

ОРИГИНАЛЬНЫЕ СТАТЬИ

УДК 621.57+ 536.24+ 615.478.5

© О. В. Белова, А. В. Чернышев

МЕТОД МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
ТЕПЛОВЫХ ИСТОЧНИКОВ В ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ
ЭЛЕМЕНТАХ ПЕЛЬТЬЕ

Статья посвящена математическому моделированию физических процессов в исполнительных устройствах на базе термоэлементов Пельтье, работающих в динамическом режиме. Выведены аналитические выражения. Указан метод их решения — численное моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

Исследования термоэлектрических свойств полупроводниковых веществ были начаты в нашей стране академиком А.Ф. Иоффе, которого теперь называют "отцом" нобелевских лауреатов [1]. Эта область физики твердого тела и по сей день является одной из наукоемких и требующих теоретических и экспериментальных разработок. Одним из промышленных воплощений термоэлектрических эффектов является термоэлектрическая батарея (ТЭБ), состоящая из полупроводниковых p – n термопар.

В термобатарее реализуется термоэлектрический эффект Пельтье — возникновение перепада температур на ветвях термопары при подключении источника тока. Термобатареи, состоящие из термопар, в зависимости от полярности подключения могут работать как на нагрев, так и на охлаждение рабочего спая. Термобатареи, чьи характеристики оптимизированы только на эффективное охлаждение, называют термоэлектрическими микроохлаждателями (ТЭМО) [2–4].

Спектр применения ТЭБ в устройствах термостатирования велик. В последнее время они стали применяться в устройствах, где требуется как термостатирование с высокой точностью, так и циклический нагрев и охлаждение объекта.

Одним из таких устройств является применяемый в области технологии живых систем амплификатор ДНК [5].

Подбор термобатареи для устройства термостатирования требует знания основных характеристик:

- номинального напряжения U (В);
- номинальной силы тока I (А);
- номинальной мощности W (Вт);
- холодопроизводительности Q_0 (Вт) — при нулевой нагрузке на рабочем спая;
- сопротивления R (Ом).

Таким образом, для применения стандартной ТЭБ в конкретном техническом устройстве необходимо провести расчет холодо- или теплопроизводительности батареи при работе с тепловой нагрузкой и в условиях теплообмена.

Подобные методики расчета описаны в [2–4] и в случае стационарных условий нагрева или охлаждения дают результаты с инженерной точностью.

При аналитических расчетах рассматриваются изолированные термопарные элементы. Холодопроизводительность находится по формуле

$$Q_x = \alpha I T_x - \frac{1}{2} I^2 R, \quad (1)$$

где T_x — температура холодного спая (К); α — коэффициент термо-ЭДС; I — сила тока в цепи (А); R — сопротивление термоэлемента (Ом).

Далее используются номограммы для определения требуемого качества термопар. В случае уточнения расчета возможен учет:

- эффекта Томсона (эффекта возникновения дополнительной термо-ЭДС в результате градиента температур в ветви термопары);
- коммутационных пластин и слоев;
- нагрузки на спая (массы);
- коэффициентов теплоотдачи на спаях.

Однако применяемые расчетные формулы не эффективны по сравнению с возможностью расчета и использования численных методов и ЭВМ.

В 1991 г. ТЭБ стали применяться в качестве источника нагрева/охлаждения в устройстве, называемом амплификатором ДНК. Особенности работы амплификатора связаны с тем, что он является биотехнической системой, а следовательно, требует прецизионной точности поддержания и изменения температуры объекта нагрева/охлаждения во временных интервалах, измеряемых секундами.

