

Cálculo de la distribución de temperatura de electrones y fonones en enfriamiento termoeléctrico

F.A. Serrano*, G.N. Logvinov[†]

*Instituto Politécnico Nacional, Sección de Estudios de Posgrado e Investigación
ESIME Culhuacán*

Av. Santa Ana 1000, C.P. 04430, D.F., México.

(Recibido: 24 de septiembre de 2009; Aceptado: 8 de enero de 2010)

Hoy en día los dispositivos de enfriamiento tienen un papel muy importante en la vida diaria debido a varios factores que los hacen útiles y necesarios, por citar algunos de ellos podemos decir que se utilizan para conservar alimentos y medicinas, por otra parte para nuestro interés, en el área de la microelectrónica es necesario el enfriamiento ya que los dispositivos electrónicos deben trabajar en condiciones óptimas de temperatura. Por tal motivo hay que desarrollar teorías que ayuden a comprender los fenómenos termoeléctricos y tener un profundo conocimiento de la parte teórica (conocida como ciencia básica) o principios físicos que rigen el fenómeno termoeléctrico. En este trabajo se desarrolla el estudio del modelo de dos temperaturas (electrones y fonones), que toma como base el efecto Peltier, se emplean las ecuaciones de balance de energía y de calor de los subsistemas de fonones y electrones así como las condiciones frontera a ellas para que de esta forma se obtenga la distribución de temperatura de electrones y fonones en una aproximación lineal.

Palabras clave: Efecto peltier; Fenómeno termoeléctrico; Modelo de dos temperaturas

Nowadays the cooling devices have a very important role in the daily life due to various factors that make them useful and necessary, to mention some of them we can say that they are used to conserve foods and medicines, on the other hand for our interest, in the area of the microelectronics the cooling is necessary because the electronic devices should work under good conditions of temperature. For this reason we have to develop theories that help us to understand the thermoelectric phenomena and to reach a deep knowledge of the theoretical (well-known as basic science) part or physical principles that govern the thermoelectric phenomena. In this work, a study of the two temperatures model (electrons and phonons) is carried out. Considering the effect Peltier, the equations of energy balance and heat for the phonons and electrons subsystems, together with the appropriate boundary conditions, are used to calculate the temperature distributions for electrons and phonons within the lineal approach.

Keywords: Peltier effect; Thermoelectric phenomenon; Two temperatures model

1. Introducción

El problema del calentamiento y/o enfriamiento actualmente es de gran importancia para el progreso de los dispositivos semiconductores y los circuitos electrónicos, ya que la disipación de calor en los mismos pone límites en el incremento de la integración sólida de los circuitos integrados. Por esto, es ahí donde se está dando un creciente mercado para las aplicaciones de enfriamiento termoeléctrico, que van desde el enfriamiento de circuitos semiconductores hasta las mismas aplicaciones diarias de refrigeración, entre muchas otras más.

Los usuales métodos de enfriamiento como refrigeradores de vapor o utilización de gases líquidos no pueden ser usados en este caso ya que no se pueden adaptar al tamaño de los circuitos.

El enfriamiento termoeléctrico es posiblemente el ideal para el enfriamiento y la estabilización térmica de los dispositivos mencionados [1]. Todos los enfriadores termoeléctricos son dispositivos de estado sólido, y los portadores de carga (electrones y huecos, etc.) son los refrigerantes [2]. De esta manera existe la posibilidad de integrar enfriadores termoeléctricos directamente sobre el

chip y es aquí donde puede surgir la siguiente interrogante ¿Cómo es la forma en que se da el enfriamiento local entre el dispositivo semiconductor y los enfriadores termoeléctricos? Y es esta la pregunta que nos da la pauta necesaria para realizar las investigaciones necesarias para su entendimiento [3].

