

微型热电制冷器中半导体热电元件热电冷却过程的建模与仿真研究

夏 丽¹, 吴萧良^{1,2}, 吴洪鹏^{1,2}, 李朝晖¹, 黄 勇¹

(1. 中节能(唐山)环保装备有限公司, 河北 唐山 063000;

2. 河北省石墨烯节能产品技术创新中心, 河北 唐山 063000)

摘要: 全球精密的航空航天设备、家用电器设备等微电子热管理系统控制元件的有效散热都体现了微型热电制冷器 (Thermoelectric Cooler, TEC) 的重要作用。基于有限元多物理场仿真软件对 TEC 的热电冷却过程及半导体热电元件工作过程中的 Peltier 效应进行模拟仿真。研究表明: TEC 的电功率与电流呈正比关系, 两端的陶瓷基板温度受电流的影响, 且工作电流为 3.2 ~ 3.4 A (工作电流范围为 0.4 ~ 3.6 A) 时有最大温差; 电流在 Bi_2Te_3 半导体热电元件循环时会出现 Peltier 冷却效应, 半导体元件的连接点 (P-N 结) 处会产生 50 V 的电压, 最低温度为 60.9 K。该研究内容对微型热电制冷器及其热电元件在电子器件热管理中的应用、设计和优化具有较高的参考价值和指导意义。

关键词: 微型热电制冷器; 半导体热电元件; Peltier 效应; 多物理场; 热管理

Research on modeling and simulation of the thermoelectric cooling process of semiconductor thermoelectric element in mini thermoelectric cooler

XIA Li¹, WU Xiaoliang^{1,2}, WU Hongpeng^{1,2}, LI Zhaohui¹, HUANG Yong¹

(1. CECEP (Tangshan) Environmental Equipment Co., Ltd., Tangshan 063000, China;

2. Hebei Graphene Energy-saving Product Technology Innovation Center, Tangshan 063000, China)

Abstract: The effective heat dissipation of the global precision aerospace equipment, household appliances and other microelectronic thermal management system control components reflects the important role of thermo electric cooler. Based on the finite element multiphysics simulation software, the thermoelectric cooling process of TEC and the Peltier effect in the working process of semiconductor thermoelectric elements is simulated, research shows: The electrical power of the TEC is proportional to the current; The working temperature of TEC is affected by the current intensity, when the working current is 3.2 ~ 3.4 A (working current range is 0.4 ~ 3.6 A), there is a maximum temperature difference; The Peltier cooling effect will appear when the current circulates in the Bi_2Te_3 semiconductor thermoelectric element; A voltage of 50 V is generated at the connection point (P-N junction) of the semiconductor element, and the minimum temperature is 60.9 K. The research content has high reference value and guiding significance for the application, design and optimization of micro-thermoelectric coolers and their thermoelectric elements in the thermal management of electronic devices.

Key words: thermoelectric cooler; semiconductor thermoelectric element; peltier effect; multiphysics; thermal management

0 引言

随着电力电子工业的飞速发展，电子封装技术也日益凸显其重要性。电子封装密度随着半导体器件微型化的需求越来越高，从而在半导体器件热管理的研究上提出了更高的要求。热电制冷最早始于欧洲，物理学家Seebeck发现不同导体接头处存在温差时会产生电动Seebeck效应；而后科学家Peltier又发现了Seebeck效应的逆效应——Peltier效应，由此众多学者开始了热电制冷研究^[1-2]。

微型热电制冷器由于其自身结构小、可靠性高、无污染和使用寿命长等特点，已广泛应用在各种使用环境下光电子器件的温控系统中。文献[3-4]中指出热电制冷是用于微电子热管理系统散热冷却的最好方式之一。热电制冷器（TEC）工作机理是以温差发电为基础的制冷方式，是Peltier效应在散热方面的研究，直接可将电能转化成具有温度梯度的热能，从而进行散热或制冷工作^[5]。