Конструктивная схема амплификатора ДНК

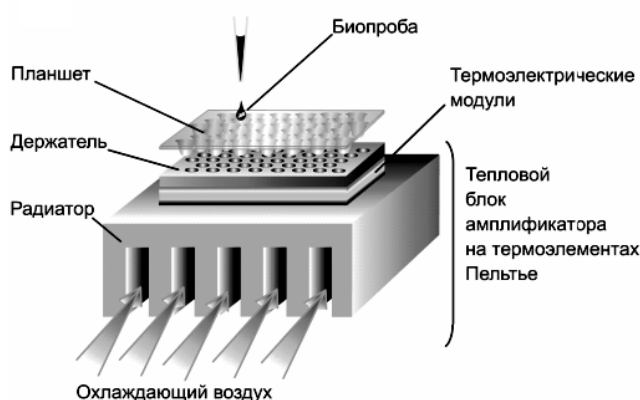


Рис. 1. Принципиальная схема прецизионного, программируемого устройства нагрева/охлаждения

на ТЭБ представлена на рис. 1. Острая необходимость в разработке различных схем амплификаторов с использованием ТЭБ потребовала создания методики численного расчета с целью моделирования рабочих процессов на виртуальной модели для создания эффективных устройств по следующим параметрам:

- точности поддержания температуры;
- потребляемой мощности;
- надежности работы ТЭБ (долговечности);
- рассеиванию тепла;
- уменьшению уровня шума;
- снижению расходуемых материалов;
- снижению себестоимости изделия.

Известные модели, в основе которых лежат зависимости типа (1), позволяют с достаточной степенью точности рассчитывать процессы в термоэлектрических устройствах, работающих в стационарном режиме (в условиях термодинамического равновесия, при этом параметры системы не зависят от времени). В данном устройстве время переходных процессов сопоставимо со временем стабилизации температуры, следовательно, подобный подход не применим для моделирования рабочих процессов.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Построение методики расчета термоэлектрического устройства в динамическом режиме заключается в разработке подхода совместного решения задачи нестационарной теплопроводности и теплообмена всех элементов и задачи описания термоэлектрических эффектов в ТЭБ методами неравновесной термодинамики [6]. Графически структура математической модели может быть

представлена в виде, как на рис. 2.

Получение нестационарных уравнений тепловых источников в термоэлектрических элементах в зависимости от вектора плотности тока базируется на принципах, предложенных Осиповым [7]. Рассмотренный Осиповым вывод уравнения сохранения энергии для случая работы термопарного элемента в стационарном режиме был применен в данной работе для вывода нестационарных уравнений тепловых источников в термоэлементах.

Эффект охлаждения в твердом теле возникает в результате протекания по нему потока заряженных частиц (например, электрического тока), который непосредственно создает направленный тепловой поток и соответственно градиент температуры в охладителе (рис. 3). К этой группе можно отнести термоэлектрические эффекты, включая различные анизотропные, магнитотермоэлектрические и гальванотермомагнитные эффекты с учетом увеличения носителей заряда фононами; эффект охлаждения за счет переноса тепла инжектированными через p – n -переход неосновными носителями и др.

Эта группа физических эффектов охлаждения имеет ту особенность, что на их основе можно создать охладители непрерывного действия.



Рис. 2. Графическое представление математической модели расчета теплового блока амплификатора

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Закон сохранения энергии в нестационарном случае [7] имеет вид

$$\frac{dU_v}{dt} = -\oint_v (\mathbf{q}\mathbf{n})d\Omega + \int_v \mu_0 \frac{d\beta}{dt} d\lambda + e \int_v \varphi \frac{d\beta}{dt} d\lambda + e \int_v (\mathbf{j}\mathbf{E})d\lambda, \quad (2)$$

где изменение энергии в элементарном объеме происходит по нескольким причинам:

1. За счет потока тепла через поверхность объема v

$$-\oint_v (\mathbf{q}\mathbf{n})d\Omega;$$

перейдем в первом интеграле к интегрированию по объему, тогда в соответствии с теоремой Гаусса получим

$$-\oint_v (\mathbf{q}\mathbf{n})d\Omega = -\int_v \operatorname{div} \mathbf{q} d\lambda, \quad (3)$$

где $d\lambda$ — элементарный объем.

