

## ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ТЕРМОЭЛЕМЕНТА

© О. И. Марков, О. А. Мызникова

Орловский державный университет

Викладено основні результати числового розрахунку термоелемента,  $p$ -вітка якого має основу  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , а  $n$ -вітка — монокристалічний сплав  $\text{Bi}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}$ , в інтервалі температур гарячого спаю 100—300 К з урахуванням температурних залежностей кінетичних коефіцієнтів. Використано нову методику розрахунку. Температурні залежності кінетичних коефіцієнтів напівпровідникових матеріалів апроксимувались многочленами. Розраховано максимальні перепади температури, холодопродуктивність, оптимальні струми і геометрію віток. За значеннями максимального перепаду визначено ефективну добротність. Показано суттєві переваги нашої методики розрахунку термоелектричної добротності, що дозволяє значно уточнити розрахунки термоелектричних приладів космічного призначення.

Успешное практическое применение термоэлектрических охлаждающих микроустройств для охлаждения и стабилизации температуры узлов электронной техники способствует дальнейшему прогрессу в этой области. С расширением космических исследований особое значение приобретают термоэлектрические устройства, работающие на борту орбитальных объектов и спускаемых аппаратов [4, 5]. В условиях Луны и Марса возникает необходимость в низкотемпературном охлаждении (ниже 200 К). При этом все острее становится проблема повышения эффективности работы термоэлектрических охладителей, в значительной степени обусловленная физическими свойствами используемых в охлаждающих устройствах термоэлектрических материалов. Поэтому важнейшим направлением полупроводникового материаловедения остается поиск новых высокоэффективных материалов. Однако не нужно забывать и об уже используемых на практике термоэлектрических материалах, которые можно эксплуатировать с большей эффективностью. В частности, это касается учета температурной зависимости теплофизических свойств термоэлектрических материалов. Чтобы целенаправленно управлять термоэлектрической эффективностью материалов, необходимо иметь достоверные сведения о температурных зависимостях их теплофизических характеристик и возможно более тщательно учесть влияние температурных зависимостей на работу термоэлемента. Развитие вычислительной техники и программного обеспечения в настоящее время позволяет учесть влияние практически любых факторов на работу термоэлемента, т. е. создать реалистичную численную модель термоэлектриче-

ского преобразователя. Данная работа посвящена численному моделированию термоэлемента, где в первую очередь предполагалось учесть влияние температурной зависимости кинетических коэффициентов (термоЭДС, удельной электро- и теплопроводности) на термоэлектрическую эффективность и оптимальные рабочие характеристики термоэлемента. Для большей доказательности необходимости нового подхода расчеты были проведены в широком интервале температур.

Сначала обсудим необходимость нового подхода на примере одной ветви термоэлемента. Параметр термоэлектрической эффективности полупроводникового материала, определяемый выражением

$$Z = \frac{\alpha^2}{\rho\chi}, \quad (1)$$

где  $\alpha$  — термоЭДС,  $\rho$  — удельное сопротивление,  $\chi$  — удельная теплопроводность, позволяет найти максимальный перепад температур при прохождении оптимального тока в адиабатически изолированной ветви:

$$\Delta T = \frac{ZT_0^2}{2} \quad (2)$$

( $T_0$  — температура горячего конца).

Подкупающая простота формул (1) и (2) создает иллюзию их универсальности. Однако, строго говоря, введение параметра термоэлектрической эффективности справедливо лишь в том случае, если кинетические коэффициенты не являются функциями температуры [2]. Так как кинетические коэффициенты реальных полупроводниковых материа-



лов зависят от температуры, то расчет термоэлектрической эффективности полупроводникового вещества осуществляется по формуле (1) в каждой температурной точке с использованием экспериментально определяемых дифференциальной термоЭДС, удельных электро- и теплопроводностей. В результате появляется термоэлектрическая эффективность полупроводникового материала как функция температуры  $Z(T)$ . Обычно таким образом рассчитывают термоэлектрическую эффективность специалисты в области полупроводникового материаловедения [6]. Специалисты по полупроводниковым термоэлектрическим устройствам используют иной способ расчета термоэлектрической эффективности. Термоэлектрическая эффективность ветви термоэлемента получается перемножением значений кинетических коэффициентов, усредненных по рабочему интервалу температур термоэлемента [1]. Усреднение по температуре производится согласно общему выражению