国内外大多数学者采用理论解析法和数值计算方法来研究TEC的工作特性，常用的数值解法是有限差分法及有限元法^[6]，更多侧重的是稳态下的制冷特性的研究，也有一些学者对热电制冷器的热电材料展开了一些研究；1963年，文献[7-8]对TEC器件施加更大电流，可以显著提高TEC器件的最大温差，这种现象被称为TEC器件的过冷特性（Supercooling）；文献[9]提出以方波电流脉冲运行的实际热电模块（TEM）的温度过冲特性；文献[10]完成了锗热电冷却器的瞬态工作研究；文献[11]利用四阶非线性偏微分方程研究了珀尔帖过冷^[11]。

在热电材料的研究上，目前主要集中研究高优值系数（ZT）热电材料，其中半导体金属合金型热电材料是热电制冷器使用最多的热电材料，包括Bi₂Te₃基热电材料、PbTe等硫族化合物、SiGe合金、方钴矿类和半Half-Heusler型合金等^[12-14]。在热电材料的研究中，文献[15]采用循环电沉积法制备出了Bi₂Te₃纳米结构^[15]；文献[16]通过调控前驱体材料的温度和管内的总

压力，得到了直径大于10 μm的二维Bi₂Te₃纳米片；文献[17-18]利用电置换法（GDR）制备出了高纵横比的Bi₂Te₃纳米管；文献[19]采用VLS法获得的Bi₂Te₃纳米带的晶体结构是高度有序的，因此Bi₂Te₃具有较高的电导率和ZT值；文献[20]测量了两种不同宽度和长度的Bi₂Te₃样品介电特性（介电常数和介电损耗）；文献[21]等也提出常温下的Bi₂Te₃及其合金材料是ZT值最高的热电材料。

综上所述，Bi₂Te₃半导体热电材料相较于其他半导体材料具有较大的塞贝克系数和最佳的ZT值，Bi₂Te₃纳米材料的制备工艺简单，且物理化学性质相对稳定，因此被广泛应用于室温附近的热电制冷领域，也是目前使用最广泛的热电材料之一。因此本文利用有限元仿真软件研究Bi₂Te₃基构成的微型热电制冷器中热-电冷却过程Peltier效应的工作机理。微型热电制冷器工作特性的模拟对于高集成电子器件的热管理有着重要的实际意义。

1 微型热电制冷器的建模与仿真分析

1.1 微型热电制冷器的结构及工作原理

热电制冷器（TEC）是由多个热电元件（热电臂）模块夹在陶瓷板之间相互连接组成，热电制冷元件呈电串联热并联的方式排列。每组半导体热电元件由带正电荷的P型半导体和带负电荷的N型半导体以及金属连接片连接构成，其中热电元件（热电臂）材料为Bi₂Te₃，金属连接片材料为Cu，如图1所示。TEC制冷原理是当电流方向是N→P时，P-N结处温度降低，冷端吸热产生吸热或制冷效果；当电流方向是P→N时，P-N结出温度升高，热端放热产生放热效果。Peltier效应原理图如图2所示。

1.2 仿真建模

COMSOL仿真是基于FEMLAB的仿真方法，具有强大的计算能力，综合运用多物理场的特点进行有限元仿真。在热电制冷器的仿真设计中，参考微型热电制冷器的结构进行建模。在

物理场中, 建立热电制冷器模型, 其中模型长度为8 mm, 宽度10 mm, 高度2.5 mm。热电元件横截面积为1 mm × 1.2 mm, 节距0.5 mm, 导体厚度100 μm, 陶瓷基板厚度0.3 mm, 热电元件中半导体材料为Bi₂Te₃, 电极连接处材料为金属铜。热电制冷器的几何模型如图3所示。为简化仿真模拟, 使用对称的方法来减小模型尺寸。根据轴对称原理, 在模型建模中仅须使用原几何尺寸的1/2。在物理场中利用材料属性, 根据式(1)和式(2)计算TEC的热端温度及冷端温度。