Así, la posibilidad de ser incorporados directamente en el chip proveyendo un enfriamiento local abre sustancialmente las posibilidades del enfriamiento termoeléctrico. Dispositivos de este tipo son capaces de realizar enfriamientos puntuales disipando flujos de calor con gran densidad como por ejemplo (10^2 - 10^3 W / cm²) [3, 4].

Resultados publicados recientemente [10] han mostrado que la variación en la temperatura asociada con el efecto Peltier no está relacionada con la presencia de fuentes de calor (la densidad de corriente eléctrica) y el coeficiente Peltier. En contraste, tal variación es relacionada con la aparición del flujo de difusión de calor, el cual, siguiendo el principio de Le Chatelier-Braun, compensa el cambio en la componente del flujo de deriva de calor, que está en función de la conductividad térmica [11].

[†] In memoriam

*fasonet@hotmail.com

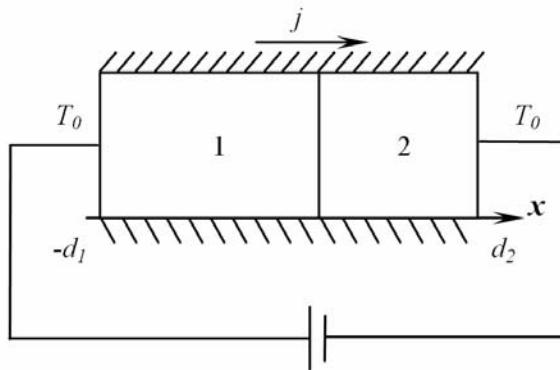


Figura 1. Diagrama unidimensional de un módulo termoeléctrico.

La comprensión del enfriamiento termoeléctrico local es naturalmente reducida al problema de la miniaturización de enfriadores termoeléctricos. Sin embargo notemos que el problema no está solamente en la tecnología de su fabricación ya que actualmente se desarrollan varias técnicas de implementación [12], la pregunta importante es ¿Cómo describir la cinética o movimiento de electrones y fonones que toman parte en el proceso de enfriamiento termoeléctrico? Esto será mostrado posteriormente ya que este problema no puede ser estudiado dentro del marco del modelo de una temperatura que supone la igualdad de la temperatura fuera de equilibrio de todas las cuasi-partículas.

El enfoque más real es la aproximación de varias temperaturas o nombrado como multi-temperatura que toma en cuenta la diferencia de estas temperaturas fuera de equilibrio. Notemos que este problema es formulado por primera vez en la teoría del enfriamiento termoeléctrico y se desarrollarán los cálculos necesarios para determinar las distribuciones de temperatura en la muestra.

2. Efecto Peltier como base teórica

El efecto Peltier bien conocido dentro de la rama de la termoelectricidad, es la base del enfriamiento o calentamiento termoeléctrico [2]. Se manifiesta experimentalmente con el decremento o incremento de la temperatura local con la conductividad del material inhomogéneo cuando se le hace pasar una corriente eléctrica (de corriente directa) por este material en comparación con la temperatura cuando la corriente está ausente. El enfriamiento o el calentamiento dependen de la naturaleza de la homogeneidad y de la dirección de la corriente.

En la práctica el enfriamiento termoeléctrico es realizado en módulos termoeléctricos [5] representados por una estructura compuesta de dos diferentes semiconductores homogéneos con conductividad tipo n- y p-. El diagrama unidimensional de este modulo se muestra en la figura 1. Siendo 1 y 2 los materiales de la estructura. Los largos de las muestras son d_1 y d_2 . El área de la sección transversal de la estructura en todos los puntos de $-d_1 \leq x \leq d_2$ se supone igual a la unidad. Las superficies laterales de la