$$\bar{f} = \frac{1}{\Delta T} \int_{T_0}^{T_1} f dT. \quad (3)$$

Не говоря уже о том, что оба способа подсчета параметра термоэлектрической добротности явно не согласуются друг с другом, и тот и другой подходы содержат недостатки. Так, в первом подходе параметр термоэлектрической добротности (обозначим его  $Z_1$ ) дает значение эффективности материала лишь в данной температурной точке и поэтому использовать формулу (2) можно только для оценки перепада температуры. Очевидно, что в этом случае нельзя учесть влияния температурной зависимости кинетических коэффициентов и теплоты Томсона на тепловые процессы термоэлемента. Второй подход, хотя в какой-то мере и учитывает теплоту Томсона, не позволяет точно рассчитывать эффективность материалов в произвольном случае, т.к. величина параметра будет зависеть не только от перепада, но и от хода температуры вдоль ветви. Усреднение по температурному интервалу (3) даст параметр термоэлектрической добротности (обозначим его  $Z_2$ ), зависящий только от перепада температуры, а не от профиля температуры. Поэтому влияние температурной зависимости кинетических коэффициентов не может быть учтено в полной мере. Кроме того, согласно [6] при усреднении по температурному интервалу требуется еще дополнительный учет эффекта Томсона, однако получающееся выражение имеет довольно сложную структуру, затрудняющую ее практическое использование.

В свете сказанного выше единственно последова-

тельным подходом в настоящей ситуации является решение оптимальной граничной задачи с кинетическими коэффициентами, зависящими от температуры:

$$\frac{d}{d\xi} \left( \chi(T) \frac{dT}{d\xi} \right) - \tau(T) y \frac{dT}{d\xi} + y^2 \rho(T) = 0, \quad (4)$$

$$\chi(T) \frac{dT}{d\xi} \Big|_{\xi=0} = \alpha(T) y T \Big|_{\xi=0}, \quad T \Big|_{\xi=1} = T_1. \quad (5)$$

( $\tau$  — коэффициент Томсона). Здесь, наряду с общепринятыми обозначениями, введен параметр  $y = J \cdot l / S$  ( $J$  — ток в ветви,  $l$  и  $S$  — параметры ветви — длина и площадь поперечного сечения соответственно), названный нами приведенным током [3] и имеющий размерность А/м. Приведенное значение оптимального тока является характеристикой ветви термоэлемента, зависящей только от материала и температуры, и численно равно оптимальному току ветви, длина и сечение которой численно равны. При пересчете тока для ветви другой геометрии достаточно умножить приведенный ток на отношение  $S/l$ .

Решение стационарного уравнения теплопроводности с параметрами, зависящими от температуры, как справедливо отмечено в работе [6], содержит большие математические трудности. Целью настоящей работы является преодоление этих трудностей путем численного решения граничной задачи (3), (4). Начнем с расчета температурного поля ветви термоэлемента, работающей в оптимальном режиме максимального перепада температуры, для конкретного термоэлектрически эффективного вещества и вычисления эффективного значения параметра добротности с использованием формулы (2) (обозначим его  $Z_3$ ). В свете сказанного выше нами были выбраны термоэлектрические вещества с наиболее высокой добротностью в области низких температур — монокристаллы сплавов висмут-сурьма с 12 ат. % сурьмы [3]. С погрешностью, не превышающей 3 % в интервале температур 80—300 К, температурные зависимости кинетических коэффициентов в направлении тригональной оси по полученным нами экспериментальным данным на сплавах висмут-сурьма аппроксимировались степенными многочленами. Затем численными методами с помощью стандартных программ решалась граничная задача (3), (4). Одновременно производилась оптимизация температурного перепада по приведенному току. С учетом того, что рассматривался режим максимального перепада температур, производился расчет эффективного значения параметра  $Z_3$  согласно формуле (2).