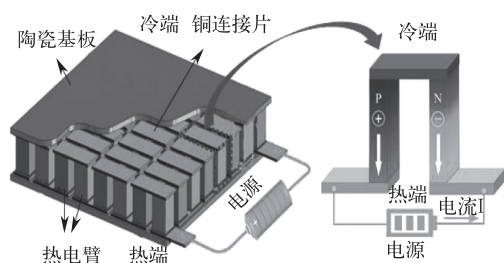


图1 热电制冷器及单元结构图

Fig. 1 Thermoelectric cooler and unit structure diagram

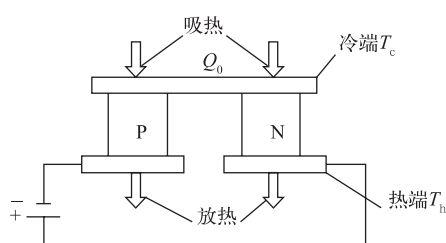


图2 Peltier 效应原理图

Fig. 2 Schematic diagram of the Peltier effect

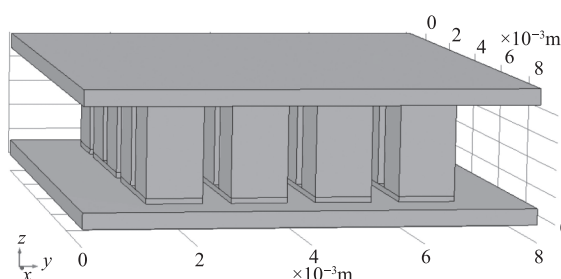


图3 热电制冷器模型图

Fig. 3 Thermoelectric cooler model diagram

$$\Delta T_{\max} = \frac{S_{np}IT_h - \frac{1}{2}I^2R}{S_{np}I + K} \quad (1)$$

式中, S_{np} 为材料的Seebeck系数; T_h 为陶瓷基板底端(热端)温度; I 为施加电流; R 为电阻; K 为TEC的热导率。

根据式(1)可以得到, 达到最大温差所需要的稳态电流 I_{opt} 计算公式为

$$I_{opt} = \frac{S_{np}T_c}{R} \quad (2)$$

式中, T_c 为陶瓷基板顶端(冷端)温度。

当TEC热端温度保持不变时, 冷端温度随电流的变化而变化, 所以一般状态下当电流强度增大时, TEC两端之间的最大温差也将进一步增大。

1.3 仿真结果分析

热电制冷器的电模型图如图4所示。根据热电制冷器的工作原理以及稳态下的电模型图, 输入电流范围为0.4~3.6 A的电流, 经过模拟计算后, 显示稳态状态下电流对温差及热电制冷器电功率的影响。从热电元件的一端到另一端的电流会有热通量产生, 从而导致板之间存在温差, 如图5所示。

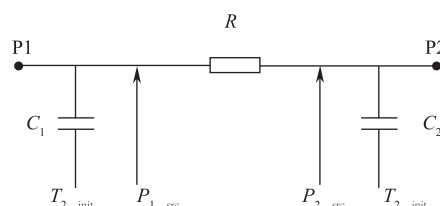


图4 稳态状态下热电制冷器的电模型图

Fig. 4 Electrical model diagram of thermoelectric cooler in steady state

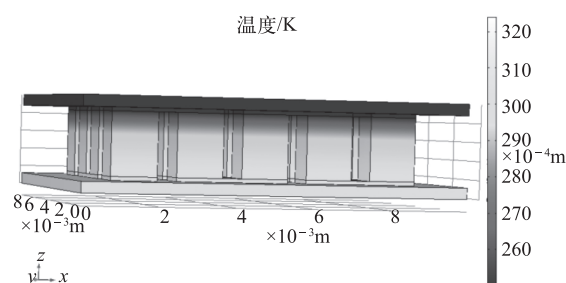


图5 稳态下热电制冷器的温度场分布图

Fig. 5 Temperature field distribution diagram of thermoelectric cooler in steady state