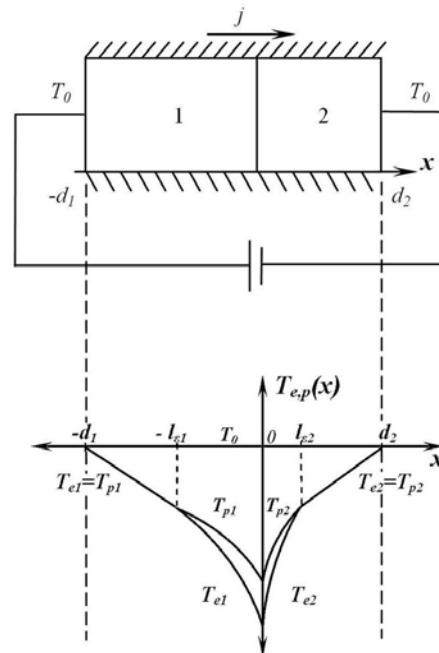


Figura 2. Diagrama unidimensional del módulo termoeléctrico con la representación gráfica de la distribución de temperatura para el caso general.

estructura están aisladas adiabáticamente, los contactos $x = -d_1$ y $x = d_2$ son mantenidos a temperatura ambiente T_0 .

Como se ha estado estudiado, la razón principal del enfriamiento o calentamiento termoeléctrico es la aparición de los flujos de difusión térmica inducidos $\vec{q}_{td} = -\kappa \nabla T$ (donde κ es la conductividad térmica, T es la temperatura fuera de equilibrio) [6,13]. Estos flujos aparecen en la estructura como consecuencia de la respuesta de la propia estructura (Principio de Le-Chatelier Braun) al cambio de los flujos térmicos de deriva $\Delta \vec{q}_{dr} = (\Pi_{1,2}) \vec{j}$ en la unión $x = 0$, donde $\Pi_{1,2}$ son los coeficientes de Peltier, \vec{j} es la densidad de corriente eléctrica.

3. Base del modelo de dos temperaturas

Es bien conocido que el semiconductor representa un gran número de subsistemas de cuasi partículas tales como electrones, huecos, fonones, etc. Así que una rigurosa investigación de algunos fenómenos como por ejemplo conductividad térmica, tiene que tener en cuenta todos estos subsistemas con sus características individuales [7]. Por otro lado en la referencia [6]. La cinética de electrones y fonones es estudiada como un único sistema fuera de equilibrio. En esta aproximación los electrones y los fonones fueron descritos por una temperatura común $T(x)$.

La aproximación de una temperatura no es válida en el caso cuando las estructuras son pequeñas y las longitudes o distancias (*longitud de enfriamiento* que será explicada más adelante) entre los límites de la unión son grandes, esto es notorio en los resultados obtenidos de este trabajo.

Además, para comprender la física de procesos termoeléctricos y particularmente el enfriamiento termoeléctrico es necesario considerar el subsistema de electrones y subsistema de fonones por separado. La justificación es que los procesos termoeléctricos solo tienen lugar solamente en el subsistema de electrones, mientras que el de fonones es la interacción con el de electrones.

Entonces la interacción de electrones con los fonones hace que aparezcan flujos de difusión térmica en el subsistema de fonones, como resultado, la distribución de temperatura de fonones aparece y el arreglo de la estructura es enfriado o calentado en función de estos dos subsistemas. En el caso general la temperatura de portadores de carga y la temperatura de fonones son diferentes, así que el problema lleva a la creación de la teoría de varias temperaturas del enfriamiento termoeléctrico, que para nuestro caso se enfoca a un modelo de dos temperaturas.

4. Modelo de dos temperaturas del enfriamiento termoeléctrico

La aproximación de dos temperaturas a el problema de la conductividad térmica y generación termoeléctrica han sido desarrollos tempranamente, ver por ejemplo [7,8] bajo un marco conceptual similar.

Es bien conocido que los electrones son dispersados por fonones acústicos quasi-elásticamente arriba de 1K [7]. En esta situación el tiempo de relajación de la energía del electrón τ_e es mucho mayor que el tiempo de relajación del momento del electrón τ , $\tau_e / \tau \approx 10^3$ [7]. Por esta razón, hay algunas longitudes de difusión $l_e \propto \tau_e$ dentro de las cuales los electrones y fonones igualan sus temperaturas durante el proceso de difusión térmica del depósito caliente al frío. La longitud l_e a menudo es llamada “*longitud de enfriamiento*”. La magnitud típica de la longitud de enfriamiento en semiconductores es del orden de $0.1\text{--}1 \mu\text{m}$.