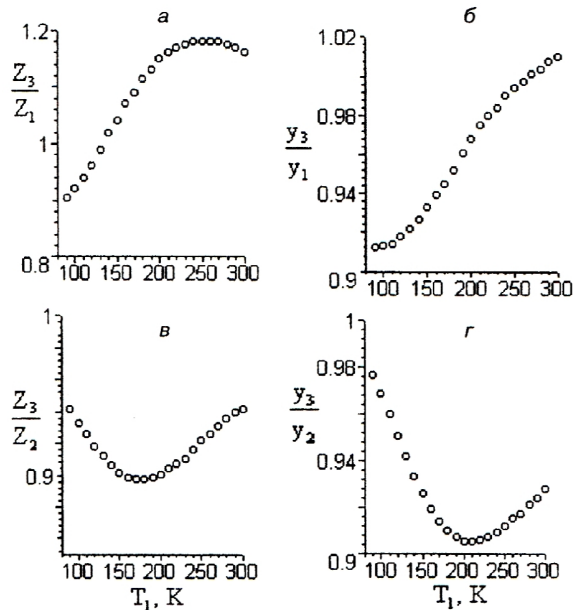


Рис. 1. Зависимость от температуры горячего конца ветви в режиме максимального перепада температуры отношений термоэлектрической эффективности  $Z_3$  (а, в) и приведенного тока  $y_3$  (б, г) к соответствующим величинам, рассчитанным традиционным способом ( $Z_1$ ,  $y_1$ ) и усредненным по температурному интервалу ( $Z_2$ ,  $y_2$ )

Результаты расчета представлены в сравнении с первым методом, т. е. в виде отношения  $Z_3/Z_1$ . На рис. 1, а видно, что термоэлектрическая эффективность, определяемая из решения граничной задачи, может превосходить вычисляемую по формуле (2) максимум на 20 % в интервале температур 220—280 К. При температуре горячего спаия 130 К оба подхода дают совпадающие значения эффективности. В области низких температур происходит отклонение на 10 %, что связано с завышенным значением эффективности, определяемой простым перемножением коэффициентов. На рис. 1, б представлен график температурной зависимости относительного значения оптимальных токов  $y_3/y_1$ . Как видно из графика, отклонение не превышает 10 % при низких температурах, что связано с завышенным значением тока, определяемого первым методом. Произведем теперь относительное сравнение с методом средних значений. Рис. 1, в иллюстрирует температурную зависимость отношения  $Z_3/Z_2$ . Как видно, поведение кривой носит иной характер, и на всем температурном интервале отношение меньше единицы, что говорит о завышенных значениях эффективности, получаемой усреднением по темпе-

52

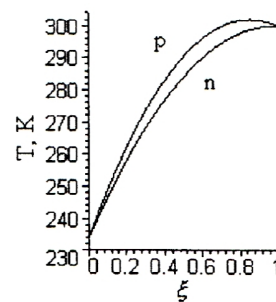


Рис. 2. График распределения температуры в  $n$ - и  $p$ -ветвях термоэлемента по параметру приведенной длины

ратурному интервалу. Наибольшее в этом случае отклонение составляет 10 %. Аналогичная ситуация и для приведенного тока (рис. 1, г). Приведенный ток, подсчитанный с помощью «средних коэффициентов» также имеет завышенные значения.

Таким образом, ни первый, ни второй подходы не гарантируют необходимой точности в расчете термоэлектрической эффективности и оптимальных параметров ветви термоэлемента, поэтому единственно последовательным подходом является решение граничной задачи (4)—(5).

*Численное моделирование целого термоэлемента.* В качестве  $n$ -ветви взят сплав висмут-сурьма с 12 ат. % сурьмы, а из-за отсутствия достояной в низкотемпературной области  $p$ -ветви взят твердый раствор теллурида висмута. Первая попытка численного моделирования термоэлемента предпринята в работе [7]. Граничное условие (4) было частично изменено (6):

$$\chi_i(T) \frac{dT}{d\xi} \Big|_{\xi=0} = \alpha_i(T) y_i T|_{\xi=0} - q_i, \quad (6)$$

где  $q_i = Q_i l_i / S_i$  — приведенная холодопроизводительность ветви, не зависящая от геометрии ветви и имеющая размерность Вт/м. Причем  $q_i > 0$  для активной ветви,  $q_i < 0$  для пассивной ветви,  $q_i = 0$  для ветви в режиме максимального перепада температуры на ветви. Температурные зависимости термоэлектрических параметров (термоЭДС, теплопроводности и электропроводности) аппроксимировались степенными полиномами с погрешностью, не превышающей 3 %. Для каждой из ветвей решалась граничная задача (4)—(6) и проводилась оптимизация по соответствующему приведенному току.

