilidad de los portado-

res, la concentración efectiva de carga y la altura de las barreras Schottky en las interfaces metal-semiconductor. Como consecuencia, la corriente que atraviesa la celda unitaria no puede determinarse sin conocer el estado térmico del sistema, ni el perfil térmico puede calcularse sin conocer previamente la corriente de operación.

El esquema de acoplamiento implementado en este trabajo sigue la lógica del proceso auto-consistente descrito en el documento base. En una primera etapa, se propone un valor inicial para la temperatura en cada interfaz de la celda unitaria. Con estos valores de temperatura, se procede al cálculo electrostático de las interfaces Schottky, resolviendo la ecuación de Poisson en la región de depleción y determinando la distribución del potencial eléctrico, el campo eléctrico y las concentraciones de portadores fuera de equilibrio. A partir de estos resultados, se calcula la densidad de corriente en las interfaces Schottky mediante el modelo de emisión termiónica, obteniéndose así una estimación de la corriente que atraviesa la celda.

Una vez determinada la corriente eléctrica, esta se utiliza como entrada para el modelo térmico. En esta etapa, se formulan los balances energéticos locales en cada interfaz, incorporando explícitamente los términos correspondientes al efecto Peltier, a la disipación Joule y a la conducción térmica hacia las interfaces adyacentes. La resolución de estos balances permite actualizar las temperaturas interfaciales y obtener un nuevo perfil térmico para la celda unitaria.

El proceso descrito se repite de manera iterativa hasta alcanzar la convergencia. El criterio de convergencia se establece cuando las variaciones relativas de la corriente eléctrica y de las temperaturas interfaciales entre iteraciones consecutivas se encuentran por debajo de un umbral predefinido. Este criterio garantiza que el estado final del sistema sea consistente tanto desde el punto de vista eléctrico como térmico, y que no exista acumulación neta de energía en ninguna interfaz.

Desde el punto de vista numérico, el acoplamiento electro-térmico se implementa de forma secuencial pero interdependiente. El módulo eléctrico recibe como entrada las temperaturas interfaciales y devuelve como salida la corriente de operación y las caídas de potencial en las interfaces. El módulo térmico, por su parte, utiliza la corriente calculada para evaluar los términos energéticos y actualizar las temperaturas. Esta estructura modular facilita la implementación computacional y permite analizar de manera independiente la influencia de cada submodelo, sin perder la coherencia global del sistema.

Un aspecto importante del acoplamiento electro-térmico es la presencia de retroalimentaciones no lineales. Un incremento en la corriente eléctrica aumenta la disipación Joule en las

interfaces Schottky, elevando la temperatura local. Este aumento de temperatura puede reducir la altura efectiva de la barrera Schottky y modificar la movilidad de los portadores, lo que a su vez incrementa la corriente en la siguiente iteración. De manera análoga, una disminución de la corriente reduce la generación de calor y puede conducir a un enfriamiento local que limite el transporte eléctrico. El esquema auto-consistente permite capturar estas retroalimentaciones de forma natural.

En el marco del presente trabajo, el acoplamiento electro-térmico no se considera un refinamiento opcional, sino un requisito fundamental para describir correctamente el comportamiento de la celda unitaria Peltier. La corriente de operación y el gradiente térmico emergen como soluciones acopladas del sistema, determinadas simultáneamente por la física interfacial y por los balances de energía locales. Este enfoque proporciona una descripción más realista del dispositivo y sienta las bases para el análisis de resultados presentado en el capítulo siguiente.

## 8.4. Descripción del programa de MATLAB

El programa se ejecuta en dos etapas complementarias cuyo objetivo común es determinar una corriente de operación coherente en las interfaces Schottky del dispositivo. En la primera etapa, la corriente se obtiene a partir de las propiedades intrínsecas de transporte y de la solución electrostática local en cada interfaz; en la segunda, la corriente se determina imponiendo un gradiente de temperatura y cerrando el balance de energía en torno a la interfaz. Al final, ambas corrientes se comparan manualmente y el procedimiento se considera satisfactorio cuando los valores coinciden o resultan muy próximos.