Es evidente que la diferencia entre las temperaturas de electrones y fonones ocurre únicamente en los límites de las uniones de muestras semiconductoras, es decir en la supuesta capa que se forma entre las uniones donde la temperatura es distinta debido a que aparecen temperaturas por parte de los electrones y de fonones. Entonces Las temperaturas T_e y T_p son iguales para el caso en que $l \gg l_e$ (siendo l la longitud de la muestra semiconductora)

Las temperaturas T_e y T_p son diferentes en el semiconductor cuando es corto, $l \ll l_e$. esto es que la longitud de la muestra es mucho más pequeña a comparación de la longitud de enfriamiento.

Esto es la base fundamental para comenzar con el estudio del modelo de dos temperaturas.

Y puede ser aplicado al estudio del proceso de enfriamiento en películas de micro enfriadores

termoeléctricos [5]. El modelo de dos temperaturas de enfriamiento termoeléctrico dentro de la estructura es mostrado en la figura 2 cuando $d_1 \leq l_{1e}$ y/o $d_2 \leq l_{2e}$, donde l_{1e} y l_{2e} son las longitudes de enfriamiento en las muestras de la primera y segunda estructura.

5. Ecuaciones principales, condiciones frontera y distribución de temperatura de electrones y fonones

A continuación se mostrarán las ecuaciones que son importantes y que reflejan los resultados obtenidos en el desarrollo del mismo. Para describir el enfriamiento termoeléctrico cuantitativamente dentro del marco del modelo de dos temperaturas o de cualquier modelo es necesario usar las ecuaciones de balance de energía. Para este caso usamos la ecuación de balance de energía para cada uno de los sistemas por separado (de electrones y de fonones, los cuales los diferenciaremos por el subíndice)

$$\operatorname{div}\vec{w}_e = P[T_p(x) - T_e(x)] \quad (1)$$

$$\operatorname{div}\vec{w}_p = P[T_e(x) - T_p(x)] \quad (2)$$

Donde $\vec{w}_{e,p}$ son los flujos de energía de electrones y fonones, P es el coeficiente determinante de la interacción de energía porcentual entre electrones y fonones [7]. De la ley de conservación de energía que tiene lugar únicamente para el sistema completo electrón-fonón tenemos.

$$\operatorname{div}\vec{w} = 0 \quad (3)$$

Donde $\vec{w} = \vec{w}_e + \vec{w}_p$ es el flujo de energía total en el semiconductor.

Usando el método de equilibrio local [10], uno puede fácilmente obtener:

$$\vec{w}_e = \vec{q}_e + \vec{j}\tilde{\varphi} \quad (4)$$

Donde \vec{q}_e es el flujo de calor del electrón, $\tilde{\varphi} = \varphi - \frac{1}{e}\mu$ es el potencial electroquímico, $-e$ es la carga del electrón.

Entonces no hay corriente eléctrica en el subsistema de fonones y el potencial químico de fonones es igual a cero, el flujo de energía y el flujo de calor coinciden en el subsistema de fonones, $\vec{w}_p = \vec{q}_p$

Tomando en cuenta la ecuación para la corriente eléctrica $\vec{j} = -\sigma(\nabla\tilde{\varphi} + \alpha\nabla T_e)$, donde α es el coeficiente de Seebeck, uno puede obtener la ecuación de balance de flujo de calor de electrones y fonones [7]:

$$\operatorname{div}\vec{q}_e = \frac{j^2}{\sigma} + \alpha\vec{j}\nabla T_e + P(T_p - T_e) \quad (5)$$

$$\operatorname{div} \vec{q}_p = P(T_e - T_p) \quad (6)$$

El conjunto de ecuaciones (5),(6) debería ser completado con las condiciones frontera. Primero que nada, las condiciones frontera en la superficie $x = -d_1$, $x = d_2$ y $x = 0$ se consideran uniones perfectas desde el punto de vista de su conductividad térmica, por tal motivo puede suponerse que existe continuidad de la temperatura en las uniones.

