

半导体温差发电过程的模型分析与数值仿真*

王长宏^{1)†} 林涛¹⁾ 曾志环²⁾

1) (广东工业大学材料与能源学院, 广州 510006)

2) (国电中山燃气发电有限公司, 中山 528437)

(2014年4月22日收到; 2014年5月28日收到修改稿)

本文提出一种新型的半导体温差发电模型, 在温差发电过程的数值模拟中考虑了热电单元之间封闭腔体内空气传热的影响. 同时进一步运用有限元的数值计算方法对不同电臂对数和不同型号温差发电模型的温度场、电压场进行了数值仿真计算, 并对仿真结果进行分析. 结果表明: 采用127对热电单元模型计算的能量转换效率随冷热端温差增大而迅速提高, 与采用1对热电单元模型计算的能量转换效率之差从冷热端温差为20°C的0.39%提高到冷热端温差为220°C时的5.16%, 能量转换效率比1对热电单元平均高出3.02%. 冷端温度恒定在30°C时, 温差发电芯片的输出电压、功率以及能量转换效率均随着电偶臂的横截面积的增大而提高, 且电偶臂冷热两端的温差越大提高幅度也越大, 而温差发电芯片内阻则与电偶臂横截面积成反比关系, 当温差为220°C时对应的输出功率最高达28.9 W.

关键词: 温差发电, 热电模型, 数值仿真, 转换效率

PACS: 72.15.Jf, 73.43.Cd, 75.40.Mg, 88.05.Bc

DOI: 10.7498/aps.63.197201

1 引言

半导体温差发电模块将低品位的热能转换成电能, 特别是在废热回收的情况下, 无须考虑输入热能的成本, 还可以达到节能减排的效果, 所以低效率的问题已不再是我们必须考虑的首要问题^[1]. p型和n型热电单元相互交替, 确保载流子运输方向一致; 大多数的热电模块研究中, 性能数据分析均使用传统的非平衡热力学^[2]. 近年来, 许多国内外学者就改善热电材料的优值系数、电导率、热导率等方面做了大量的工作, 并在电子运输方式和模型取得一定进展^[3-6]. 然而, 优化热电模块结构也是提高模块的输出功率的有效途径^[7,8]. 例如Rowe^[9,10]在太阳能热电系统证实了热电系统的效率并在空间核动力热电系统中得到应用. Miguel Fisac等^[11,12]进一步探究太阳能温差发电系统的最佳输出效率, 而刘磊等^[13]则建立平板集热太阳热电器件模型, 探究集热比、热臂截面积与长度变

化等因素对器件性能参数的影响, 发现集热比与热臂长度的变化对器件性能影响显著, 热臂截面积的变化对器件转化效率影响相对较弱. Chen等人^[14]使用一个不可逆转的模型研究热电模块的性能与外部和内部的不可逆性; 确定最佳范围的移动设备的设计参数, 并对相关的最大输出功率和最高的效率进行了讨论等^[15]. Karri等^[16]和O'Shaughnessy^[17]等分别对TEG在多功能运动汽车(SUV)尾气和壁炉中的应用进行研究, 根据优化的量子阱(QW), TEG堆栈在汽车尾气中产生的功率约5.3—5.8 kW, 节省燃料约3%; 如果壁炉每天工作3 h, 热电系统每天将产生8—9 W·h电量. Shiho Kim^[18]提出通过实验方法, 获取有效的塞贝克系数和热电模块电阻的*I-V*曲线, 可知内部温度差与负载电流的热电模块几乎呈线性下降, SPICE模拟结果表明, 该方法建模分析方法能够有效研究热电模块的相关性能. 研究者们对散热外场优化^[19,20]、最佳热电单元参数的求解^[21]以及系统优

* 国家自然科学基金青年科学基金(批准号: 51306040)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: wangchh@gdut.edu.cn

化^[22]已经做了大量工作. 本文采用有限元数值计算方法, 通过ANSYS仿真软件针对不同对数和不同规格的半导体温差发电模型的温度场, 电压场进行了数值仿真和分析; 另外通过对其结果分析温差发电模型中空隙率对温差发电芯片性能的影响; 为温差发电芯片结构的进一步优化设计和性能的提高提供理论依据.