2. За счет притока частиц (например, электронов и дырок)

$$\int_v \mu_0 \frac{d\beta}{dt} d\lambda,$$

где μ_0 — химический потенциал.

3. За счет перераспределения электрических зарядов, которое определим из выражения для потенциальной энергии частиц в объеме v , находящихся в электрическом поле с потенциалом φ ,

$$\int_v \varphi e \beta d\lambda,$$

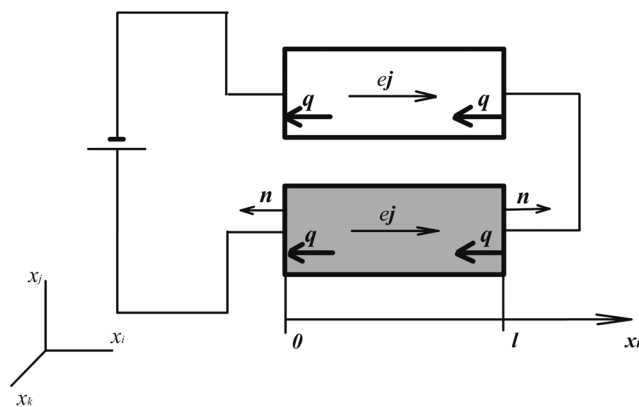


Рис. 3. Схематическое изображение термопарного полупроводникового элемента

где e — электрический заряд частицы; отсюда следует, что изменение энергии за счет перераспределения частиц равно

$$\int_v \varphi e \frac{d\beta}{dt} d\lambda = e \int_v \varphi \frac{d\beta}{dt} d\lambda.$$

Второй и третий интегралы можно объединить, если воспользоваться выражением для электрохимического потенциала

$$\int_v \mu_0 \frac{d\beta}{dt} d\lambda + e \int_v \varphi \frac{d\beta}{dt} d\lambda = \int_v \mu \frac{d\beta}{dt} d\lambda, \quad (4)$$

где μ — электрохимический потенциал, $\mu = \mu_0 + e\varphi$. Если в дифференциальной форме баланса частиц [7]

$$\frac{d\beta}{dt} + \operatorname{div} \mathbf{j} = b$$

рассматривать случай отсутствия источника частиц, то, положив в уравнении $b = 0$, получим

$$\frac{d\beta}{dt} = -\operatorname{div} \mathbf{j}.$$

Тогда выражение (4) преобразуется в

$$\begin{aligned} \int_v \mu_0 \frac{d\beta}{dt} d\lambda + e \int_v \varphi \frac{d\beta}{dt} d\lambda &= \\ &= -\int_v (\mu \operatorname{div} \mathbf{j}) d\lambda. \end{aligned} \quad (5)$$

4. За счет работы, произведенной электрическим током,

$$\int_v (e \mathbf{j}\mathbf{E}) d\lambda = e \int_v (\mathbf{j}\mathbf{E}) d\lambda, \quad (6)$$

где $\mathbf{j} = \mathbf{j}(x, y, z, t)$ — плотность потока частиц, носителей электрических зарядов; $\mathbf{E}$ — напряженность электрического поля. Четвертый интеграл можно преобразовать, подставив вместо напряженности электрического поля его выражение через градиент электрохимического потенциала:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{e} \nabla \mu.$$

Получаем

$$e \int_v (\mathbf{j}\mathbf{E}) d\lambda = -\int_v (\mathbf{j} \nabla \mu) d\lambda. \quad (7)$$

Введем плотность энергии w . Тогда

$$\frac{dU_v}{dt} = \int_v \frac{dw}{dt} d\lambda. \quad (8)$$

Таким образом, закон сохранения энергии в нестационарном случае можно записать

$$\int_v \frac{dw}{dt} d\lambda = - \int_v \operatorname{div} \mathbf{q} d\lambda - \int_v (\mu \operatorname{div} \mathbf{j}) d\lambda - \int_v (\mathbf{j} \nabla \mu) d\lambda. \quad (9)$$