La secuencia inicia con la limpieza del entorno (`clear`, `clc`, `close all`) y la fijación de los voltajes externos  $V_{e,n}$  y  $V_{e,p}$  que determinan, respectivamente, la polarización de la interfaz del lado tipo  $n$  (interfaz A) y del lado tipo  $p$  (interfaz C). Se declaran además las temperaturas de referencia  $T_A, T_B, T_C, T_D$  y las temperaturas objetivo en las interfaces  $T_{\text{Int}A}$  y  $T_{\text{Int}C}$ , junto con las constantes físicas ( $q, K, E_0, M_0$ ), la geometría efectiva del dispositivo ( $X, L$ ) y las áreas transversales del semiconductor y del metal ( $A_{\text{trans}}, A_{\text{metal}}$ ). A continuación se cargan los parámetros de material para  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  tipo  $n$  y tipo  $p$ : dopajes  $N_d, N_a$ , difusividades  $D_n, D_p$ , tiempos de vida  $\tau_n, \tau_p$ , concentraciones intrínsecas  $n_i, p_i$ , permitividades relativas  $E_n, E_p$ , brechas  $E_{g,n}, E_{g,p}$ , masas efectivas, movilidades  $\mu_n, \mu_p$ , afinidades electrónicas  $\chi_n, \chi_p$  y resistividades  $\rho_n, \rho_p$ . Con este conjunto se calculan las densidades de equilibrio mayoritaria y minoritaria en cada semi-

conductor, por ejemplo en el lado  $n$  se usa  $p_0 = n_i^2/N_d$  y  $n_0 = N_d$ , y en el lado  $p$  se emplea  $n_0 = p_i^2/N_a$  y  $p_0 = N_a$ , fijando así la línea base de portadores en ausencia de polarización (véase el Listado 8.1).

```

1  %===== Voltaje externo aplicado =====
2  Ve_n=0.438;           %Voltaje externo aplicado en V
3  Ve_p=0.893;           %Voltaje externo aplicado en V
4  %===== Gradiente de temperatura =====
5  T_IntA=240;
6  T_IntC=315;
7  %===== Temperatura de la interfaz =====
8  T_A=300;             % Temperatura interfaz A en Kelvin
9  T_B=300;             % Temperatura interfaz B en Kelvin
10 T_C=300;             % Temperatura interfaz C en Kelvin
11 T_D=300;             % Temperatura interfaz D en Kelvin
12 %== Datos adicionales =====
13 q=1.602e-19;         %C Carga del electron
14 K=8.617e-5;          %constante de Boltzman
15 E0=8.854e-14;        %Permitividad en el vacio
16 M0=9.1039e-31;       %masa del electron en el vacio
17 X=0.003;             %Longitud del semiconductor en m
18 L=2e-4;              % Longitud del contacto en m
19 A_trans=1.5e-6;       % Area transversal de semiconductor en m^2
20 Metal_Atrans=1.5e-6; % Area tranversal del contacto en m^2
21 Ef_alum= 4.26;        %Funcion de trabajo del Aluminio
22 Ef_pal= 5.60;         %Funcion de trabajo del Paladio
23 %== Bi2Te3 N-type =====
24 Nd=1e15;              %m^-3 concentracion de dopado
25 Dn=9e-4;              %m^2/s, Constante de difucividad
26 tn=1e-9;              %s, tiempo de vida
27 ni=2.5e25;            %m^-3, concentracion intrinseca
28 En=50;                %Permitividad
29 Egn=0.15;            %eV, bandgap
30 Men=0.07;             %masa efectiva del electron
31 Mhn=0.08;             %masa efectiva del hueco
32 MMn=350*1e-4;         %Movilidad de las cargas
33 Affi_n=4.5;           %Afinidad

```

```

34 Rn=1e-6;           %Resistividad electrica Bi2Te3-N
35 %===== Bi2Te3 P-type =====
36 Na=1e15;          %m^-3 concentracion de dopado
37 Dp=11.6e-4;       %m^2/s, Constante de difucividad
38 tp=1e-9;          %s, tiempo de vida
39 pi=2.5e25;        %m^-3, concentracion intrinseca
40 Ep=50;            %Permitividad
41 Egp=0.15;         %eV, bandgap
42 Mep=0.07;         %masa efectiva del electron
43 Mhp=0.08;         %masa efectiva del hueco
44 MMp=450*1e-4;     %Movilidad de las cargas
45 Affi_p=4.9;       %Afinidad
46 Rp=1e-5;          %Resistividad electrica Bi2Te3-P

```

Listado 8.1: Constantes físicas y propiedades de los materiales

Con el escenario definido, la primera parte calcula la corriente de interfaz desde la física intrínseca. Primero se construyen las barreras ideales metal–semiconductor a partir de la función de trabajo del metal y la afinidad electrónica del semiconductor: para el lado tipo  $n$  se evalúa  $\Phi_{Bn}$  y para el lado tipo  $p$  se evalúa  $\Phi_{Bp}$ . Luego se resuelve, por iteración, la consistencia electrostática local en cada interfaz. En la interfaz A (lado  $n$  en polarización directa) se parte de un valor inicial  $V_0^{(d)}$  y se calcula el ancho de depleción

$$W_n = \left[ \frac{2 E_n E_0}{q N_d} |V_0^{(d)} - V_{e,n}| \right]^{1/2}, \quad (8.1)$$

el campo eléctrico característico en la región empobrecida

$$E_{m,n} = -\frac{q N_d}{E_n E_0} W_n \quad (8.2)$$

$$E_n(x) = E_{m,n} \left( 1 - \frac{x}{W_n} \right) \quad (8.3)$$

y el potencial eléctrico asociado que el código evalúa en la forma

$$\phi_n(x) = -\frac{q N_d}{2 E_n} W_n^2 \left( 1 - \frac{x}{W_n} \right)^2. \quad (8.4)$$