2 仿真计算模型

2.1 温差发电过程的理论分析

半导体热电效应包括五种基本效应, 其中塞贝克效应、珀尔帖效应和汤姆孙效应是热电理论的基础^[23]; 而焦耳热效应和傅立叶效应不可逆效应. 温差发电是塞贝克效应的应用, 利用温差电材料为载体, 将热能单向转换为电能. 将一个p型温差电组件和一个n型温差电组件用金属导体电极连接起来, 就构成一个温差电偶, 也称热电单元. 如图1所示, 在热电单元开路端接入电阻为R的外负载, 如果热电单元的热面流入热流, 在热电单元两端建立了温差, 则将会有电流流经电路, 负载上将得到电功率, 因而得到将热能直接转换为电能的发电模块. 当发电模块工作时, 为保持热端和冷端之间有一定的温度差, 应不断地对热端供热, 冷端散热. 热端所供给的部分热量被作为珀尔帖热吸收了, 另一部分则通过热传导, 热对流等方式传向冷端. 排出的热量应为冷端放出的珀尔帖热和从热端传导来的热量之和. 对于上述端的热平衡, 还应加上汤姆逊热和被导体释放的焦耳热. 由于电极材料的电导率比半导体单体要大2—3个数量级. 同时, 采取适当的金属-半导体接触工艺后, 可以降低半导体

材料和电极之间的接触电阻. 因此, 温差热电模块的内阻主要由温差热电单元电阻的大小决定.

基于塞贝克效应, 当温差发电组件两端温差为 $\Delta T = T_h - T_c$ 时(T_h 为热端温度, T_c 为冷端温度), 在回路中产生的温差电动势 $U = \alpha_m \Delta T$ ($\alpha_m = \alpha_p - \alpha_n$, α_p, α_n 分别为p型和n型半导体材料的塞贝克系数, α_m 为热电单元的塞贝克系数, v/k), 此电动势一部分施加到温差发电模块自身的内阻 R_m , 而另一部分则施加在外部负载电阻R上, 因此加在负载电阻上的电压即为温差发电系统的输出电压 U_0 和回路电流 I_0 分别为^[24]

$$U_0 = \alpha_m(T_h - T_c) \frac{R}{R_m + R}, \quad (1)$$

$$I_0 = \frac{\alpha_m(T_h - T_c)}{R_m + R}. \quad (2)$$

则由(1)和(2)式可求的温差发电系统的实际输出功率P为

$$P = U_0 \cdot I_0 = I^2 \cdot R = \frac{\alpha_m^2 \cdot (T_h - T_c)^2 \cdot R}{(R + R_m)^2}. \quad (3)$$

因此, 温差发电系统的热电转换效率 η 公式为

$$\eta = \frac{P}{Q_h} = \frac{(\alpha_m^2 \cdot (T_h - T_c) \cdot R)}{\left\{ \left[\alpha_m I T_h - \frac{1}{2} I^2 \cdot R_m + K(T_h - T_c) \right] \times (R + R_m) \right\}^{-1}}, \quad (4)$$

式中 Q_h 为热端的输入热量. 因半导体材料的导热系数、塞贝克系数以及电阻受温度影响较大, 因此仿真时材料物性按下述与温度非线性关系进行:

$$K_n = (1.85 - 8.59 \times 10^{-3}T - 7.08 \times 10^{-5}T^2 - 9.53 \times 10^{-8}T^3) \times 10^{-3}, \quad (5)$$

$$K_p = (1.82 - 8.05 \times 10^{-3}T + 6.14 \times 10^{-5}T^2 - 7.27 \times 10^{-8}T^3) \times 10^{-3}, \quad (6)$$

$$\alpha_n = -(194.19 + 0.59T - 3.92 \times 10^{-3}T^2 + 4.51 \times 10^{-6}T^3) \times 10^{-3}, \quad (7)$$

$$\alpha_p = (184.55 + 0.82T - 4.94 \times 10^{-3}T^2 + 4.03 \times 10^{-6}T^3) \times 10^{-3}, \quad (8)$$

$$\sigma_n = (1170.12 - 5.12T + 1.58 \times 10^{-2}T^2 - 1.21 \times 10^{-5}T^3) \times 10^{-3}, \quad (9)$$

$$\sigma_p = (1178.89 - 6.72T + 2.02 \times 10^{-2}T^2 - 1.88 \times 10^{-5}T^3) \times 10^{-3}, \quad (10)$$

