ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И ПРИБОРЫ

УДК 621.362

Исмаилов Т.А., Сулин А.Б., Челушкина Т.А.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ УСТРОЙСТВАХ С ИМПУЛЬСНЫМ ПИТАНИЕМ

Ismailov T.A., Sulin A.B., Chelushkina T.A.

MATHEMATICAL MODELING OF THERMAL PROCESSES IN THE THERMOELECTRIC SEMICONDUCTOR DEVICES WITH A PULSE POWER

В статье рассмотрена математическая модель режима импульсного питания термоэлектрических устройств, учитывающая электротеплофизические процессы материалов полупроводниковых ветвей и позволяющая повысить эффективность теплопередачи.

Ключевые слова: *термоэлектрическое устройство, математическая модель, импульсное питание, электротеплофизические процессы, длительность, скважность, амплитуда.*

In this paper the mathematical model of the mode switch mode power supply thermoelectric devices, which takes into account the processes elektroteplofizicheskie branches semiconductor materials and allowing to increase the efficiency of heat transfer.

Key words: *thermoelectric devices, mathematical model, pulsed power, elektroteplofizicheskie processes, duration, duty cycle, the amplitude.*

Существующие схемы питания термоэлектрических устройств (ТЭУ) с постоянным или переменным током не в полной мере учитывают процессы, происходящие внутри полупроводниковых ветвей и в металлических спаях. Для того, чтобы заряд обменялся в металлическом спае энергией с кристаллической решеткой, необходимо однократное или многократное столкновение с обменом энергии. Если не учитывать длину свободного пробега заряда до столкновения, то заряд может, выйдя из одной ветви полупроводника без соударений и обмена энергией, пройти через весь спай в другую ветвь полупроводника. Очевидно, что это снижает эффективность работы ТЭУ. Кроме того, напряжение питания также влияет на перемещение зарядов, как в полупроводниковых ветвях, так и в металлических спаях. Изменение напряжения также влияет на паразитные тепловые выделения (Джоулевое тепло) в полупроводниковых ветвях.

Применение импульсного напряжения, у которого амплитуда, длительность и скважность импульсов заданы с учетом электротеплофизических процессов в материалах полупроводниковых ветвей, позволяет оптимизировать теплообмен между спаями и повысить эффективность ТЭУ [1]. Это достигается тем, что в ТЭУ таким образом выбраны геометрические размеры полупроводниковых ветвей и металлических спаев, что учитываются параметры движения зарядов внутри полупроводника и металлических спаях. Такими параметрами являются длина свободного пробега заряда до соударения и энергия, передаваемая при столкновении заряда с кристаллической решеткой. Питание ТЭУ импульсным током с длительностью и скважностью импульсов, пропорциональной параметрам движения зарядов, позволяет оптимизировать режимы работы устройства, получив максимальное охлаждение. Пауза между импульсами должна иметь такой размер, чтобы заряды, попавшие в металлический спай, успели полностью обменяться энергией с кристаллической решеткой. Длительность и амплитуда импульса должны иметь такие параметры, индивидуальные для каждого полупроводникового материала, чтобы заряды в горячих и холодных спаях полностью прошли через полупроводниковые ветви и вновь задержались для обмена энергией в металлических спаях. Оптимизация импульсного питания в зависимости от свойств электротехнических материалов и геометрических размеров ТЭУ позволяет сгруппировать заряды в энергетические пакеты, которые синхронно перемещаются между горячими и холодными спаями, осуществляя дозированный энергетический обмен между материалом батареи и самими зарядами.

На рис. 1 представлена схема ТЭУ и параметров импульсного питания.

Конструкция ТЭУ представляет собой обычную батарею, в которой имеются строгие ограничения на размеры полупроводниковых ветвей. При изменении геометрических размеров, например высоты ветвей h или материалов ТЭУ, необходимо пропорционально изменить длительность $T_д$ и скважность $T_с$, а также амплитуду импульсного питания.