В каждой точке системы существуют плотности потоков тепла и частиц, определяемых обобщенными законами электропроводности и теплопроводности:

$$e\mathbf{j} = -\frac{1}{e} \bar{\sigma} \nabla \mu - \bar{\sigma} \hat{\alpha} \nabla T, \quad (10)$$

$$\mathbf{q} = -\bar{\chi} \nabla T + \bar{\Pi} e\mathbf{j}, \quad (11)$$

где вводятся следующие тензоры:

$\bar{\sigma}$ — удельная электропроводность;

$\hat{\alpha}$ — термо-ЭДС;

$\bar{\chi}$ — коэффициент теплопроводности;

$\bar{\Pi}$ — коэффициент Пельтье.

Кинетические коэффициенты $\bar{\sigma}$, $\hat{\alpha}$, $\bar{\chi}$ и $\bar{\Pi}$ не зависят от градиентов температур и электрохимического потенциала, а определяются свойствами конкретного материала. Между компонентами этих кинетических тензоров существует определенная связь, вытекающая из статистической механики. Эти связи называются соотношениями Онзагера:

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ki}, \\ \chi_{ik} = \chi_{ki},$$

которые показывают, что в отсутствии магнитного поля тензоры $\bar{\sigma}$ и $\bar{\chi}$ симметричны, а также

$$\Pi_{ik} = T \alpha_{ki},$$

которое связывает между собой компоненты тензоров Пельтье и термо-ЭДС.

Выражение (11) представляет собой обобщенный закон теплопроводности, т. к. учитывает перенос тепла, обусловленный не только градиентом температуры, но и переносом энергии частицами. Поток тепла Пельтье возникает благодаря переносу потоком частиц энтропии.

Для анизотропных тел выражение (11) раскрывается как

$$q_i = -\chi_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k} + e \Pi_{ik} j_k.$$

Тогда

$$\operatorname{div} \mathbf{q} = \frac{\partial q_i}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \chi_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k} + e \frac{\partial}{\partial x_i} \Pi_{ik} j_k. \quad (12)$$

Используя обобщенный закон электропроводности (10), учитывая, что $\bar{\sigma} = \frac{1}{\bar{\rho}_s}$, можно записать

$$-\frac{1}{e} \frac{\partial \mu}{\partial x_i} = E_i = \rho_{sik} e j_k + \alpha_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k}, \quad (13)$$

где $\bar{\rho}_s$ — удельное электрическое сопротивление (Ом/м).

Тогда для третьего члена в уравнении (9):

$$\mathbf{j} \nabla \mu = j_i \frac{\partial \mu}{\partial x_i} = -e^2 \rho_{sik} j_k j_i - e \alpha_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k} j_i. \quad (14)$$

Аналогично для второго члена уравнения (9) можно записать

$$\mu \operatorname{div} \mathbf{j} = \mu \frac{\partial j_i}{\partial x_i}. \quad (15)$$

Векторы $\mathbf{j} = [j, 0, 0]$ и $\mathbf{n} = [1, 0, 0]$. Подставляя выражения (12), (14) и (15) в уравнение (9), получаем следующую формулу закона сохранения энергии в нестационарном случае для однородной термоэлектрически анизотропной среды:

$$\begin{aligned} \int_v \frac{dw}{dt} d\lambda = & - \int_v \left(-\frac{\partial}{\partial x_i} \chi_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k} + e \frac{\partial}{\partial x_i} \Pi_{ik} j_k \right) d\lambda + \\ & + \int_v \left(\mu \frac{\partial j_i}{\partial x_i} \right) d\lambda + \\ & + \int_v \left(-e^2 \rho_{sik} j_k j_i - e \alpha_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k} j_i \right) d\lambda. \end{aligned} \quad (16)$$

Поскольку тензор Пельтье зависит от температуры

$$\Pi_{ik} = \Pi_{ik}(T),$$

получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \Pi_{ik} j_k = & \left[\left(\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_i} \right)_T + \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right] j_k + \Pi_{ik} \frac{\partial j_k}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (17)$$