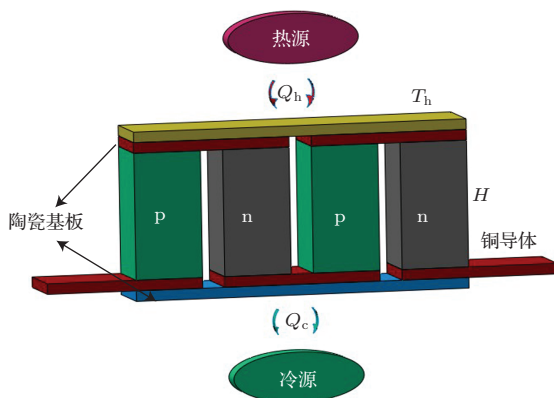


图1 热电单元内部结构及系统图

其中 T 为半导体热电单元温度, $^{\circ}\text{C}$; K_n 、 K_p 为热电单元的热导率, $\text{W}/(\text{K}\cdot\text{m})$; σ_n , σ_p 为热电单元的电导率, S/m .

2.2 模型分析

如图 1 所示的热电单元内部结构及系统图, 判断半导体温差发电模块性能差异的主要参数有热电转换效率、输出功率等, 且由于发电模块是由若干个热电单元组成, 为了方便研究, 可先分析其中的两对热电单元.

当电场和温度场同时存在时, 热电单元中发生的所有过程可用下列方程组描述:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \sigma \mathbf{E} - \sigma \alpha \nabla T, \\ \mathbf{q} &= \pi \mathbf{j} - K \nabla T, \end{aligned} \quad (11)$$

式中, 电场强度: $\mathbf{E} = -\nabla \left[\frac{\mu}{(-e)} + \varphi \right]$; 电流密度: \mathbf{j} ; 热流密度: \mathbf{q} ; 电位: φ ; 电荷: e ; 费米能级: μ ; 塞贝克系数: α ; 帕尔贴系数: $\pi = \alpha T$; 电导率: $\sigma = \rho^{-1}$; 热导率: K .

通常, 上述参数是位置和温度的函数. 在稳态情况下, 由上述方程组求得精确的温度分布和能量流. 稳态条件如下:

$$\{\text{div}(\mathbf{j}) = 0, \text{div}(\mathbf{w}) = 0\}, \quad (12)$$

式中,

$$\mathbf{w} = \left(\mathbf{q} + \frac{\mu}{(-e)} \cdot \mathbf{j} \right)$$

表示总能流密度. 方程组 (11) 中第一个方程给出系统的电场分布, 第二个方程给出相应的温度分布.

3 仿真计算结果

3.1 热电单元对数对温差发电芯片性能的影响

由于实验条件的限制, 本研究通过采用有限元法的 ANSYS 仿真软件对温差发电芯片的性能进行三维稳态分析. 其中假设环境温度为 30°C , 在标准大气压下, 材料的辐射系数 $\xi = 0.9$. 保持热电单元结构尺寸不变, 且单个热电单元的长、宽均为 1.0 mm , 高为 1.2 mm . 对比 1 对热电单元、2 对热电单元以及 127 对热电单元随热电单元冷热两端温差改变而变化的情况.

从图 2 可知, 1 对热电单元和 2 对热电单元的输出功率没有明显的变化, 温差为 220°C 时其输

输出功率大约为 0.3 W . 而 127 对热电单元模块在温差为 220°C 时的输出功率为 4.12 W . 图 3 中显示 1 对热电单元的能量转换效率高于 2 对热电单元的能量转换效率, 平均高 0.34% . 而当热电单元对数达 127 时能量转换效率随冷热端温差增大而迅速提高, 与 1 对热电单元的能量转换效率之差从冷热端温差为 20°C 的 0.39% 提高到冷热端温差为 220°C 时的 5.16% , 能量转换效率比 1 对热电单元平均高出 3.02% . 由此可知, 针对多单元的热管理和结构优化是很有必要的.