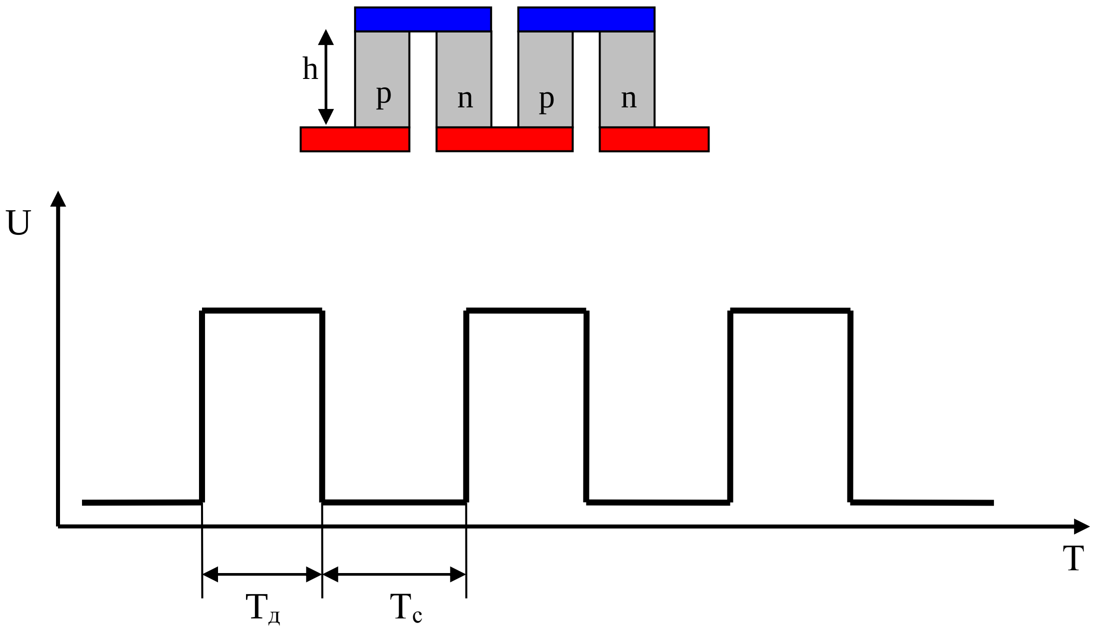

Рисунок 1 - Схема ТЭУ и параметров импульсного питания

Математическая модель отображает связь между длительностью $T_д$ и скважностью $T_с$, а также амплитудой импульсного питания.

В электропроводности твердых тел принимают участие только те валентные электроны, которые образуют ненасыщенные химические связи. Эти электроны называют свободными. В случае, когда концентрация насыщенных химических связей значительно превосходит концентрацию ненасыщенных связей, считают, что перенос заряда по твердому телу осуществляется за счет перемещения дырок. Поскольку движение дырок противоположно движению валентных электронов, то дырки являются носителями положительного заряда.

Перемещение электронов и дырок можно рассматривать двояко: либо как движение локализованных в пространстве частиц, либо как распространение электромагнитных волн. Такое положение вещей связано с тем, что валентные электроны обладают нулевой кинетической энергией, которая и обуславливает волновые свойства этих частиц. Под длиной волны, характеризующей движение электронов или дырок, следует понимать величину, равную

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{E_{K_0}}, \tag{1}$$

где c – электроемкость; ν – частота; h – постоянная Планка; E_{Ko} – нулевая кинетическая энергия.

Из выражения видно, что длина волны λ обратно пропорциональна нулевой кинетической энергии электронов. С другой стороны, нулевая кинетическая энергия уменьшается с ростом объема, приходящегося на один неразличимый электрон. У металлов этот объем равен 3-8 элементарным объемам и E_{K_0} составляет несколько электронвольт. Длина волны, соответствующая валентным электронам металла, равна 5-6 А, т. е. трем-четырем межатомным расстояниям.

Концентрация свободных электронов в зоне проводимости полупроводников обычно от 10^6 до 10^{13} раз меньше концентрации валентных электронов. Отсюда следует, что нулевая кинетическая энергия электронов в зоне проводимости чрезвычайно мала ($E_{K_0} \approx 10^{-4} - 10^{-8}$ *эв*) и, рассчитанная по этим значениям, длина волны λ много больше, чем у металлов.