Если рассматривать однородные термоэлектрически анизотропные проводники, то

$$\Pi_{ik} = \Pi_{ik}(T), \quad \left(\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial x_i} \right)_T = 0.$$

Тогда уравнение (17) переписывается как

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \Pi_{ik} j_k = \frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x_i} j_k + \Pi_{ik} \frac{\partial j_k}{\partial x_i}. \quad (18)$$

Таким образом, уравнение закона сохранения энергии можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \int_v \frac{dw}{dt} d\lambda = & - \int_v \left[- \frac{\partial}{\partial x_i} \chi_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k} + \right. \\ & \left. + e \left(\frac{\partial \Pi_{ik}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x_i} j_k + \Pi_{ik} \frac{\partial j_k}{\partial x_i} \right) \right] d\lambda + \\ & + \int_v \left(\mu \frac{dj_i}{dx_i} \right) d\lambda + \\ & + \int_v \left(- e^2 \rho_{ik} j_k j_i - e \alpha_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k} j_i \right) d\lambda. \end{aligned} \quad (19)$$

Вносим в правой части все выражение под знак интеграла и упрощаем подынтегральное выражение

$$\begin{aligned} \int_v \frac{dw}{dt} d\lambda = & \int_v \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \chi_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k} + e^2 \rho_{ik} j_k j_i \right] d\lambda - \\ & - \int_v \left[e \left(\frac{\partial \Pi_{ki}}{\partial T} - \alpha_{ik} \right) \frac{\partial T}{\partial x_i} j_i - e \Pi_{ik} \frac{\partial j_k}{\partial x_i} - \mu \frac{dj_i}{dx_i} \right] d\lambda. \end{aligned}$$

Здесь

$$\frac{\partial \Pi_{ki}}{\partial T} - \alpha_{ik} = \tau_{ik} \quad (20)$$

тензор коэффициента Томсона, называемый также первым соотношением Томсона. Поэтому

$$\begin{aligned} \int_v \frac{dw}{dt} d\lambda = & \int_v \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \chi_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_k} + e^2 \rho_{ik} j_k j_i - \right. \\ & \left. - e \tau_{ik} \frac{\partial T}{\partial x_i} j_i - e \Pi_{ik} \frac{\partial j_k}{\partial x_i} - \mu \frac{dj_i}{dx_i} \right] d\lambda. \end{aligned} \quad (21)$$

Первый член правой части уравнения (21) представляет собой плотность тепла, выделяющегося в единицу времени за счет теплопроводности, второй член — плотность тепла Джоуля, третий и четвертый члены являются соответственно плотностями тепла Томсона и тепла Бриджмена. Пятый выражает выделение тепла при изменении плотности тока.

Коэффициент Томсона можно выразить, воспользовавшись соотношением Онзагера, которое еще называют вторым соотношением Томсона, и выражением (20):

$$\tau_{ik} = T \frac{\partial \alpha_{ik}}{\partial T}. \quad (22)$$

В случае однородной изотропной среды

$$\chi_{ik} = \chi(T) \delta_{ik}, \quad \rho_{ik} = \rho_s \delta_{ik}, \quad \tau_{ik} = \tau \delta_{ik}, \quad \Pi_{ik} = \Pi \delta_{ik}.$$

Тогда при суммировании в (21) остаются только диагональные элементы

$$\begin{aligned} \int_v \frac{dw}{dt} d\lambda = & \int_v \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \chi(T) \frac{\partial T}{\partial x_i} + e^2 \rho_s(T) j_i j_i - e \tau \frac{\partial T}{\partial x_i} j_i - e \Pi \frac{dj_i}{dx_i} \right] d\lambda + \\ & + \int_v \mu \frac{dj_i}{dx_i} d\lambda. \end{aligned}$$

