

УДК 621.565.83

О нелинейных термоэлектрических явлениях

Д-р физ.-мат. наук Л. П. БУЛАТ, И. А. НЕФЕДОВА

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет ИТМО

Институт холода и биотехнологий

191002, Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, 9

A large temperature gradient can be realized in submicron and nanoscale structures. In the present paper a temperature field for a semiconductor contact «a cone — a plate» was calculated by the method of finite elements. It is shown, that under certain conditions the thermoelectric phenomena in such systems become nonlinear.

Keywords: thermoelectric transformation of energy, volume nanostructures, nanocomposites, big gradient of temperature, nonlinearity, method of finite elements.

Ключевые слова: термоэлектрическое преобразование энергии, объемные наноструктуры, наноконпозиты, большой градиент температуры, нелинейность, метод конечных элементов.

Объемные наноструктуры, в том числе наноконпозиты, являются перспективными термоэлектриками, так как их термоэлектрическая добротность может существенно превышать добротность исходных кристаллических материалов [1, 2]. Изменение свойств материалов при наноструктурировании начинаются тогда, когда размеры структурных элементов l (например, нанозерен) становятся соизмеримыми с микроскопическими длинами, свойственными данному материалу — длинами свободного пробега электронов, дырок, фононов, длиной остывания носителей заряда L_0 и т. п. [3]. Например, если средняя длина свободного пробега фононов соизмерима с размерами нанозерен l в объемных термоэлектриках на основе теллурида висмута, то рассеяние фононов существенно усиливается, поэтому уменьшается решеточная теплопроводность материала [2, 4].

С другой стороны, в субмикронных и наноструктурных объектах возможно проявление еще одного физического явления. При миниатюризации термоэлементов для сохранения их энергетических параметров требуется создание достаточно больших градиентов температуры. Тогда, если микроскопические длины данного материала станут соизмеримыми с характерной длиной изменения тем-

пературы $L_T = \frac{T}{|\nabla T|}$, (T — абсолютная температура)

то должны проявиться новые явления — нелинейные [3, 5–8]. В том числе, это эффект Бенедикса [7] и инверсионный термоэлектрический эффект [8], совокупность новых анизотропных термоэлектрических и теплопроводных явлений [3]. Естественно, эти явления оказывают влияние и на свойства термоэлектрических преобразователей [9].

В различных субмикронных и наноструктурах (не только в термоэлектрических преобразователях) должны реализовываться две группы явлений:

- а) чисто размерные явления на длине l ;
- б) нелинейные явления на длине L_T .

Если первая группа явлений детально исследуется в большом количестве работ, посвященных наноструктурам, то вторая группа явлений остается менее изученной. Так, нелинейные явления в термоэлектричестве анализируются в [3, 5–9], см. также литературу в этих работах.

Для выяснения, когда надлежит принимать во внимание нелинейные явления на длине изменения температуры, необходимо в каждом конкретном случае для заданной геометрии задачи найти пространственное распределение температуры и ее градиента, затем вычислить L_T , и сравнить с наибольшей из микроскопических длин — длиной остывания L_0 [3]. Значения L_0 для некоторых материалов приведено в [6].

В настоящей работе в качестве примера выполнен расчет температурного поля и длины L_T для контакта «усеченный конус — пластина» (рис. 1). Такой контакт является типичной моделью, которая, во-первых, может привести к появлению больших градиентов температуры в области контакта [6], во-вторых, хорошо моделирует реальные контакты в объемных наноструктурных и композитных материалах [10], а также описывает некоторые реальные термоэлементы с высокой термоэлектрической добротностью [11]. Пусть нагрев контакта осуществляется с помощью тепла Джоуля, для создания электрического тока между верхней частью конуса и нижней частью пластины (см. рис. 1) прикладывается электрическое напряжение U равное 50, 75, 100, 125 и 130 В. Температура верхней частью конуса и нижней частью пластины поддерживается постоянной и равной 300 К. Боковые поверхности конуса и пластины считаются тепло- и электроизолированными. Процесс — стационарный. Задавались различные значения площади контакта усеченного конуса с пластиной. В качестве материала конуса и пластины выбран хорошо изученный полупроводник n -Ge; были использованы значения коэффициента теплопроводности 60,2 Вт/(м · К) и коэффициента электропроводности равное 10 См/м.

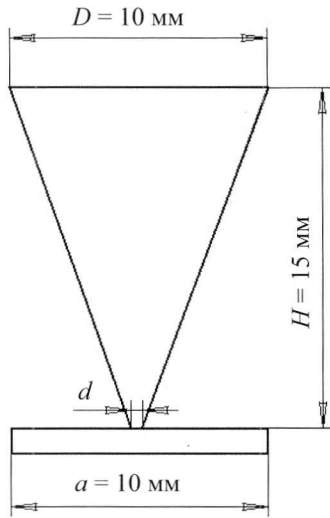


Рис. 1. Геометрическая модель

Очевидно, что если размеры d перешейка «усеченный конус — пластина» малы по сравнению с линейными размерами D , H , a ($d \ll D$, H , a), то эти линейные размеры не будут оказывать влияние на температурное поле в области перешейка. Но для компьютерного моделирования необходимо задать все геометрические размеры, поэтому на рис. 1 для примера приведены эти численные значения, которые на три порядка меньше, чем размеры перешейка d .

Расчет тепловых полей показал, что характер зависимости температурного поля и поля градиента температуры от размеров перешейка «усеченный конус — пластина» идентичен для различных напряжений. Максимальная температура в области перешейка (контакта) при фиксированном напряжении практически не зависит от размеров перешейка. Естественно, она увеличивается при повышении приложенного напряжения, причем при наибольшем рассмотренном значении 130 В рассчитанная температура даже несколько превышает температуру плавления германия ($T_{пл} = 937^\circ\text{C}$). Поэтому дальнейшее увеличение напряжения становится нецелесообразным, так как приведет к еще более высокой температуре.