Кроме нулевой кинетической энергии электроны обладают и тепловой энергией W, равной 3/2 kT, где k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. При T = 300° К kT = 0,026 *эв*, что много меньше E_{K_0} для металлов, но существенно больше E_{K_0} для полупроводников. Аналогичные рассуждения можно привести и для находящихся в валентной зоне дырок.

Поскольку волновые свойства электронов определяются нулевой кинетической энергией, движение электронов в металле необходимо рассматривать с точки зрения распространения электромагнитных волн. Движение же электронов и дырок в полупроводнике (или диэлектрике) будем рассматривать подобно движению атомов или молекул газа, обладающих кинетической энергией, равной 3/2 kT.

Ввиду хаотичности теплового движения электроны непрерывно перемещаются по различным направлениям и поэтому переноса заряда в каком-нибудь предпочтительном направлении не происходит. Изменение траектории движения, а, следовательно, и изменение средней скорости свободных электронов происходит под влиянием тепловых колебаний атомов решетки. Если предположить, что между двумя столкновениями свободные электроны двигаются равномерно и прямолинейно, то скорость теплового движения электронов можно представить как

$$\upsilon_T = \frac{l_{св}}{\tau_{ср}}, \tag{2}$$

где $l_{св}$ - длина свободного пробега электронов, т. е. расстояние между двумя соударениями; $\tau_{ср}$ — среднее время свободного пробега.

Средняя скорость теплового движения электронов определяется из условия

$$\frac{m\upsilon_T^2}{2} = \frac{3}{2}kT, \tag{3}$$

где m – масса и откуда

$$\upsilon_T = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \tag{4}$$

и при $T = 300^\circ$ К, $\upsilon_T = 10^7$ *см/сек*.

При наличии в кристалле электрического поля электроны приобретают добавочную скорость направленного движения $\upsilon'_{ср}$. Такое движение электронов приводит к направленному перемещению зарядов, т. е. к возникновению тока. Очевидно, что число электронов, проходящих в единицу времени через единицу поверхности, перпендикулярной к направлению скорости $\upsilon'_{ср}$, равно $n\upsilon'_{ср}$, где n - концентрация свободных электронов. Отсюда плотность тока j равна

$$j = nq_Э \upsilon'_{ср}, \tag{5}$$

где $q_Э$ – заряд электрона.

Вычисления, произведенные по формуле, показали, что при обычных плотностях тока и концентрациях носителей величина $\upsilon'_{ср}$ примерно равна 10^{-2} *см/сек*, т.е. добавочная скорость направленного движения электронов, возникающая под действием электрического поля, много меньше скорости их теплового движения при $T = 300°$ К.

Теперь рассмотрим зависимость плотности тока j от напряженности электрического поля E, которое создает добавочную среднюю скорость $\upsilon'_{ср}$. При наличии электрического поля напряженностью E на каждый электрон в кристалле действует сила, величина которой равна $q_Э E$. Под действием этой силы электроны приобретают ускорение

$$a = \frac{q_Э E}{m}. \tag{6}$$

Если E постоянна, то и a постоянна и, следовательно, электрон движется равноускоренно. Такое движение происходит только между двумя соударениями, так как непосредственно после столкновения скорость направленного движения большинства электронов близка нулю. К концу свободного пробега скорость направленного движения электрона максимальна и составляет

$$\upsilon'_{\max} = a\tau_{ср} = \frac{q_Э E}{m}\tau_{ср}. \tag{7}$$

Среднее время пробега электронов $\tau_{ср}$ можно получить, разделив длину свободного пробега $l_{св}$ на среднюю скорость электронов, которая равна геометрической сумме скоростей теплового и направленного движения. Учитывая, что при обычных плотностях тока и температурах $\upsilon_T >> \upsilon'_{ср}$, можно пренебречь последней величиной и считать, что

$$\tau_{ср} = \frac{l_{св}}{\upsilon_T}. \tag{8}$$

Подставляя значение $\tau_{ср}$ в формулу, получим, что к концу свободного пробега электроны будут иметь скорость направленного движения

$$\upsilon'_{\max} = \frac{q_Э E}{m}\frac{l_{св}}{\upsilon_T}. \tag{9}$$

Среднее значение скорости направленного движения $\upsilon'_{ср}$ равно

$$\upsilon'_{ср} = \frac{1}{2}\upsilon'_{\max} = \frac{q_Э E}{m}\frac{l_{св}}{\upsilon_T}. \tag{10}$$