通过TEC稳态下的仿真分布图, 计算电流与陶瓷板温差以及热电制冷器电功率的值, 见表

1. 绘制电流与温差级电功率的性能图, 如图6、图7所示。

表 1 电流与温差及电功率的值

Tab. 1 Current and temperature difference and electric power value

I/A	$T_{\max}/K$	$T_{\min}/K$	$\Delta T/K$	电功率 P/W
3.6	323	250	73	5.71
3.4	324	249	75	4.828
3.2	324	249	75	4.32
3	323	249	74	3.84
2.8	323	250	73	3.388
2.6	323	251	72	2.938
2.4	323	252	71	2.544
2.2	323	254	69	2.2
2	323	257	66	1.84
1.8	323	259	64	1.512
1.6	323	263	60	1.216
1.4	323	267	56	0.952
1.2	323	272	51	0.72
1	323	278	45	0.52
0.8	323	284	39	0.336
0.6	323	292	31	0.198 912
0.4	323	301	22	0.089 656

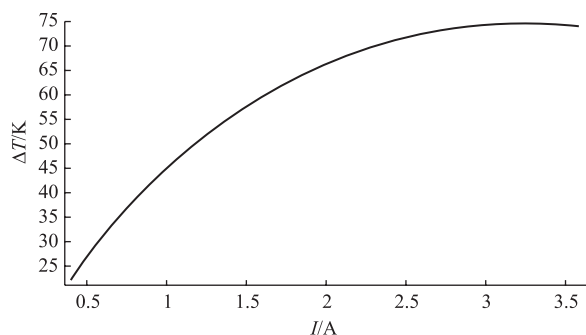


图 6 TEC 两端陶瓷板间温差与电流的性能图

Fig. 6 Performance graph of temperature difference and current between ceramic plates at both ends of TEC

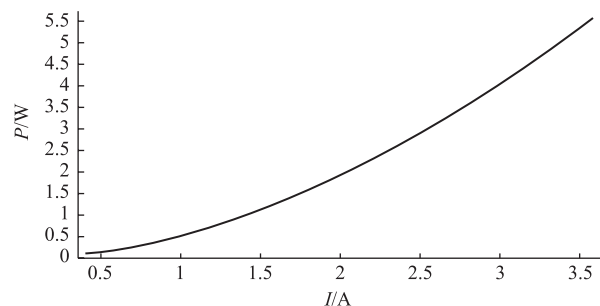


图 7 TEC 电功率与电流的性能图

Fig. 7 TEC electric power and current performance graph

综上可知, 热电制冷器的电功率与电流呈正比关系, 两端的陶瓷板温度受电流的影响, 且工作电流为 3.2 ~ 3.4 A (工作电流范围为 0.4 ~ 3.6 A) 时有最大温差, 当电流高于 3.4 A 时可以观察到温差逐渐减小, 此时会发生制冷的逆效应。

2 半导体热电元件的建模与仿真分析

2.1 半导体热电元件的几何建模

半导体热电元件 (热电臂) 是热电制冷器的基本元件。半导体热电元件的连接处由相互接触的两个不同导体 (P型、N型) 组成, 当两个导体之间存在温差时, 会在热电元件的连接处产生电压。因此半导体热电元件工作时可以将温度转换成电流强度, 利用COMSOL仿真建模验证电流流经热电制冷器其中一个导体时是否会出现珀尔帖效应的冷却效应, 验证若出现冷却效应是否与文献[23]研究中计算的数据保持一致。因此在物理场中, 设计元件的尺寸为 1 mm × 1 mm × 6 mm。元件的核心是热电元件, 由 Bi₂Te₃ 制成。其两端为铜电极, 厚度为 0.1 mm, 模型设计如图 8 所示。