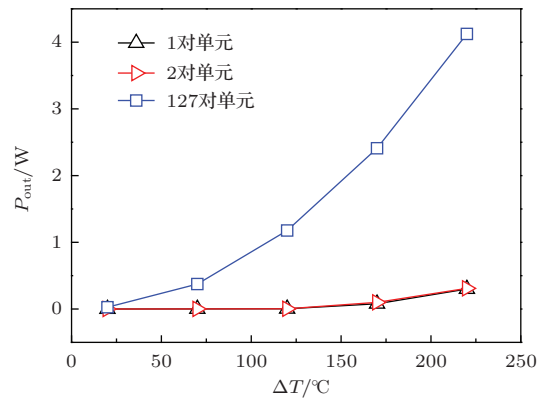


图 2 不同对数的热电单元输出功率 P 随温差 ΔT 的变化曲线

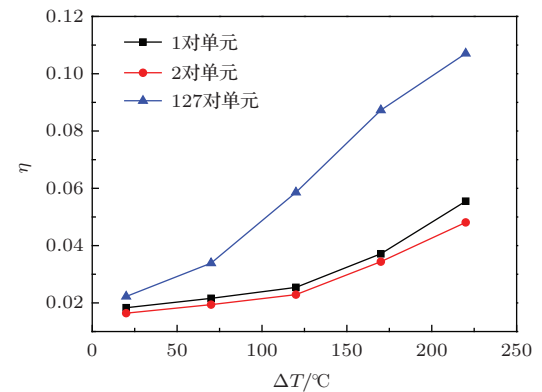


图 3 不同对数的能量转换效率 η 随温差 ΔT 的变化曲线

3.2 不同规格温差发电芯片性能的比较

如图 1 所示的温差发电单元内部结构参数示意图. 保持外部条件不变, 对比不同结构尺寸的温差发电芯片随冷热端温差变化而变化的情况. 以下三种不同规格的温差发电芯片分别为 (下面将分别用型号 1、型号 2、型号 3 代替三种不同规格的温差发电芯片):

TEG-127-1.0-1.2-250, 即高度 $H = 1.2 \text{ mm}$; 宽

度 $L = 1.0$ mm; 热电单元对数 $n = 127$; TEM 结构尺寸为 $40 \text{ mm} \times 40 \text{ mm}$.

TEG-127-1.4-1.2-250, 即高度 $H = 1.2$ mm; 宽度 $L = 1.4$ mm; 热电单元对数 $n = 127$; TEM 结构尺寸为 $40 \text{ mm} \times 40 \text{ mm}$.

TEG-127-2.8-1.2-250, 即高度 $H = 1.2$ mm; 宽度 $L = 2.8$ mm; 热电单元对数 $n = 127$; TEM 结构尺寸为 $40 \text{ mm} \times 40 \text{ mm}$.

通过数值分析, 如图 4 可知不同型号的温差发电芯片冷端温度恒定在 30°C 的情况下, 均随着热端温度的增加, 输出电压呈现线性增长. 型号 1 和型号 2 的输出电压值区别不大, 但型号 1 略比型号 2 的高, 平均高出 2%; 型号 3 则在热端高于 150°C 的相同温差条件下较型号 1 和型号 2 有大幅度增长, 平均比型号 1 高出 12.2%. 这说明温差发电模块的输出电压值随着热电单元横截面边长 L 的增加而增加.

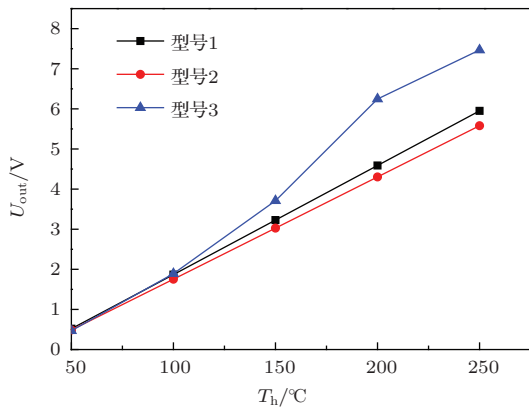


图 4 不同型号芯片热端温度 T_h 与输出电压 U 之间的关系

如图 5(a) 所示, 温差发电芯片的输出功率 P 随着温差 ΔT 的增大而增加, 且近似呈线性变化. 其中型号 3 的输出功率随冷热端温差增大而增大的幅度最大, 冷热端温差每升高 50°C , 芯片输出功率平均提高 7.19 W ; 其次是型号 2, 冷热端温差每升高 50°C , 芯片输出功率平均提高 3.77 W ; 型号 1 输出功率随冷热端温差增大而增大的幅度最小, 冷热端温差每升高 50°C , 芯片输出功率平均提高 1.02 W . 当温差达到 220°C 时, 型号 1, 型号 2, 型号 3 分别对应的输出功率为 4.12 W , 15.16 W , 28.9 W .