Введем понятие подвижности носителей заряда u как среднюю скорость направленного движения, которую приобретают носители заряда в поле с единичной напряженностью 1 *в/см*. Тогда из уравнения

$$\frac{\upsilon_{ср}}{E} = \frac{1}{2}\frac{q_Э}{m}\frac{l_{св}}{\upsilon_T} = u, \tag{11}$$

$$\upsilon'_{ср} = uE. \tag{12}$$

Если скорость измерять в *см/сек*, а напряженность поля в *в/см*, то подвижность носителей заряда будет выражаться в *см^2 /в·сек*.

Тогда

$$j = nq_Э uE. \tag{13}$$

Важной характеристикой материала, зависящей от его природы, является удельная проводимость σ. Удельная проводимость обратно пропорциональна удельному сопротивлению и часто выражается в *ом*$^{-1}$ *см*$^{-1}$.

Для того, чтобы связать удельную проводимость с подвижностью носителей заряда, выведем выражение закона Ома для плотности тока. Пусть через стержень круглого сечения течет ток I. Носители заряда в нем двигаются перпендикулярно к нормальным сечениям. Рассмотрим два сечения $S' = S'' = S$, которые находятся друг от друга на расстоянии Δl. Пусть разность потенциалов между этими сечениями будет $\Delta U = U' - U''$. Сопротивление этого участка стержня

$$R = \frac{1}{\sigma}\frac{\Delta l}{S}. \tag{14}$$

Применяя закон Ома к участку цепи, получим

$$I = \frac{\Delta U}{R} = \sigma\frac{\Delta U}{\Delta l}S, \tag{15}$$

откуда

$$\frac{I}{S} = \sigma\frac{\Delta U}{\Delta l}. \tag{16}$$

Так как $\frac{I}{S}$ - плотность тока j, а $\frac{\Delta U}{\Delta l}$ - напряженность поля E, то

$$j = \sigma E. \tag{17}$$

Приравнивая формулы, получим

$$\sigma = q_Э n u. \tag{18}$$

Таким образом, удельная проводимость твердого тела равна произведению следующих величин: заряда электрона, концентрации носителей заряда и их подвижности. Известно, что удельная проводимость полупроводников меньше удельной проводимости металлов. Из равенства видно, что у полупроводников должна быть либо меньшая концентрация носителей n, либо мала их подвижность u. Для определения концентрации носителей заряда существует несколько методов, но наиболее широкое распространение получил метод, основанный на эффекте Холла.

Чтобы получить соотношение между теплопроводностью, обусловленной электронами, и электропроводностью, использовали общие уравнения для электрического тока плотностью j и теплового потока Q:

$$j = \int e f(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon, \tag{19}$$

где $g(\varepsilon)$ — плотность электронных состояний; $f(\varepsilon)$ — функция распределения,

$$Q = \int \varepsilon f(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon, \tag{20}$$

где ε – диэлектрическая проницаемость.

Решая эти уравнения совместно при условии, что электрический ток равен нулю, длина свободного пробега электрона $l \cong \varepsilon^r$ и зона проводимости имеет параболическую форму, т. е.

$$g(\varepsilon) = \frac{\pi}{16}(2m^*)^{3/2}\varepsilon^{1/2}d\varepsilon, \tag{21}$$

можно получить выражение для коэффициента электронной теплопроводности в общем виде:

$$\chi_Э = \frac{16\pi m^* l(T)k}{3h^3}(kT)^{r+2}(r+3)\Im_{r+2}(\mu^*)\frac{(r+2)}{(r+1)}\cdot\frac{\Im^2_{r+1}(\mu^*)}{\Im_r(\mu^*)}, \tag{22}$$

где $\Im(\mu^*)$ — интеграл Ферми, значение которого табулировано, μ – электрохимический потенциал, m^* - эффективная масса электронов, r – радиус, $\mu^* = \mu/kT$.