Con  $\phi_n$  se actualizan las densidades fuera de equilibrio mediante factores de Boltzmann,  $n(x) \approx n_0 \exp\{\phi_n/(KT_A)\}$  y  $p(x) \approx p_0 \exp\{-\phi_n/(KT_A)\}$ , y se estima la densidad efectiva de estados en conducción  $N_c$  para obtener un potencial químico local (nivel cuasi-Fermi)  $\mu_s \simeq KT_A \ln[n(x)/N_c] + E_{g,n}$ . A partir de  $\mu_s$  y del nivel del metal se define un potencial de contacto  $V_i$  y se mide la discrepancia  $|V_i - V_0^{(d)}|$ ; el lazo actualiza  $V_0^{(d)}$  acercándolo a  $V_i$  y repite el cálculo hasta que la diferencia cae por debajo de un umbral. Una vez alcanzada esta consistencia, la densidad de corriente en la interfaz A se evalúa con una ley de Schottky modulada por barrera y campo,

$$J_s = (q N_c \mu_n E_{m,n}) \exp\left(-\frac{\Phi_{Bn}}{KT_A}\right) \left[\exp\left(\frac{V_{e,n}}{KT_A}\right) - 1\right], \quad (8.5)$$

y la corriente total resulta de  $I_{s,A} = |J_s| A_{\text{trans}}$ . La interfaz C (lado  $p$  en polarización inversa) sigue exactamente la misma lógica: se inicializa  $V_0^{(i)}$ , se calcula

$$W_p = \left[ \frac{2 E_p E_0}{q N_a} |V_0^{(i)} - V_{e,p}| \right]^{1/2} \quad (8.6)$$

$$E_{m,p} = -\frac{q N_a}{E_p E_0} W_p \quad (8.7)$$

se construye el potencial  $\phi_p(x)$ , se actualizan las densidades, se obtiene el nivel cuasi-Fermi  $\mu_s$ , se corrige  $V_0^{(i)}$  hacia  $V_i$  y, al converger, se calcula

$$J_{s,p} = (q N_c^{(p)} \mu_p E_{m,p}) \exp\left(-\frac{\Phi_{Bp}}{KT_C}\right) \left[\exp\left(\frac{V_{e,p}}{KT_C}\right) - 1\right] \quad (8.8)$$

$$I_{s,C} = |J_{s,p}| A_{\text{trans}} \quad (8.9)$$

Esta primera parte calcula las corrientes “intrínsecas”  $I_{s,A}$  e  $I_{s,C}$ , determinadas por barrera, depleción y transporte. El Listado 8.2 se ejecuta para cada interfaz schottky polarizada en directa.

```

1 %==== Polarizacion en directa =====
2 VO_d=0.6;           %V, voltaje de poisson propuesto
3 ii=1;
4 DT_temp=100;
5 DVpoisson=100;
6   while DVpoisson >= 0.5
7       %===== Zona de deplecion =====
8       W_n= (((2*En*E0)/(q*Nd))*(abs(VO_d-Ve_n)))^(1/2);

```

```

9      %=====ampo Electrico =====
10     Em_n=-((q*Nd)/(En*EO))*W_n;
11     Ex_n=Em_n*(1-(X/W_n));
12     %====Potencial Electrico =====
13     Phi_xn=-((q*Nd)/(2*(En)))*W_n^2*(1-(X/W_n))^2;
14     %== Concentracion de cargas fuera de euqilibiro =====
15     Nx_n=NO_n*exp(Phi_xn/(K*T_A));
16     Px_n=PO_n*exp(-Phi_xn/(K*T_A));
17     %===== Potencial quimico =====
18     Nc=(2.51*10^19)*(((Men*MO)/MO)*(T_A/T_A))^(3/2);
19     Mnx=(log(Nx_n/Nc)*(K*T_A))+Egn;
20     %==== Nivel de fermi del semiconductor =====
21     Efn=Mnx-Phi_xn;
22     %===== Diferencia del fermi Ec-Efn =====
23     Phi_n=-(K*T_A*log(Nd/Nc));
24     %===== Potencial de contacto =====
25     %Vi= -(q*Nd)/(2*En))+Ve;
26     Vi= abs(Efn-Ef_alum);
27     %=====Corriente en la interfaz =====
28     Js=(q*Nc*(MMn)*Em_n)*(exp(-Phi_bn/(K*T_A)))*(exp(Ve_n/(K*T_A))
        -1);
29     DVpoisson=abs(Vi-V0_d);
30     V0_d=abs(V0_d+(DVpoisson*1e-3));
31     ii=ii+1;
32     end