На рис. 2 приведены данные расчета температурного поля ветвей в режиме максимального перепада температуры. Как известно [6], максимум темпе-

ратуры достигается на горячем спае ветвей, работающих в режиме максимального температурного перепада. Как видно из графиков, при комнатной температуре горячего спае активной является  $p$ -ветвь (перегрета область ветви вблизи горячего спае), пассивной  $n$ -ветвь (максимум температуры лежит вне пределов ветви). При температурах горячего спае ниже 218 К активности ветвей меняются на противоположные. Приведенные на рис. 3 кривые зависимости приведенных холодопроизводительностей ветвей термоэлемента, работающего в режиме максимального перепада температуры, дополняют сказанное.

Для практического приложения более важен другой режим работы термоэлемента — режим максимальной холодопроизводительности. Для характеристики холодопроизводительности термоэлемента удобно ввести приведенную холодопроизводительность термоэлемента — величину, не связанную с геометрией ветвей термоэлемента:

$$q = \frac{q_p \frac{S_p}{l_p} + q_n \frac{S_n}{l_n}}{\frac{S_p}{l_p} + \frac{S_n}{l_n}}. \quad (7)$$

Используя условие равенства токов, можно это выражение переписать через приведенные токи:

$$q = \frac{\frac{q_p}{y_p} + \frac{q_n}{y_n}}{\frac{1}{y_p} + \frac{1}{y_n}}. \quad (8)$$

Приведенная холодопроизводительность термоэлемента может служить удобной сравнительной характеристикой различных термоэлементов, вне зависимости от геометрии ветвей термоэлемента.

Для расчета холодопроизводительности термоэлемента с конкретной геометрией ветвей нужно приведенное значение холодопроизводительности умножить на сумму  $S_p/l_p + S_n/l_n$ . Слагаемые в

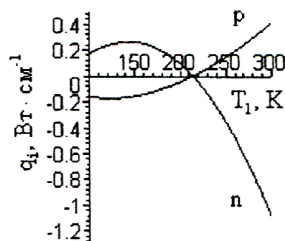


Рис. 3. График зависимости приведенной холодопроизводительности  $p$  — и  $n$ -ветвей термоэлемента от температуры горячего спае

данной сумме не могут быть произвольными в силу равенства токов ветвей, и поэтому между оптимизированными термоэлементами разной геометрии, но работающих в одном и том же температурном интервале, есть некоторое подобие, которое определяется значением приведенной холодопроизводительности.

Проводился численный расчет максимальной приведенной холодопроизводительности термоэлемента, при этом температуры концов термоэлемента и перепад температуры полагались фиксированными. На рис. 4, а представлены зависимости приведенной холодопроизводительности термоэлемента для различных перепадов температур (кривая 1 для перепада 0 К, 2 — для 10 К, 3 — 20 К, 4 — 30 К, 5 — 40 К, 6 — 50 К, 7 — 60 К). Как видно, с понижением температуры возможности термоэлектрического охлаждения быстро убывают, что ограничивает применение термоэлектрических охладителей при низких температурах.

Рис. 4, б иллюстрирует зависимости приведенного тока  $p$ -ветви термоэлемента от температуры (кривая 1 для перепада 0 К, 2 — 10 К, 3 — 20 К, 4 — 30 К, 5 — 40 К, 6 — для максимального

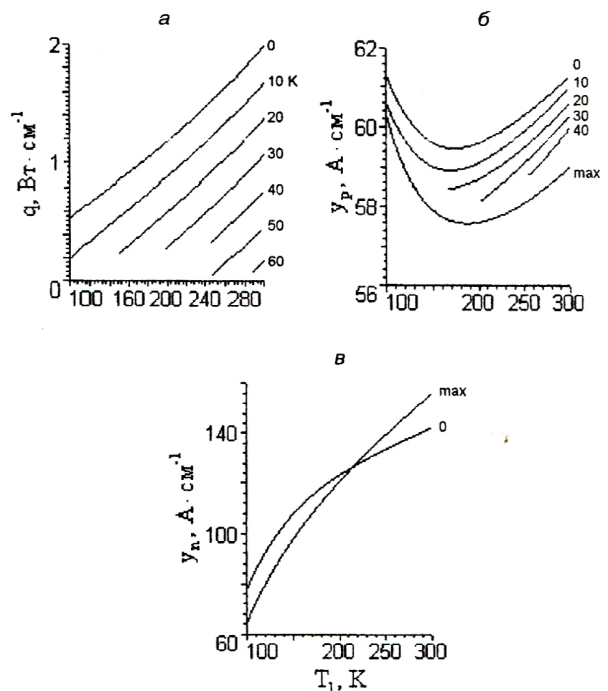


Рис. 4. Графики зависимости от температуры горячего спае ветвей: а — приведенной холодопроизводительности термоэлемента для различных перепадов температур (числа у кривых); б — приведенного тока  $p$ -ветви термоэлемента; в — приведенного тока  $n$ -ветви (для максимального и нулевого перепадов температур)