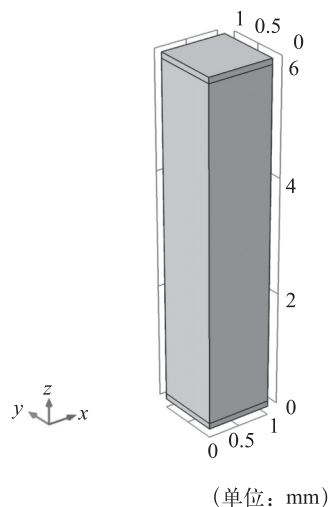


图 8 半导体热电元件的模型图

Fig. 8 Model diagram of semiconductor thermoelectric element

仿真中忽略 P-N 型半导体侧面与环境之间发生的热量交换, 以及忽略元件中热辐射、边界效

应等对仿真结果的影响,通过半导体热电元件P型到N型半导体(电流从冷端流向热端)的热流量可以表示为

$$\frac{Q}{A} = \alpha T J_c - k \frac{dT}{dx} \quad (3)$$

式中, J_c 为电流密度; A 为横截面面积; Q 为通过半导体元件的热量; α 为Seebeck系数; k 为导热系数。

在半导体热电元件中,由于有电流经过以及温度梯度的变化会产生热量,所以稳态能量守恒方程的表达式为

$$\frac{d}{dx} \left(k_p \frac{dT}{dx} \right) + J_c^2 \rho_e - T \frac{d\alpha_p}{dx} J_c \frac{dT}{dx} = 0 \quad (4)$$

式中, ρ_e 为半导体热电材料的电阻率。

假设半导体热电元件的冷、热端的温度分别为 T_{c0} 、 T_{h0} , 元件厚度为 H_{te} , 将式(3)代入式(4)并求解,通过式(3)、式(4)得到热电元件P-N结处总的制冷量为

$$Q_{c0} = \alpha T_{c0} I - \frac{kA}{H_{te}} (T_{h0} - T_{c0}) - \frac{1}{2} I^2 \frac{\rho_e H_{te}}{A} + \frac{1}{2} \tau I (T_{h0} - T_{c0}) \quad (5)$$

式中, Q_{c0} 为热电元件冷端热量, τ 为热电材料的汤姆逊系数。

由于汤姆逊效应产生的热量影响较小,所以在仿真计算中可以忽略。因此热电制冷单元冷端P-N结的总制冷量为

$$Q_{c0} = \alpha T_{c0} I - K (T_{h0} - T_{c0}) - \frac{1}{2} I^2 R \quad (6)$$

$$K = \frac{kA}{H_{te}} \quad (7)$$

$$R = \frac{\rho_e H_{te}}{A} \quad (8)$$

式(6)中分别表示了珀尔帖效应、热电器件热端向冷端的傅里叶导热热量以及工作状态下产生的焦耳热。

在仿真软件中确定 Bi_2Te_3 的材料属性,材料属性见表2。

此外,铜的塞贝克系数 $6.5 \cdot 10^{-6} \text{ V/K}$ 以及 Bi_2Te_3 材料属性参考了文献[23]研究结论。

表2 Bi_2Te_3 的材料属性

Tab. 2 Material properties of Bi_2Te_3

属性	数值
导热系数 / (W/m·K)	1.6
密度 / (kg/m ³)	7 740
恒压热容 / (J / (kg·K))	154.4
电导率 / (S/m)	1.1×10^{-5}
塞贝克系数 / (V/K)	2×10^{-4}
相对介电常数	1

2.2 半导体热电元件仿真结果分析

在仿真中,输入电极底面的温度为0℃,顶面和侧面均为热绝缘。电极底部接地,电压为0 V。电极顶部总的向内电流设置为0.7 A,侧面为电绝缘,经过电流循环,仿真模拟得到稳态下的温度分布图如图9所示,电流热通量模拟图如图10所示。

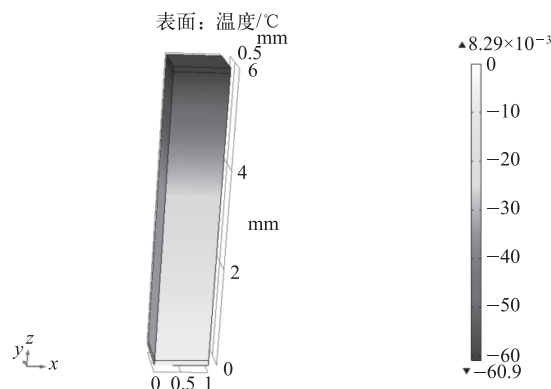


图9 稳态下半导体热电元件温度分布图

Fig. 9 Temperature distribution of semiconductor thermoelectric elements in steady state