```

Listado 8.2: Cálculo de la densidad de corriente

En la segunda parte, el programa impone un gradiente de temperatura y cierra el balance de energía en torno a cada interfaz para obtener la corriente necesaria que lo sostenga. Para ello, define los coeficientes de Peltier de cada material  $\Pi_{Al}$ ,  $\Pi_N$ ,  $\Pi_{Pd}$ ,  $\Pi_P$  y construye los coeficientes efectivos por discontinuidad:  $\Pi_A = \Pi_N - \Pi_{Al}$  en la interfaz A y  $\Pi_C = \Pi_P - \Pi_{Pd}$  en la interfaz C. Con las conductividades térmicas  $K_{Al}$ ,  $K_{Pd}$ ,  $K_n$ ,  $K_p$  y las diferencias de temperatura locales  $\Delta T_{AB} = T_B - T_A$ ,  $\Delta T_{DA} = T_D - T_A$ ,  $\Delta T_{BC} = T_C - T_B$ ,  $\Delta T_{CD} = T_C - T_D$ , el programa computa los flujos de conducción de cada lado mediante  $Q_{\text{cond}} = K A \Delta T / \ell$ , además de un intercambio con el entorno modelado con resistencias térmicas efectivas. En la interfaz A se define  $R_{\text{th}} =$

$X/(K_n A_{\text{trans}}) + 1/(h A_{\text{trans}})$  y el flujo asociado a la temperatura objetivo  $Q_A = (T_{\text{IntA}} - T_A)/R_{\text{th}}$ ; con ello, el balance estacionario en la interfaz se reescribe como una ecuación cuadrática en la corriente (véase el Listado 8.3).

$$a I^2 + b I + c = 0, \quad (8.10)$$

$$a = \frac{R_n}{2}, \quad (8.11)$$

$$b = \Pi_A \quad (8.12)$$

$$c = \left( K_n A_{\text{trans}} \frac{\Delta T_{AB}}{L} \right) + \left( K_{\text{Al}} A_{\text{metal}} \frac{\Delta T_{DA}}{L} \right) - Q_A \quad (8.13)$$

cuyo valor físico se obtiene con la solución

$$I_{\text{therm,A}} = \frac{-b \mp \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad (8.14)$$

seleccionando la rama coherente con la dirección de corriente y la convención de signos. Para la interfaz C se procede de forma análoga: se define  $R_{\text{th,p}} = X/(K_p A_{\text{trans}}) + 1/(h_a A_{\text{trans}})$ , se calcula  $Q_C = (T_{\text{IntC}} - T_C)/R_{\text{th,p}}$  y se plantea

$$a_1 I^2 + b_1 I + c_1 = 0, \quad (8.15)$$

$$a_1 = \frac{R_p}{2} \quad (8.16)$$

$$b_1 = \Pi_C \quad (8.17)$$

$$c_1 = - \left( K_p A_{\text{trans}} \frac{\Delta T_{CD}}{X} \right) - \left( K_{\text{Pd}} A_{\text{metal}} \frac{\Delta T_{BC}}{L} \right) - Q_C \quad (8.18)$$

cuya solución proporciona la corriente requerida  $I_{\text{therm,C}}$ .

```

1 % Resistencias electricas
2 R_n = Rn * (X / A_trans); % Resistencia semiconductor N
3 R_p = Rp * (X / A_trans); % Resistencia semiconductor P
4 %===== Temperatura Interfaz A =====
5 PI_A=PI_N-PI_Al;
6 h=100;
7 Rth=(X/(K_n*A_trans))+(1/(h*A_trans));
8 Q_A=(T_IntA-T_A)/Rth;
9 a = R_n / 2;