Por tal motivo las ecuaciones para las condiciones a la frontera se pueden escribir de la siguiente manera:

$$T_{e,p}(x = -d_1) = T_{e,p}(x = d_2) = T_0 \quad (7)$$

$$T_{el}(x = 0) = T_{e2}(x = 0) \quad (8)$$

$$T_{pl}(x = 0) = T_{p2}(x = 0) \quad (9)$$

$$\left(-\kappa_{e2} \nabla T_{e2} + \Pi_2 \vec{j} \right) \Big|_{x=0} - \left(-\kappa_{el} \nabla T_{el} + \Pi_1 \vec{j} \right) \Big|_{x=0} = \\ P_s [T_p(x = 0) - T_e(x = 0)] \quad (10)$$

$$\left(-\kappa_{p2} \nabla T_{p2} \right) \Big|_{x=0} - \left(-\kappa_{pl} \nabla T_{pl} \right) \Big|_{x=0} = \\ P_s [T_e(x = 0) - T_p(x = 0)] \quad (11)$$

Aquí P_s es el coeficiente que determina la energía de interacción electrón-fonon en la superficie. Este es colocado para indicar que representa una constante de interacción entre los subsistemas.

En este trabajo presentaremos la expresión final para $T_{e,p}(x)$ de la estructura semiconductora. Además, nos restringimos únicamente a la aproximación lineal en función de la corriente eléctrica como fue hecho en [6]. La principal razón de ésto es que el enfriamiento termoeléctrico o calentamiento es un efecto lineal con respecto a la corriente. En esta aproximación las temperaturas de electrones y fonones tienen la siguiente forma:

Donde:

$$\kappa_{1,2} = \kappa_{e;1,2} + \kappa_{p;1,2},$$

$$k_{1,2} = \sqrt{P_{1,2} \left(\frac{\kappa_{el,2} + \kappa_{pl,2}}{\kappa_{el,2} \kappa_{pl,2}} \right)},$$

$$A = \frac{\kappa_{pl} \kappa_{e2} - \kappa_{p2} \kappa_{el}}{\kappa_1 \kappa_2},$$

$$C = \left[P_s + \frac{P_1}{k_1} \frac{ch(k_1 d_1)}{sh(k_1 d_1)} + \frac{P_2}{k_2} \frac{ch(k_2 d_2)}{sh(k_2 d_2)} \right]$$

De donde $l_{e;1,2}^{-1} = k_{1,2}$ son las longitudes de enfriamiento inversas.

La Figura 2 ilustra de forma general las distribuciones espaciales de las temperaturas de electrones y fonones en el caso del enfriamiento termoeléctrico. Uno puede ver que estas distribuciones son lineales en el caso general cuando las dimensiones se consideran mayores en relación a la longitud de enfriamiento. En la unión $x = 0$, las temperaturas de electrones y de fonones no son iguales. Para poder cumplir con las condiciones de frontera es necesario emplear la constante P_s

$$T_{e,p;1} = T_0 - j(\Pi_2 - \Pi_1) \left\{ \frac{(x + d_1)(-A\kappa_{p2} + Cd_2)}{A^2 \kappa_1 \kappa_2 + C(d_1 \kappa_2 + d_2 \kappa_1)} \dots \right. \\ \left. + \frac{sh[k_1(x + d_1)] \left(\frac{\kappa_{p,e;1}}{\kappa_1} \right) (d_1 \kappa_{p2} + d_2 \kappa_{p1})}{A^2 \kappa_1 \kappa_2 + C(d_1 \kappa_2 + d_2 \kappa_1)} \right\} \quad (12)$$