В рассматриваемых условиях градиент температуры в области перешейка изменялся в диапазоне от 10^8 до $8 \cdot 10^8$ К/см. Зная градиент температуры, легко определить характерную длину ее изменения L_T , соответствующие значения в зависимости от диаметра перешейка при различных значениях напряжения показаны на рис. 2. Понятно, что L_T уменьшается с увеличением приложенного напряжения.

На графике видно, что наименьшее значение L_T достигается при минимальном рассмотренном диаметре контакта $d = 2,8$ мкм и меняется в зависимости от напряжения от 1,3 мкм до 7,8 мкм, в то время как длина остывания для n -Ge $L_o = 1,7$ мкм [6]. Это означает, что длина остывания и характерная длина изменения температуры вполне

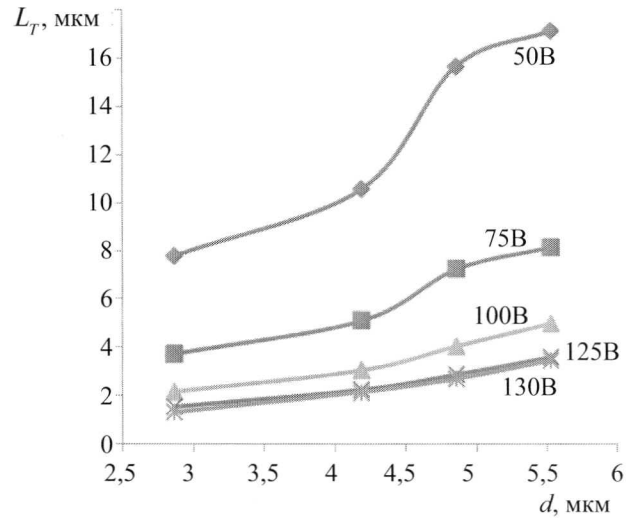


Рис. 2. Характерная длина изменения температуры в зависимости от диаметра перешейка при различных значениях напряжения

сопоставимы. То есть в рассматриваемых условиях процессы переноса тепла и электрического заряда становятся нелинейными. Теперь неравенство $L_o \ll L_T$ не выполняется, и мы не имеем право использовать обычные линейные уравнения переноса, такие как обобщенные законы Ома и Фурье.

Кроме нелинейности собственно термоэлектрических явлений, возможен более широкий класс нелинейных кинетических явлений в условиях больших градиентов температур, соответствующих геометрической модели «конус — пластина». Действительно, нано- и субмикронные перешейки с большими градиентами температур могут возникать в перколяционных системах вблизи порога протекания, при искровом плазменном спекании и в ряде других случаев, которые не имеют непосредственного отношения к термоэлектрическим явлениям. Во всех подобных задачах при построении теории или интерпретации экспериментальных результатов следует в первую очередь выяснять, имеет ли место нелинейность явлений переноса. Численное моделирование с помощью метода конечных элементов является весьма удобным для выявления степени нелинейности каждой конкретной задачи.

Список литературы

1. Дмитриев А. В., Звягин И. П. Современные тенденции развития физики термоэлектрических материалов // Успехи физических наук. 2010. Т. 180. № 8.
2. Bulat L. P. et al. Bulk Nanocrystalline Thermoelectrics Based on Bi-Sb-Te Solid Solution./The Delivery of Nanoparticles. — InTech, 2012. Chapter 21.
3. Анатычук Л. И., Булат Л. П. Полупроводники в экстремальных температурных условиях. — СПб.: Наука, 2001.
4. Булат Л. П. Влияние рассеяния на границах на теплопроводность наноструктурированного полупроводникового материала на основе твердо-

го раствора $\text{Bi}_x\text{Sb}_{2-x}\text{Te}_3$ /Л. П. Булат, И. А. Драбкин, В. В. Каратаев, В. Б. Освенский, Д. А. Пшенай-Северин // Физика твердого тела. 2010. Т. 52. Вып. 9.

5. *Bulat L. P.* Thermoelectricity under Large Temperature Gradients // *Journal of Thermoelectricity*. 1997. N. 4.

6. *Anatychuk L. I., Bulat L. P.* Thermoelectric Phenomena under Large Temperature Gradients. In «*Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano-Structured Materials*». Ed. by D. M. Rowe. CRC Press, 2006, Chapter 3.

7. *Анатычук Л. И., Булат Л. П., Комолов Е. Н.* Термоэдс Бенедикса в электронном германии // Физика и техника полупроводников. 1982. Т. 16. Вып. 9.

8. *Анатычук Л. И., Булат Л. П., Комолов Е. Н., Ладыка Р. Б.* Нелинейный термоэлектрический эффект в n-Ge // Физика и техника полупроводников. 1984. Т. 18. Вып. 2.

9. *Анатычук Л. И., Булат Л. П., Никирса Д. Д., Яцюк В. Г.* О влиянии размерных эффектов на свойства охлаждающих термоэлементов // Физика и техника полупроводников. 1987. Т. 21. Вып. 2.

10. *Булат Л. П., Пшенай-Северин Д. А.* Влияние туннелирования на термоэлектрическую эффективность объемных наноструктурированных материалов // Физика твердого тела. 2010. Т. 52. Вып. 3.

11. *Ghoshal U., Ghoshal S., McDowell C. and Shi L.* Enhanced thermoelectric cooling at cold junction interfaces // *Appl. Phys. Letters*. 2002. Vol. 80. N. 16.