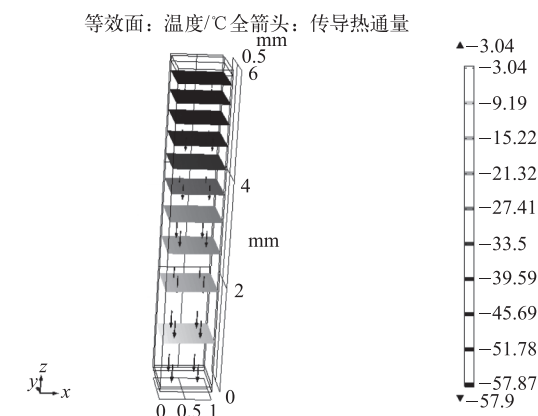


图10 半导体热电元件电流热通量图

Fig. 10 Current and heat flux diagram of semiconductor thermoelectric elements

在热电元件中循环的电流产生冷却效应。温度场中最低温度为60.9 K与文献[22]研究中的冷却温度61 K的结果近乎一致。图9显示出了与电流同向（自上而下）的等温面和热通量。

由于在相应边界设置了向内的电流密度，因此，半导体热电元件工作时会产生电动势差。顶层电极的电动势达到约50 mV，如图11所示。该值与也与文献[12]学者研究中的值一致。

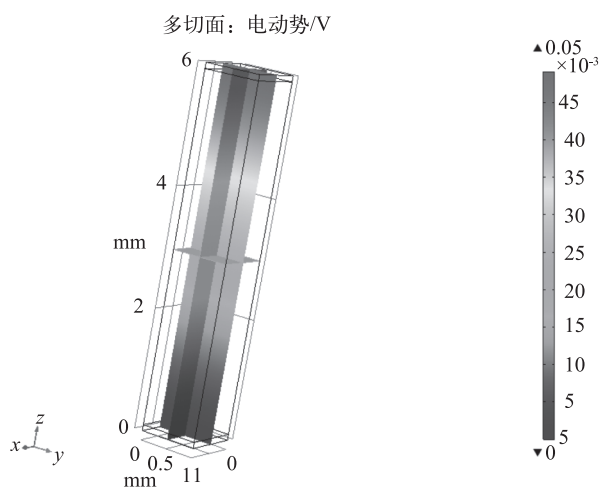


图 11 半导体热电元件中的电势

Fig. 11 Electric potential in a semiconductor thermoelectric element

3 结束语

采用COMSOL有限元分析法进行微型热电制冷器温度场分布分析，从仿真结果可以看出，TEC的电功率与电流呈正比关系，TEC的工作温度受电流强度的影响，且工作电流为3.2~3.4 A（工作电流范围为0.4~3.6 A）时有最大温差；对TEC中半导体热电元件进行仿真分析，电流循环Bi₂Te₃半导体热电元件时会出现Peltier冷却效应，半导体元件的连接点（P-N结）处会产生50 V的电压，最低温度为60.9 K。该仿真的数据与文献[22]学者的研究结论近乎一致。所以在今后的微型热电设备的研究中，Bi₂Te₃材料或Bi₂Te₃复合金属材料作为半导体热电元件的主要材料具有优异特性，为以后的光电子器件、半导体传热等方面的研究提供理论参考。