```

```

10 b = PI_A;
11 c = (K_n*A_trans*(DT_AB/L)) + (K_Al*Metal_Atrans*(DT_DA/L)) - Q_A;
12 % Solucion general para ecuacion cuadratica
13 %Is_A_sol1 = (-b + sqrt(b^2 - 4*a*c)) / (2*a)
14 Is_A_sol2 = (-b - sqrt(b^2 - 4*a*c)) / (2*a);
15 %==Temperatura interfaz C =====
16 PI_C=PI_P-PI_Pd;
17 haa=50000;
18 Rth_p=(X/(K_p*A_trans))+(1/(haa*A_trans));
19 Q_C=(T_IntC-T_C)/Rth_p;
20 a1 = R_p / 2;
21 b1 = PI_C;
22 c1 = - (K_p*A_trans*(DT_CD/X)) - (K_Pd*Metal_Atrans*(DT_BC/L)) - Q_C;
23 Is_C_sol1 = (-b1 + sqrt(b1^2 - 4*a1*c1)) / (2*a1);
24 I = Is_A;
25 A_B = A_trans;
26 % Resistividades
27 rho_cB =1e-7;      % ohm m
28 rho_N  =5e-5;      % [Ohm m]
29 rho_Pd =1e-7;      % [Ohm m]
30 % Longitudes efectivas de acceso
31 Lacc_N  =2e-4;     % [m]
32 Lacc_Pd =1e-7;     % [m]
33 % Resistencia total de la interfaz B
34 R_B = (rho_cB/A_B) + (rho_N*Lacc_N/A_B) + (rho_Pd*Lacc_Pd/A_B);
35 % Caída de voltaje en la interfaz B
36 DeltaV_B = I * R_B;
37 % Caída de voltaje en la interfaz D (P | Al - contacto ohmico)
38 A_D = A_trans;     % Area efectiva de contacto
39 rho_cD = 1e-7;     % [Ohm m^2] resistividad especifica de contacto
40 rho_P  = 5e-5;     % [Ohm m] resistividad Bi2Te3 tipo P
41 rho_Al = 2.7e-8;   % [Ohm m] resistividad del Al
42 Lacc_P = 2e-4;     % [m] longitud de acceso en el semiconductor P
43 Lacc_Al = 2e-4;    % [m] longitud de acceso en el metal Al
44 R_D = (rho_cD/A_D) + (rho_P*Lacc_P/A_D) + (rho_Al*Lacc_Al/A_D);
45 DeltaV_D = I * R_D; % Caída de voltaje en D

```

```
V_total = Ve_n + DeltaV_B + Ve_p + DeltaV_D;
```

Listado 8.3: Cálculo de la corriente en base a gradiente de temp.

Al concluir ambas etapas, el programa dispone, para cada interfaz, de dos estimaciones de corriente: la corriente intrínseca por transporte y depleción ( $I_{s,A}$ ,  $I_{s,C}$ ) y la corriente macroscópica por balance energético ( $I_{\text{therm},A}$ ,  $I_{\text{therm},C}$ ). La comparación entre ambos resultados se realiza manualmente; si  $|I_{s,A} - I_{\text{therm},A}|$  y  $|I_{s,C} - I_{\text{therm},C}|$  son pequeños en la escala del problema, se concluye que el punto de operación es coherente: la misma corriente explica simultáneamente el transporte a través de la barrera y el balance de calor bajo el gradiente impuesto. En caso contrario, la discrepancia sugiere ajustar voltajes, objetivos térmicos o parámetros materiales y repetir el procedimiento hasta lograr la coincidencia.

# Capítulo 9

## Resultados

### 9.1. Resultados

En esta sección se presentan los resultados obtenidos a partir del desarrollo teórico, numérico y computacional realizado para el análisis de la celda unitaria termoeléctrica basada en interfaces metal–semiconductor tipo Schottky. Los resultados que se muestran son consecuencia directa de tres etapas claramente diferenciadas pero estrechamente acopladas: (i) el análisis teórico de la física de las interfaces y de los mecanismos de transporte de carga y calor, (ii) el desarrollo de un algoritmo numérico capaz de resolver de manera iterativa la electrostática local y el transporte electrónico en las interfaces, y (iii) la implementación de dicho algoritmo en un programa de *MATLAB* para la obtención de magnitudes eléctricas y térmicas de interés.

Como resultado del análisis teórico previo, se estableció un modelo que describe el comportamiento de las interfaces Schottky considerando la formación de regiones de depleción, la distribución espacial del potencial eléctrico obtenida a partir de la ecuación de Poisson, la modificación de las concentraciones de portadores fuera del equilibrio y la alineación de los niveles de Fermi en el contacto metal–semiconductor. Este modelo permitió formular una expresión para la densidad de corriente en la interfaz que depende explícitamente de la altura de barrera, de la temperatura local, del campo eléctrico máximo en la región de depleción y de las propiedades intrínsecas del semiconductor, como la movilidad y la densidad efectiva de estados.