Примем для нашего случая $dx_i = dy$. Тогда уравнение сохранения запишется в виде

$$\begin{aligned} \int_v \frac{dw}{dt} d\lambda = & \int_v \left[\frac{\partial}{\partial y} \chi(T) \frac{\partial T}{\partial y} + e^2 \rho_s(T) j^2 - \right. \\ & \left. - e \tau \frac{\partial T}{\partial y} j - e \Pi \frac{dj}{dy} \right] d\lambda + \\ & + \int_v \mu \frac{dj}{dy} d\lambda. \end{aligned} \quad (23)$$

Таким образом, получаем уравнение для нахождения интегрального баланса энергии в бесконечно малом контрольном объеме полупроводникового изотропного элемента с током в нестационарном режиме работы.

Если на данном отрезке времени изменения плотности тока не происходит, то выражение для сохранения энергии упрощается и принимает вид

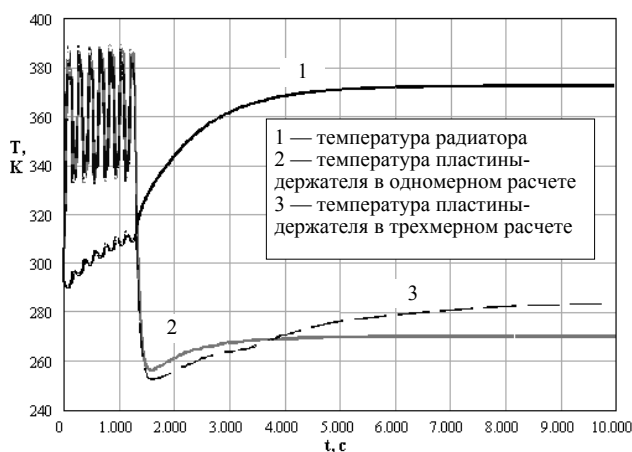


Рис. 5. Результаты расчета температуры пластины-держателя и радиатора по созданной методике

созданной модели. Примеры результатов расчета представлены на рис. 4 и 5.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для расчета исполнительного устройства на термоэлектрических элементах Пельтье в динамическом режиме была разработана математическая модель и методика расчета тепловых источников. Методика позволяет численно моделировать термоэлектрические источники в дифференциальной форме, с минимальными допущениями, с возможностью учета температурных зависимостей свойств полупроводниковых материалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иоффе А.Ф. Полупроводниковые термоэлементы. М.—Л.: Изд-во АН СССР, 1956. 188 с.
2. Анатичук Л.И. Термоэлементы и термоэлектрические устройства: Справочник. Киев: Наукова думка, 1979. 740 с.
3. Зорин И.В., Зорина З.Я. Термоэлектрические холодильники и генераторы. Л.: Энергия, 1973. 136 с.
4. Коленко Е.А. Термоэлектрические охлаждающие приборы. М.—Л.: Изд-во АН СССР, 1963. 190 с.
5. Чернышев А.В. Основы теории расчета электропневмомеханического оборудования для анализа ДНК // Научное приборостроение. 2002. Т. 12, №1. С. 53–65.
6. Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964. 456 с.
7. Осипов Э.В. Твердотельная криогеника. Киев: Наукова думка, 1977. 236 с.
8. Чернышев А.В., Белова О.В. Метод решения сопряженной задачи конвективного теплообмена на примере термостатирующего устройства // Вестник МГТУ, Сер. Машиностроение. 1998. № 4. С. 77–87.
9. Белова О.В. Разработка метода расчета и исследование прецизионных устройств нагрева и охлаждения. Дисс. ... канд. техн. наук: 05.04.06. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2000. 104 с.

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

Материал поступил в редакцию 10.11.2003.

MATHEMATICAL MODELING OF HEAT SOURCES IN PELTIER THERMOELECTRIC ELEMENTS

O. V. Belova, A. V. Chernyshev

N.E. Bauman Moscow State Technical University

The paper is devoted to mathematical modeling of physical processes occurring in actuators based on Peltier Thermal elements in the dynamic mode. Analytical expressions are derived and an approach to their solution using numerical modeling is proposed.