Из этого уравнения можно получить отношение коэффициентов электронной теплопроводности и электропроводности:

$$\frac{\chi_Э}{\sigma}=\left[\frac{r+3}{r+1}\cdot\frac{\Im_{r+2}(\mu^*)}{\Im_r(\mu^*)}-\frac{(r+2)^2}{(r+1)^2}\cdot\frac{\Im_{r+1}^2(\mu^*)}{\Im_r^2(\mu^*)}\right]\left(\frac{k}{e}\right)^2 T\,. \tag{23}$$

Величина r = 0 при рассеянии электронов на акустических колебаниях, r = 1 при рассеянии на ионах решетки и r = 2 при рассеянии на ионах примеси. Это выражение носит название закона Видемана—Франца—Лоренца, где

$$\left(\frac{k}{e}\right)^2\left[\frac{r+3}{r+1}\cdot\frac{\Im_{r+2}(\mu^*)}{\Im_r(\mu^*)}-\frac{(r+2)^2}{(r+1)^2}\cdot\frac{\Im_{r+1}^2(\mu^*)}{\Im_r^2(\mu^*)}\right]=L \tag{24}$$

число Лоренца.

В частных случаях для сильно вырожденного (металлы) или невырожденного электронного газа этот закон выражается более простыми зависимостями, для получения которых может быть использован следующий вывод. Запишем коэффициент электронной теплопроводности аналогично коэффициенту теплопроводности обычного газа

$$\chi_Э=\frac{1}{3}c_V\,\overline{\upsilon_Э}\,\overline{l_Э}\,, \tag{25}$$

где $\overline{\upsilon_Э}$ — средняя тепловая скорость электрона; $\overline{l_Э}$ — средняя длина их свободного пробега. Коэффициент электропроводности можно представить в виде

$$\sigma=\frac{e^2 n\overline{l_Э}}{2m\overline{\upsilon_Э}}\,. \tag{26}$$

Тогда их отношение с учетом преобразований имеет вид для сильно вырожденного электронного газа

$$\frac{\chi_Э}{\sigma}=\frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k}{e}\right)^2 T\,, \tag{27}$$

которое представляет закон Видемана—Франца. Для невырожденного электронного газа

$$\frac{\chi_Э}{\sigma}=(r+2)\left(\frac{k}{e}\right)^2 T\,. \tag{28}$$

Нетрудно показать, что если размерность $\chi_Э$ — *вт*/(*см·град*), σ — *Ом*$^{-1}$ *см*$^{-1}$, то из выражения (27)

$$\chi_Э=2{,}44\cdot10^{-8}\,\sigma T\,, \tag{29}$$

а если положить r = 0, т. е. число Лоренца будет минимально возможным, то из выражения (28)

$$\chi_Э=1{,}48\cdot10^{-8}\,\sigma T\,. \tag{30}$$

Поскольку при этом выводе не учитывались зависимость $\chi_Э/\sigma$ от степени вырождения, влияние термо-ЭДС на тепловой поток и зависимость длины свободного пробега от энергии, то выражения (27) и (28) справедливы только для этих предельных случаев. Зависимость $\chi_Э/\sigma$ при произвольной степени вырождения с учетом только что сделанных замечаний выражается зависимостью (23). Значение приведенного химического потенциала в этой формуле обычно вычисляется на основании данных по термо-ЭДС полупроводника, которая при произвольной степени вырождения имеет вид

$$\alpha=\frac{k}{e}\left[\frac{r+2}{r+1}\cdot\frac{\Im_{r+1}(\mu^*)}{\Im_r(\mu^*)}-\mu^*\right]. \tag{31}$$