$$T_{e,p;1} = T_0 - j(\Pi_2 - \Pi_1) \left\{ \frac{(x - d_2)(-A\kappa_{p1} - Cd_1)}{A^2 \kappa_1 \kappa_2 + C(d_1 \kappa_2 + d_2 \kappa_1)} \dots \right. \\ \left. + \frac{sh[k_2(x - d_2)] \left(\frac{\kappa_{p,e;2}}{\kappa_2} \right) (d_1 \kappa_{p2} + d_2 \kappa_{p1})}{A^2 \kappa_1 \kappa_2 + C(d_1 \kappa_2 + d_2 \kappa_1)} \right\} \quad (13)$$

Por otra parte las temperaturas no son iguales (no están emparejadas o al mismo nivel) cuando las dimensiones se acercan a las dimensiones de la longitud de enfriamiento, como podemos notar claramente en la figura 2.

6. Conclusiones

Las ecuaciones obtenidas (12) y (13) representan el enfoque general para el problema del enfriamiento o calentamiento termoeléctrico en una aproximación lineal de dos temperaturas (de fonones y electrones). Estas ecuaciones pueden ser consideradas como la base de una investigación detallada del enfriamiento termoeléctrico en micro-enfriadores. También podemos notar la importancia de la “longitud de enfriamiento” ya que nos da la pauta para considerar éste nuevo modelo para el caso cuando $l \ll l_e$. Éstos resultados son una generalización que pueden ser considerados a casos específicos como por ejemplo el empleo de semiconductores no homogéneos y de distintos tipos de muestras (uniones n-n, p-n y p-p)

Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente apoyado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT, México). También se agradece el apoyo del Programa Institucional de Formación de Investigadores (PIFI)

Referencias

- [1]. Clemens J.M. Lasance, Robert E. Simons, Electronics Cooling, **11**, No. 4 (2005).
- [2]. F. J. DiSalvo, Science, **285**, 703 (1999).
- [3]. Joachim Nurnus, Harald Bottner, Armin Lambrecht, Proceedings of the Twenty-Second Conference on Thermoelectrics, (La Grande-Motte, France, 2003) p. 655.
- [4]. Semenyuk V.A, Proceedings of the Twenty-Second Conference on Thermoelectrics, (La Grande-Motte, France, 2003) p. 631.
- [5]. D.M.Rowe Thermoelectrics Handbook. Macro to Nano, Ed. CRC Press LLC, (2005).
- [6]. Yu.G.Gurevich, G.N.Logvinov, Semiconductor Science and Technology, **20**, R57, 2005.
- [7]. Yu.G.Gurevich and O.L.Mashkevich, Phys. Reports, **181**, No6, 328 (1989).
- [8]. Yu.G.Gurevich, G.N.Logvinov, Sov.Phys. Semicond., **26** (11), 1091 (1992).
- [9]. Herbert B.Callen, Phys. Rev.**73**, 1349 (1948).
- [10]. Yu.G.Gurevich,G.N.Logvinov,Semiconductor Science and Technology, 20, R57, 2005.
- [11].Oscar Angeles Fragoso, Fernando Adan Serrano Orozco, Jesus Audelo gonzalez and Georgiy Logvinov, Linear Theory of Thermoelectric cooling based on the Peltier Effect, Proceedings of ICEEE and CIE 2005 (Mexico D.F., 2005) p.235
- [12]. L.M. Goncalves,C. Couto, J.H. Correia, P.Alpuim,Gao Min, D.M. Rowe, Flexible Thin-film Planar Peltier Microcooler, Proc. ICT'06, (Vienna, Austria, 2006).
- [13]. Yuri G. Gurevich y Felipe Perez Rodriguez, Fenómenos de Transporte en Semiconductores, Fondo de Cultura Económica, (México D.F., 2007).