

# Prototipo de un dispositivo termoeléctrico para la conversión de energía térmica con aplicación en la industria 4.0 del estado de Chihuahua

Prototype of a thermoelectric device for thermal energy conversion with application in the Industry 4.0 sector of the state of Chihuahua

Oscar A. López-Galán<sup>a</sup>, John Nogan<sup>b</sup>, Alejandra Ramírez<sup>c</sup>, Francisco Sáenz Soto<sup>a</sup>, Diana Patricia Armenta Calzadillas<sup>d</sup>, Marielle Herrera-Padilla<sup>a</sup>, José Mireles García, Jr.<sup>e</sup>, Roberto Carlos Ambrosio Lazaro<sup>f</sup>, Martin Heilmaier<sup>g</sup>, Mauricio Terrones<sup>d,h</sup>, Manuel Ramos<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> Departamento de Física y Matemáticas, Instituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Ciudad Juárez, Chihuahua, C. P. 32310, México.

<sup>b</sup> Center for Integrated Nanotechnologies, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM 87110, USA.

<sup>c</sup> Helmholtz Zentrum Berlin (HZB) für Materialien und Energie, EMIL-Department Interface Design, Berlin, Germany.

<sup>d</sup> Departamento de Ciencias Químico-Biológicas, Instituto de Ciencias Biomédicas, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Ciudad Juárez, Chihuahua, C. P. 32310, México.

<sup>e</sup> Departamento de Ingeniería Eléctrica y Computación, Instituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Ciudad Juárez, Chihuahua, C. P. 32310, México

<sup>f</sup> Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de Ciencias de la Electrónica, Puebla, Puebla, C. P. 72570, México

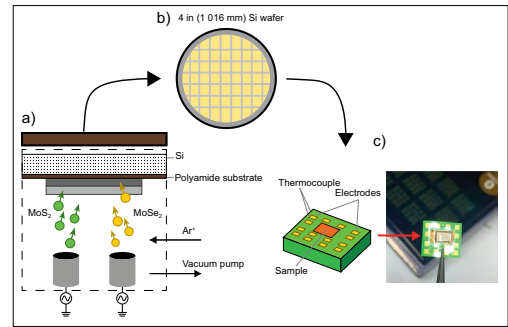
<sup>g</sup> Institute for Applied Materials and Materials Science (IAM-WK), Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe, 76131, Germany.

<sup>h</sup> Department of Physics, Penn State & Materials Science and Engineering University, University Park, Pennsylvania 16802, United States

\*Autor de correspondencia. Correo: manuel.ramos@uacj.mx

## Resumen

La demanda de tecnologías eficientes para recolección de energía, particularmente en generadores termoeléctricos y sistemas de recuperación de calor residual, subraya la necesidad de materiales termoeléctricos avanzados con un rendimiento excepcional. En este estudio, presentamos el notable comportamiento termoeléctrico de las heterouniones de tipo  $n$  MoS<sub>2</sub>/MoSe<sub>2</sub> sintetizadas mediante un proceso escalable de pulverización catódica por radiofrecuencia [1-3]. Estas heteroestructuras exhiben un coeficiente de Seebeck experimental notablemente alto de 1185 mV K<sup>-1</sup> dentro del rango de temperatura de 290-320K. Esta significativa respuesta se origina a partir de portadores activados térmicamente, caracterizados por una energía de activación notablemente baja de 41.6 meV. Además, las heterojunciones demuestran valores de figura de mérito (ZT) termoeléctricos cercanos a  $\sim 1.0$ , lo que destaca su potencial para la conversión eficiente de energía. Para comprender mejor estos resultados experimentales, se emplearon cálculos de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), determinando que sí existe un efecto termoeléctrico a como ha sido previamente reportado [4], sobre comportamiento termoeléctrico anisotrópico proporcionando estrategias de optimización en la fabricación de dispositivos [5].