При рассеянии электронов на акустических колебаниях эта зависимость более проста:

$$\alpha = \frac{k}{e}\left[\frac{2\Im_1(\mu^*)}{\Im_0(\mu^*)} - \mu^*\right]. \tag{32}$$

Зная значение термо-ЭДС полупроводника, можно определить его приведенный химический потенциал. После этого, подставляя значение μ^* в формулу для числа Лоренца с учетом преимущественного рассеяния электронов на акустических колебаниях, получаем зависимость

$$L = \left(\frac{k}{e}\right)^2 \frac{3\Im_0(\mu^*)\Im_2(\mu^*) - 4\Im_1^2(\mu^*)}{\Im_0^2(\mu^*)} = \left(\frac{k}{e}\right)^2 A_Э. \tag{33}$$

Правомерность закона Видемана—Франца—Лоренца в металлах и полупроводниках была доказана большим числом экспериментов. Из теоретических зависимостей и экспериментальных результатов следует, что величиной, определяющей электронную теплопроводность, является число Лоренца. Поэтому его анализ представляется чрезвычайно важным. При рассеянии электронов на акустических колебаниях число Лоренца увеличивается с возрастанием приведенного химического потенциала и уменьшением термо-ЭДС. Это и понятно, так как число Лоренца максимально для металлов, термо-ЭДС которых мала. Из сказанного следует, что, если рассеяние электронов в полупроводниках происходит на акустических колебаниях, то определение числа Лоренца возможно с достаточной точностью и его значения лежат в теоретически определенных пределах. Если полупроводник имеет дырочную проводимость, то во всех распределениях понятие «электрон» заменяется «дыркой» и полученные уравнения для теплопроводности и числа Лоренца сохраняются. Для термо-ЭДС принимаются ее абсолютные значения.

Нужно подчеркнуть, что принятое в начале вывода коэффициента электронной теплопроводности допущение об упругости колебаний является определяющим для применения закона Видемана—Франца. Известно, что столкновения будут почти упругими при рассеянии электронов на дефектах и акустических колебаниях. Но в некоторых случаях в полупроводниках могут быть и неупругие столкновения. Они наблюдаются при низких температурах ($T < \theta_D$) и рассеянии на оптических колебаниях, а также при сильном межэлектронном рассеянии. При этом время релаксации нельзя принимать единым для всех процессов и следует учитывать отношение эффективных времен релаксации для электропроводности и теплопроводности при выводе закона Видемана—Франца—Лоренца. С учетом этого в металлах число Лоренца может изменяться в широких пределах, не превышая $2{,}44\cdot 10^{-8}$.

Если неупругие колебания в полупроводниках являются следствием рассеяния носителей зарядов на оптических колебаниях, то для вырожденного электронного газа число Лоренца

$$L_{неупр} = \frac{L}{1 + \frac{3}{2\pi^2}\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \left[\ln\left(\frac{4\mu^*}{\hbar\,\omega_K}\right) - \frac{1}{3}\right]}, \tag{34}$$

где $L_{неупр}$ — число Лоренца при неупругих столкновениях, ω – энергия активации. Если же неупругие колебания — следствие межэлектронных столкновений, то

$$L_{неупр} = \frac{L}{1 + \frac{R_Э^T}{R_0^T}}, \tag{35}$$

где $R_Э^T$ — добавочное тепловое сопротивление, создаваемое между электронными столкновениями; R_0^T — тепловое сопротивление, определенное упругим рассеянием. Их отношение

$$\frac{R_Э^T}{R_0^T} = \frac{\pi^2 e^3 (kT)^2 r_Э^3 un}{\varepsilon_\infty^2 \hbar^3 \upsilon_F^4}, \tag{36}$$

где υ_F — средняя скорость электронов на уровне Ферми; $r_Э$ – радиус экранирования; ε_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость. При низких температурах

$$L_{неупр} = \frac{L}{1 + const\, uT^2}, \tag{37}$$

где константа подбирается на основе экспериментальных данных.