Con base en este marco teórico se desarrolló un algoritmo numérico iterativo, cuyo objetivo principal es encontrar una solución auto-consistente para el potencial interno de la interfaz. El algoritmo parte de un valor inicial para la caída de potencial asociada a la solución de Poisson y, en cada iteración, calcula el ancho de la región de depleción, el campo eléctrico máximo,

el potencial eléctrico y las concentraciones de portadores fuera de equilibrio. A partir de estas magnitudes se obtiene el potencial químico del semiconductor y se evalúa la diferencia con el nivel de Fermi del metal. Este procedimiento se repite hasta que la diferencia entre el potencial interno calculado y el potencial de contacto converge dentro de un criterio preestablecido. Una vez alcanzada la convergencia, el algoritmo calcula la densidad de corriente en la interfaz y, mediante el área transversal del dispositivo, la corriente total que circula por dicha interfaz.

La implementación de este algoritmo en *MATLAB* permitió evaluar de manera independiente el comportamiento de la interfaz A (metal-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> tipo *n*) y de la interfaz C (metal-Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> tipo *p*). Para la interfaz A, los resultados muestran la formación de una región de depleción con un ancho del orden de micrómetros, un campo eléctrico máximo característico de la interfaz y una densidad de corriente del orden de 10<sup>4</sup> A/m<sup>2</sup>, lo que conduce a una corriente total cercana a 0,13 A para el área transversal considerada. De manera análoga, en la interfaz C se obtiene un ancho de depleción de magnitud comparable, así como una densidad de corriente y una corriente total prácticamente iguales a las obtenidas en la interfaz A. Este resultado es consistente con la simetría de los dopajes y con las dimensiones físicas del dispositivo analizado.

Además del cálculo de las corrientes en las interfaces Schottky, el programa permitió obtener información relevante sobre el comportamiento macroscópico del dispositivo, en particular la distribución de voltaje a lo largo de las distintas regiones que conforman la celda unitaria. A partir de las resistividades eléctricas de los materiales y de la corriente obtenida en las interfaces, se calcularon las caídas de voltaje asociadas a cada región: interfaz A, región intermedia B, interfaz C y región intermedia D. La suma de estas contribuciones reproduce el voltaje externo total aplicado al dispositivo, lo cual constituye una verificación interna de la coherencia del modelo eléctrico implementado.

Es importante destacar que una parte fundamental de los resultados presentados corresponde no sólo a los valores numéricos obtenidos, sino al propio proceso de desarrollo del modelo y del programa de *MATLAB*. El análisis detallado de la teoría de interfaces Schottky, la formulación de un algoritmo iterativo para la solución auto-consistente del potencial y la integración de este algoritmo con el cálculo de corrientes y caídas de voltaje representan un resultado en sí mismo, ya que proporcionan una herramienta capaz de relacionar propiedades intrínsecas de los materiales con magnitudes eléctricas macroscópicas del dispositivo.

Con el fin de sintetizar los principales resultados numéricos obtenidos mediante el programa, en la Tabla 9.1 se presenta un resumen de los parámetros más relevantes correspondientes a

ambas interfaces y al dispositivo en su conjunto.

Tabla 9.1: Resumen de los principales resultados obtenidos mediante el programa de *MATLAB* para la celda unitaria termoelectrica.

Parámetro	Interfaz A	Interfaz C
Ancho de depleción $W$	4,29 $\mu\text{m}$	4,06 $\mu\text{m}$
Temperatura de interfaz $T_{\text{Int}}$	240 K	315 K
Potencial de Poisson $V_{\text{Poisson}}$	3,77 V	3,87 V
Voltaje de contacto	4,27 V	4,37 V
Densidad de corriente $J_s$	$8,58 \times 10^4$ A/m <sup>2</sup>	$8,60 \times 10^4$ A/m <sup>2</sup>
Corriente total $I_s$	0,1287 A	0,1290 A

De manera complementaria, los resultados globales del dispositivo indican una longitud efectiva de los semiconductores de 3,00 mm, una longitud de contactos metálicos de 0,200 mm y un área transversal de 1,50 mm<sup>2</sup>. Para una corriente de operación del orden de 0,13 A, las caídas de voltaje individuales en las distintas regiones del dispositivo son  $V_a = 0,4380$  V,  $V_b = 0,0094$  V,  $V_c = 0,8930$  V y  $V_d = 0,0094$  V, lo que conduce a un voltaje externo total de 1,3499 V, en concordancia con la suma de las contribuciones locales.

En conjunto, estos resultados demuestran que el modelo desarrollado y su implementación numérica permiten describir de manera coherente el comportamiento eléctrico de las interfaces Schottky y del dispositivo completo, estableciendo una relación directa entre los parámetros físicos de los materiales, la electrostática local en las interfaces y las magnitudes eléctricas macroscópicas observables. Este conjunto de resultados constituye la base para el análisis posterior del acoplamiento electro-térmico y de la optimización del desempeño termoelectrico del dispositivo.