参考文献

- [1] RIFFAT S B, MA X. Thermoelectrics: a review of present and potential applications[J]. Applied Thermal Engineering, 2003, 23(8): 913-935.
- [2] 况学成, 宁小荣. 热电材料的研究现状及发展趋势[J]. 佛山陶瓷, 2008, 18(6): 34-40.
- [3] MAJUMDAR A. Thermoelectric devices: Helping chips to keep their cool[J]. Nature Nanotechnology, 2009, 4(4): 214.
- [4] 吴雷, 高明, 张涛, 等. 热电制冷的应用与优化综述[J]. 制冷学报, 2019, 190(6): 4-15.
- [5] 丁露, 徐建, 陈明祥. 热电材料几何结构对其制冷性能的影响[J]. 武汉工业学院学报, 2019, 38(4): 32-36, 93.
- [6] 杨明伟, 周兆英. 微型热电制冷器非稳态特性的热电模拟研究[J]. 红外与激光工程, 2008, 37(3): 432-435.
- [7] 丁露, 徐建, 陈明祥. 热电制冷器的过冷特性及其性能的优化综述[J]. 低温与超导, 2021, 49(4): 42-50.
- [8] HOYOS GE, et al. Numerical analysis of transient behavior of thermoelectric coolers[J]. Energy Conversion, 1977.
- [9] MA M, YU J. A numerical study on the temperature overshoot characteristic of a realistic thermoelectric module under a current pulse operation[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2014, 72: 234-241.
- [10] MANNO M, WANG P, BAR-COHEN A. Pulsed thermoelectric cooling for improved suppression of a germanium hotspot[J]. IEEE Transactions on Components Packaging & Manufacturing Technology, 2014, 4(4): 602-611.
- [11] PIGGOTT A J, ALLEN J S. Peltier supercooling with isosceles current pulses: a response surface perspective[J]. ECS Journal of Solid State Science and Technology, 2017, 6(3): 3045-3054.
- [12] 孙东方. 微型热电制冷器的有效热物性及制冷性

- 能研究[D]. 武汉: 华中科技大学.
- [13] JIAN H. TRITT T M. Advances in thermoelectric materials research: Looking back and moving forward[J]. Science, 2017, 357(6358): 9997.
- [14] 张宗委, 王心宇, 刘一杰, 等. 热电能源材料研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2018, 46(2): 288-305.
- [15] MENKE E J. et al. Bismuth Telluride (Bi_2Te_3) nanowires synthesized by cyclic electrodeposition/stripping coupled with step edge decoration[J]. Nano Letters, 2004, 4(10).
- [16] LIN C K, CHEN M S, HUANG R T, et al. Thermoelectric properties of alumina-doped $\text{Bi}_0.4\text{Sb}_{1.6}\text{Te}_3$ nanocomposites prepared through mechanical alloying and vacuum hot pressing[J]. Energies, 2015, 8(11): 12573-12583.
- [17] XIAO F, YOO B, LEE K H, et al. Synthesis of Bi_2Te_3 nanotubes by galvanic displacement[J]. Journal of the American Chemical Society, 2007, 129(33): 10068-10069.
- [18] DANINE A, TERMENTZIDIS K, SCHAEFER S, et al. Synthesis of bismuth telluride nanotubes and their simulated thermal properties[J]. Superlattices and Microstructures, 2018, 122(10): 587-595.
- [19] PARK D, PARK S, JEONG K, et al. Thermal and electrical conduction of single-crystal Bi_2Te_3 nanostructures grown using a one step process[J]. Rep, 2016 (6) : 19132.
- [20] MASOOD K B, FAROOQ U, SINGH J. Evolution of the structural, dielectric and electrical transport properties of Bi_2Te_3 nano-sticks synthesized via polyol and solvothermal routes[J]. Physica B Condensed Matter, 2020, 588(5558): 412183.
- [21] SALEEMI M, TOPRAK M S, LI S, et al. Synthesis, processing, and thermoelectric properties of bulk nanostructured bismuth telluride (Bi_2Te_3)[J]. Journal of Materials Chemistry, 2011, 22(2): 725-730.
- [22] EBLING D, JAEGLE M, BARTEL M, et al. Multiphysics simulation of thermoelectric systems for comparison with experimental device performance [J]. Journal of Electronic Materials, 2009, 38(7): 1456-1461.
- [23] JAEGLE M, Multiphysics simulation of Thermoelectric systems-modeling of peltier-cooling and thermoelectric generation[J]. Journal of Electronrc materials, 2012.

作者简介

夏丽 (1993—), 女, 硕士, 助理工程师, 主要从事热电信息材料的性能研发。

吴洪鹏 (1982—), 男, 博士, 高级工程师, 主要从事高性能材料热传导技术的研究。

(收稿日期: 2021-10-28)