Наряду с неупругими столкновениями отклонение чисел Лоренца от теоретических значений, данных последним уравнением, может быть вследствие непараболичности энергетической зоны, которая уменьшает параметр *r*. Следует отметить, что влияние непараболичности нужно учитывать при высоких температурах, т. е. когда снимается вырождение, но есть электроны с большой энергией. При малых температурах влияние непараболичности на число Лоренца невелико, так как при этом полупроводники с высокой концентрацией носителей вырождены, а в полупроводниках с малой концентрацией все электроны практически находятся в области параболичности. Непараболичность не влияет на число Лоренца также в вырожденных полупроводниках при любых температурах. Количественный учет степени непараболичности определяется величиной

$$\beta_{НП} = kT/\Delta\varepsilon. \tag{38}$$

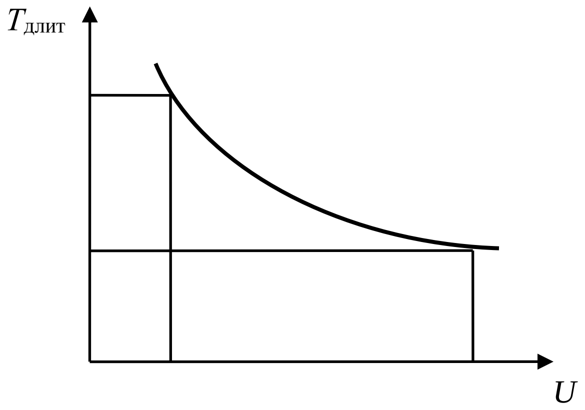

Рисунок 2 - Зависимость времени пробега электрона между двумя соударениями от приложенного напряжения

Формулы для определения числа Лоренца, приведенные здесь, не применимы в полупроводниках со сложной структурой валентной зоны.

Таковы основные соображения о связи между длительностью $T_д$ и скважностью T_c, а также амплитудой импульсного питания с учетом электрофизических свойств полупроводников (подвижности электронов, длины свободного пробега и т.д.).

На рис. 2 – 4 приведены полученные электрофизические параметры оптимального импульсного питания для трех типовых ТЭУ.

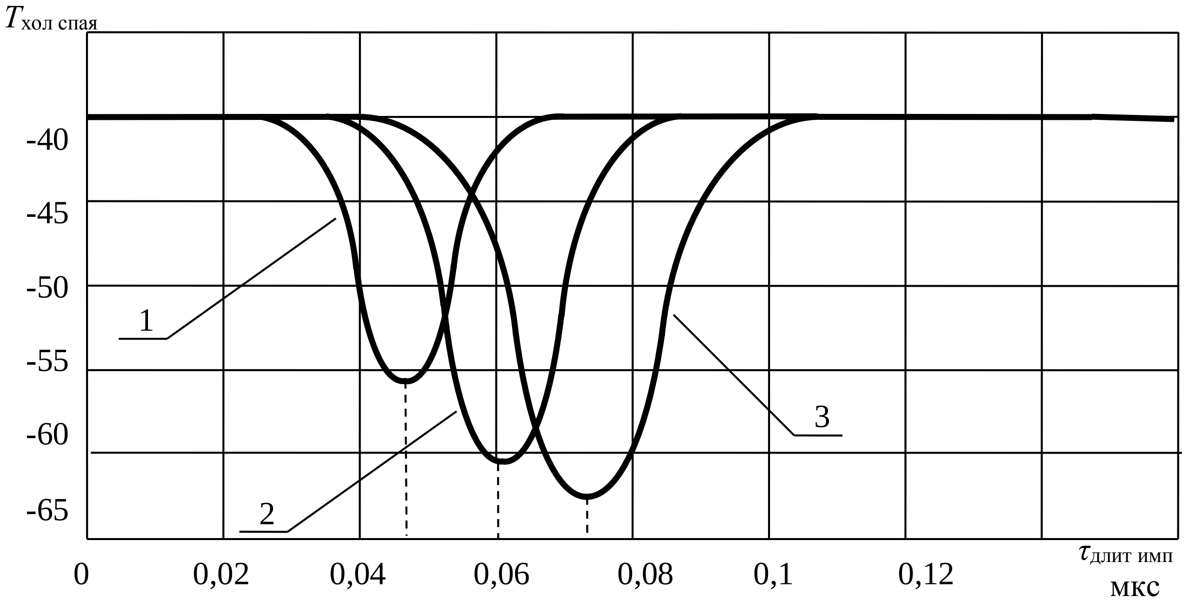

Рисунок 3 - Зависимость температуры охлаждающего спая от длительности импульсов питания: 1 – ТВ-12-0.45-1.3; 2 – ТВ-11-0.6-1.5; 3 – ТВ-17-1.0-0.7