### 9.1.1. Dimensionamiento físico del dispositivo y parámetros de operación

Como complemento a los resultados obtenidos a nivel de interfaz y con el objetivo de proporcionar una visión integral del comportamiento del sistema, en esta subsección se presentan los parámetros geométricos, eléctricos y de dopaje que definen el dimensionamiento físico del dispositivo analizado. Estos parámetros constituyen el marco sobre el cual se calculan tanto las magnitudes intrínsecas de transporte en las interfaces Schottky como las caídas de voltaje macroscópicas y, por lo tanto, son fundamentales para la interpretación de los resultados discutidos en la sección anterior.

El dispositivo estudiado corresponde a una celda unitaria formada por dos regiones semiconductoras de Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> tipo *n* y tipo *p*, conectadas mediante contactos metálicos, cuya geometría se

idealiza como un sistema unidimensional con sección transversal constante. La longitud efectiva de cada región semiconductor se fijó en el orden de milímetros, mientras que las longitudes de los contactos metálicos son significativamente menores, reflejando una configuración típica de dispositivos termoeléctricos reales. Esta elección geométrica permite capturar adecuadamente los efectos resistivos y de caída de potencial a lo largo del dispositivo, sin introducir complejidades geométricas adicionales.

Los dopajes de los semiconductores tipo  $n$  y tipo  $p$  se seleccionaron iguales en magnitud, del orden de  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , con el fin de analizar un caso simétrico que facilite la comparación entre ambas interfaces. Esta condición conduce a regiones de depleción de espesores comparables en las interfaces A y C, como se observó en los resultados presentados previamente, y permite centrar el análisis en el efecto de las barreras Schottky y de las propiedades intrínsecas de cada material.

En cuanto a las condiciones de operación eléctrica, el dispositivo se somete a un voltaje externo total aplicado que resulta de la suma de las caídas de potencial en cada una de las regiones que lo componen. Dicho voltaje externo es consistente con la corriente de operación calculada mediante el modelo de interfaces y con las resistividades eléctricas asignadas a los materiales. La correcta reproducción del voltaje total a partir de las contribuciones locales valida la coherencia entre el dimensionamiento físico del dispositivo y el modelo eléctrico implementado en el programa.

Con el propósito de sintetizar y hacer más ilustrativos estos parámetros, la Tabla 9.2 presenta un resumen del dimensionamiento físico, los dopajes y las condiciones eléctricas externas utilizadas en el análisis. Esta información sirve como referencia directa para los resultados discutidos en la subsección anterior y será empleada posteriormente en el análisis del acoplamiento electro-térmico del dispositivo.

Tabla 9.2: Parámetros de dimensionamiento físico, dopaje y condiciones eléctricas del dispositivo analizado.

<b>Parámetro</b>	<b>Valor</b>
Longitud de regiones semiconductoras ( $X$ )	3,00 mm
Longitud de contactos metálicos ( $L$ )	0,200 mm
Área transversal del semiconductor ( $A_{\text{trans}}$ )	$1,50 \text{ mm}^2$
Área transversal del contacto metálico ( $A_{\text{metal}}$ )	$1,50 \text{ mm}^2$
Dopaje donador ( $N_d$ , $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ tipo $n$ )	$1,00 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
Dopaje aceptor ( $N_a$ , $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ tipo $p$ )	$1,00 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
Voltaje externo aplicado ( $V_{\text{ext}}$ )	1,3499 V
Corriente de operación	$\sim 0,13 \text{ A}$
Gradiente de temperatura	75 K

En conjunto, el dimensionamiento físico del dispositivo, los niveles de dopaje seleccionados y el voltaje externo aplicado definen un régimen de operación coherente con los resultados obtenidos para las interfaces Schottky. Estos parámetros no sólo condicionan las magnitudes eléctricas macroscópicas, como las caídas de voltaje y la corriente total, sino que también influyen directamente en la formación de las regiones de depleción, en los campos eléctricos locales y en los mecanismos de transporte de carga analizados en la primera parte de esta sección de resultados. Esta conexión directa entre geometría, dopaje y respuesta eléctrica constituye un elemento central para el análisis posterior del desempeño termoeléctrico del dispositivo.

## Capítulo 10

# Conclusión

En el presente trabajo se realizó un análisis detallado del comportamiento eléctrico de las interfaces metal–semiconductor en una celda termoeléctrica de efecto Peltier, con el objetivo de comprender su influencia directa sobre la transferencia de calor y la generación de un gradiente de temperatura eficiente y estable. A lo largo del desarrollo teórico y numérico se demostró que las interfaces no pueden considerarse elementos pasivos del dispositivo, sino que desempeñan un papel determinante en el desempeño termoeléctrico global.