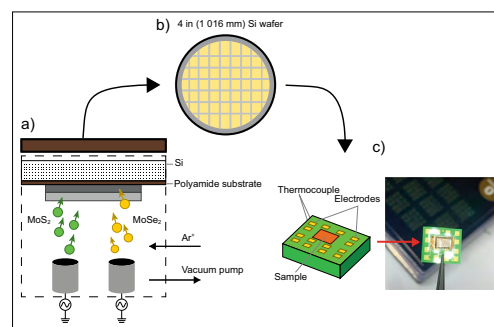


**Palabras clave:** termoeléctricos; materiales; coeficiente Seebeck; MoS<sub>2</sub>; dispositivo.

## Abstract

The demand for efficient energy harvesting technologies, particularly in thermoelectric generators and waste heat recovery systems, underscores the need for advanced thermoelectric materials with exceptional performance. In this study, we present the remarkable thermoelectric behavior of MoS<sub>2</sub>/

MoSe<sub>2</sub> *n*-type heterojunctions synthesized via a scalable radiofrequency sputtering process [1-3]. These heterostructures exhibit a remarkably high experimental Seebeck coefficient of 1.185 mV K<sup>-1</sup> within the temperature range of 290–320 K. This significant response originates from thermally activated carriers, characterized by a remarkably low activation energy of 41.6 meV. Furthermore, the heterojunctions demonstrate thermoelectric figure of merit (ZT) values close to ~1.0, highlighting their potential for efficient energy conversion. To better understand these experimental results, Density Functional Theory (DFT) calculations were used, determining that there is a thermoelectric effect as previously reported on anisotropic thermoelectric behavior [4], providing optimization strategies in device manufacturing [5].



**Keywords:** thermoelectric; material; Seebeck coefficient; MoS<sub>2</sub>; device.

## Referencias

- [1] M. Ramos *et al.*, “Study of indium tin oxide—MoS<sub>2</sub> interface by atom probe tomography”, *MRS Communications*, vol. 9, pp. 1261-1266, 2019, doi: [10.1557/mrc.2019.150](https://doi.org/10.1557/mrc.2019.150).
- [2] M. Ramos *et al.*, “Mechanical properties of RF-sputtering MoS<sub>2</sub> thin films”, *Surf. Topogr. Metrol. Prop.*, vol. 5, n.º 2, p. 025003, 2017, doi: [10.1088/2051-672X/aa7421](https://doi.org/10.1088/2051-672X/aa7421).
- [3] O. A. López-Galán, I. Perez, J. Nogan y M. Ramos, “Determining the Electronic Structure and Thermoelectric Properties of MoS<sub>2</sub>/MoSe<sub>2</sub> Type-I Heterojunction by DFT and the Landauer Approach”, *Adv. Mater. Interfaces*, vol. 10, n.º 11, p. 2202339, 2023, doi: [10.1002/admi.202202339](https://doi.org/10.1002/admi.202202339).
- [4] O. A. López-Galán *et al.*, “One-step sputtering of MoSSe metastable phase as thin film and predicted thermodynamic stability by computational methods”, *Sci Rep*, vol. 14, n.º 1, p. 7104, 2024, doi: [10.1038/s41598-024-57243-3](https://doi.org/10.1038/s41598-024-57243-3).
- [5] M. Safavi *et al.*, “Thermoelectric properties improvement in Mg<sub>2</sub>Sn thin films by structural modification”, *J. Alloys Compd.*, vol. 797, pp. 1078-1085, ag. 2019, doi: [10.1016/j.jallcom.2019.05.214](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.05.214).

## Entidad responsable del estudio

Universidad Autónoma de Ciudad Juárez.

## Financiamiento

Proyecto financiado a través del Programa PIISO con número de convenio PIISO23-IIT-401-24-05-MARM. The Center for Integrated Nanotechnologies, an Office of Science User Facility operated by the U.S. Department of Energy (DOE) Office of Science. Sandia National Laboratories is a multi-program laboratory managed and operated by Sandia Corporation, a fully owned subsidiary of Lockheed Martin Corporation, for the U.S. Department of Energy’s National Nuclear Security Administration under contract DE-AC04-94AL85000, via users’ proposal “MoSe<sub>2</sub>/MoS<sub>2</sub> heterojunctions for thermoelectric applications” #2023BU0045, with Prof. Ramos Murillo and Dr. López-Galán as principal investigators.

## Conflictos de interés

Los autores de este proyecto de investigación declaran ningún conflicto de intereses.