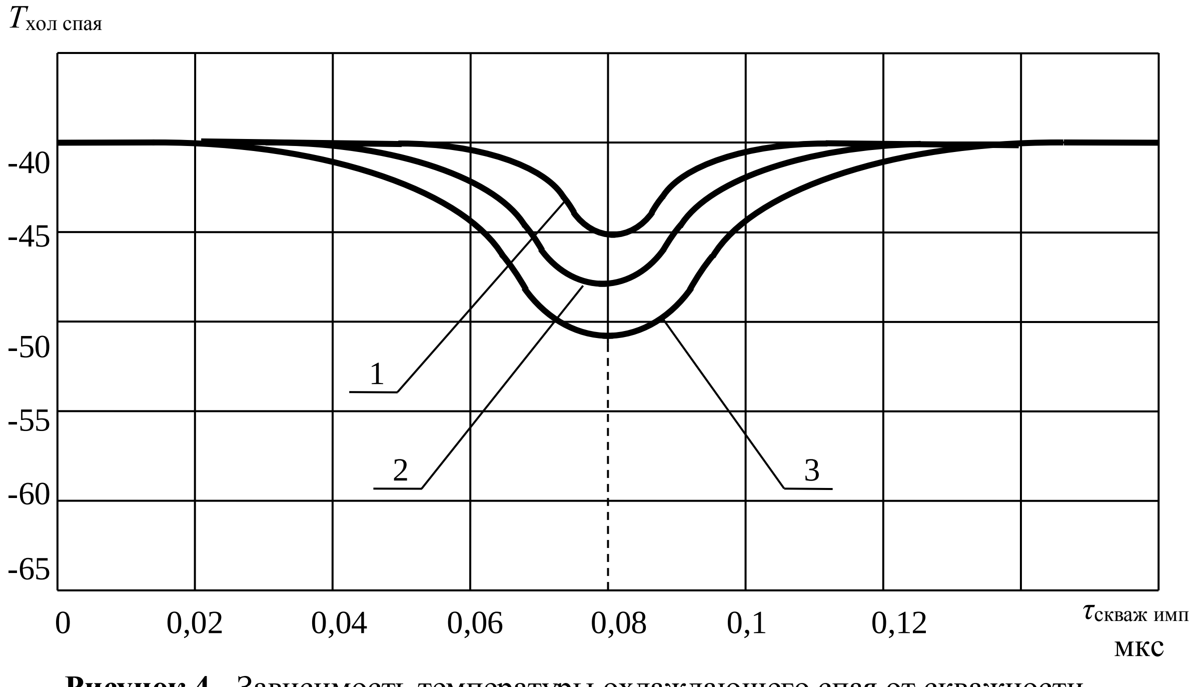

Рисунок 4 - Зависимость температуры охлаждающего спая от скважности импульсов питания: 1 – ТВ-12-0.45-1.3; 2 – ТВ-11-0.6-1.5; 3 – ТВ-17-1.0-0.7

Использование импульсного питания с учетом электротеплофизических свойств материалов термоэлементов позволяет повысить эффективность теплопередачи для любых типовых ТЭУ, а также увеличить интенсивность работы систем охлаждения.

Библиографический список:

1. Патент РФ №2417356. Способ оптимизации режимов работы термоэлектрической батареи с учетом геометрических и электротеплофизических параметров при импульсном питании/ Исмаилов Т.А., Гаджиев Х.М., Гаджиева С.М., Нежведилов Т.Д., Челушкина Т.А. Опубл. 10.12.2010. Бюл. 34.