перепада температуры). На рис. 4, в приведены кривые зависимости приведенного тока  $n$ -ветви (кривая 1 соответствует режиму максимального перепада температуры, кривая 2 — нулевому перепаду температуры). Другим режимам соответствуют промежуточные кривые, не приведенные здесь.

**Выводы.** 1. Параметр термоэлектрической эффективности  $Z$  может быть использован для характеристики термоэлектрических свойств полупроводниковых материалов только в нулевом приближении. Для точного определения термоэлектрической эффективности и оптимальных параметров ветви термоэлемента необходимо найти решение граничной задачи (3)—(4), оптимизированное по току.

2. Численное моделирование ветви термоэлемента позволяет учесть влияние температурной зависимости кинетических коэффициентов и теплоты Томсона на его термоэлектрические характеристики, определить оптимальные параметры ветви термоэлемента, рассчитать температурное и тепловое поля ветви, работающей в нужном режиме.

3. Численное моделирование термоэлемента позволяет с точностью, определяемой только выбранной физической моделью, рассчитать оптимальные параметры термоэлемента, температурные и тепловые поля ветвей термоэлемента и его холодопроизводительность при разных перепадах температуры.

1. Бурштейн А. И. Физические основы расчета полупроводниковых термоэлектрических устройств. — М.: Физматгиз, 1962.—136 с.
2. Иоффе А. Ф. Полупроводниковые термоэлементы. — М.-Л.: АН СССР, 1960.—188 с.
3. Марков О. И. Развитие физических основ оптимизации термоэлектрических охлаждающих устройств // Юбилей-

ный научный сборник в честь 70-летия Орловского государственного университета. — Орел: Изд-во ОГУ, 2001.— С. 99—107.

4. Марков О. И., Мызникова О. А. Расчет термоэлемента с боковым сбросом тепла // Тез. докл. III Междунар. молодежной научно-практической конф. «Человек и космос». — Днепропетровск: НЦАОМУ, 2001.—С. 95.
5. Марков О. И., Мызникова О. А. Холодопроизводительность ступенчатого термоэлемента // Тез. докл. IV Междунар. молодежной научно-практической конф. «Человек и космос». — Днепропетровск: НЦАОМУ, 2002.—С. 358.
6. Термоэлектрические охладители / Под ред. А. Л. Вайнера. — М.: Радио и связь, 1983.—176 с.
7. Wolfe R., Smith E. // Appl. Phys. Lett.—1962.—1, № 1.— P. 5—7.

## THE NUMERICAL SIMULATION OF THE THERMOCOUPLE

O. I. Markov, O. A. Miznikova

In this report there is given an account of the principal results of the numerical solution for thermocouple with  $p$ -branch based on  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  and  $n$ -branch based on single crystal alloy of  $\text{Bi}_{0.88}\text{Sb}_{0.12}$  in the temperature interval of 100—300 K for the hot junction correcting for temperature dependence of kinetic coefficients. Instead of the traditional strategy based on the analysis of energy balance (), there is made the numerical solution of a limit problem:

$$\frac{d}{d\xi} \left( \chi(T) \frac{dT}{d\xi} \right) - \tau(T) y \frac{dT}{d\xi} + y^2 \rho(T) = 0,$$

$$\chi(T) \frac{dT}{d\xi} \Big|_{\xi=0} = \alpha(T) y T \Big|_{\xi=0}, \quad T \Big|_{\xi=1} = T_1.$$

The temperature dependence of kinetic coefficients of semiconductor materials was approximated by polynomials. The maximum temperature difference, cooling productivity, optimum currents and geometry of branches are calculated. The effective figure of merit is founded by the value of the maximum temperature difference. It is showed that there is the substantial difference with the generally accepted methods of the thermoelectric quality calculation.