Mediante la formulación de un modelo auto–consistente que acopla la ecuación de Poisson, la estadística de portadores y los mecanismos de transporte eléctrico, fue posible describir de manera precisa la redistribución espacial del potencial eléctrico, el campo eléctrico y las concentraciones de carga en las regiones de contacto metal–semiconductor. Este enfoque permitió superar las limitaciones de los modelos simplificados comúnmente utilizados en la literatura, los cuales asumen contactos ideales y densidades de corriente uniformes.

Los resultados obtenidos evidencian que la presencia de contactos Schottky introduce barreras de potencial que modifican significativamente la densidad de corriente eléctrica en las interfaces, generando pérdidas energéticas adicionales asociadas a efectos resistivos. Dichas pérdidas impactan de forma directa en la transferencia de calor vinculada al efecto Peltier, reduciendo la eficiencia del dispositivo y afectando la estabilidad del gradiente de temperatura. En contraste, el uso de contactos óhmicos favorece una transferencia de corriente más uniforme, minimizando las pérdidas energéticas y mejorando el desempeño termoeléctrico.

Asimismo, se demostró que parámetros físicos como la altura de la barrera Schottky, el nivel de dopaje del semiconductor y el voltaje externo aplicado influyen de manera crítica en el comportamiento eléctrico de las interfaces. La correcta selección y optimización de estos parámetros

permite reducir las pérdidas resistivas y mejorar la eficiencia en la conversión termoeléctrica, lo cual resulta fundamental para el diseño de dispositivos Peltier de alto desempeño.

En conjunto, los resultados obtenidos validan la hipótesis planteada al inicio de este trabajo, al confirmar que un tratamiento auto-consistente de las interfaces metal-semiconductor es indispensable para describir adecuadamente las corrientes eléctricas y su impacto sobre el comportamiento térmico del dispositivo. El modelo desarrollado constituye una herramienta robusta para el análisis y la optimización de celdas termoeléctricas, aportando una base sólida para futuros estudios orientados al diseño de sistemas de refrigeración y generación termoeléctrica más eficientes.

Finalmente, este trabajo sienta las bases para investigaciones posteriores que integren de forma explícita el acoplamiento electro-térmico completo, así como la inclusión de efectos adicionales como la variación espacial de propiedades materiales y la respuesta transitoria del dispositivo. De esta manera, se contribuye al entendimiento profundo del papel que juegan las interfaces metal-semiconductor en la eficiencia y confiabilidad de dispositivos termoeléctricos de efecto Peltier.

# Bibliografía

- [1] D. M. Rowe, *CRC Handbook of Thermoelectrics*. CRC Press, Boca Raton, FL, USA, 1995.
- [2] G. J. Snyder and E. S. Toberer, “Complex thermoelectric materials,” *Nature Materials*, vol. 7, pp. 105–114, 2008.
- [3] H. J. Goldsmid, *Introduction to Thermoelectricity*. Springer, Berlin, Germany, 2010.
- [4] A. F. Ioffe, *Semiconductor Thermoelements and Thermoelectric Cooling*. Infosearch Ltd., London, UK, 1957.
- [5] G. D. Mahan, “Figure of merit for thermoelectrics,” *Journal of Applied Physics*, vol. 65, no. 4, pp. 1578–1583, 1997.
- [6] S. M. Sze and K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, 3rd ed. Wiley, Hoboken, NJ, USA, 2007.
- [7] E. H. Rhoderick and R. H. Williams, *Metal–Semiconductor Contacts*, 2nd ed. Oxford University Press, Oxford, UK, 1988.
- [8] R. T. Tung, “The physics and chemistry of the Schottky barrier height,” *Applied Physics Reviews*, vol. 1, no. 1, 2014.
- [9] C. R. Crowell and S. M. Sze, “Current transport in metal–semiconductor barriers,” *Solid-State Electronics*, vol. 9, pp. 1035–1048, 1966.
- [10] D. A. Neamen, *Semiconductor Physics and Devices*, 4th ed. McGraw-Hill, New York, NY, USA, 2012.
- [11] M. Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport*, 2nd ed. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.

- [12] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1995.
- [13] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston, New York, NY, USA, 1976.
- [14] F. Giazotto *et al.*, “Opportunities for mesoscopies in thermometry and refrigeration,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 78, pp. 217–274, 2006.
- [15] A. Majumdar, “Thermoelectricity in semiconductor nanostructures,” *Science*, vol. 303, pp. 777–778, 2004.