图 5(b) 中是芯片随着温差变化时, 输出电压 U 与内阻 Ω 之间的变化关系. 其中型号 1 和型号 2 电压曲线和内阻曲线的交点对应的温差发电芯片负载条件下输出功率最大的状态点. 并且从图中可

以看出 TEM 的最佳功率输出点对应的内阻值随着热电单元横截面边长 L 的增加而减少.

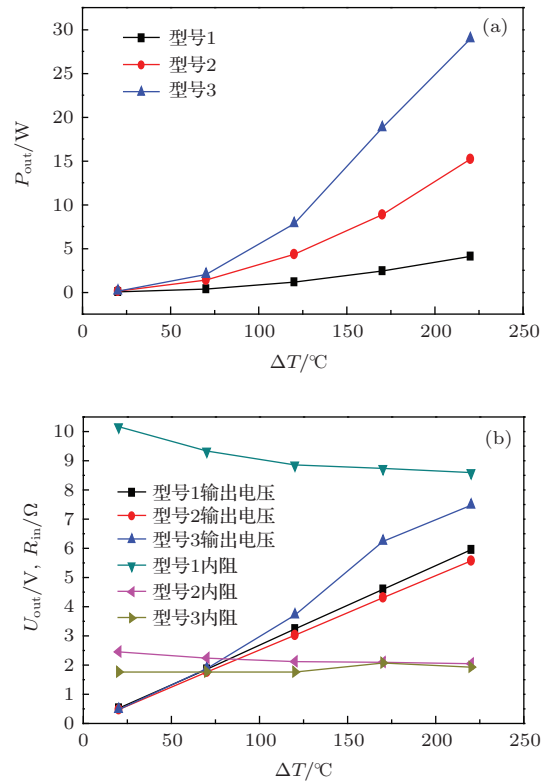


图 5 性能参数随温差 ΔT 的关系曲线 (a) 温差与输出功率; (b) 温差与输出电压及内阻

4 结 论

本文利用基于有限元法数值计算方法, 通过数值模拟的形式对温差发电模块的性能进行三维稳态分析. 在保持热电单元结构尺寸不变的情况下, 通过对比不同热电单元数的温差发电模块随冷热两端温差改变而变化的情况, 得出温差发电模块输出功率和能量转换效率均随着热电单元对数的增加而提高, 而且对数越多输出功率越大, 能量转换效率越高. 通过对比三种不同横截面积的热电单元的温差发电模块随冷热端温差变化而变化的情况, 得出温差发电芯片的输出电压、功率以及能量转换效率均随着热电单元的横截面积的增大而提高, 且热电单元冷热两端的温差越大提高幅度也越大, 而温差发电芯片内阻则随着电偶臂横截面积的增大而减小. 考虑 127 对热电单元之间封闭腔体内空气传热的影响, 当温差从 20°C 到 220°C 时, 其能量转换效率同比 1 对热电单元计算模型高出 $0.39\% \sim 5.16\%$. 在研究中发现电动势与热电单元宽度或高度不成规律性变化, 但与其比值存在特定

的规律, 接下来将对具体规律进行全面研究.

参考文献

- [1] Riffat S B, X L Ma 2003 *Appl. Therm. Eng.* **23** 913
- [2] Bejan A 2006 *Advanced Engineering Thermodynamics* 1 pp710
- [3] Liu H L, Shi X, Xu F F, Zhang L L, Zhang W Q, Chen L D, Li Q, Ctirad Uher, Tristan Day G. Jeffrey Snyder 2012 *Nature Materials* **11** 422
- [4] Deng Sh K, Tang X F, Tang R Sh 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3084
- [5] Yu Zh, Guo Y, Zheng J, Ch F 2013 *Chin. Phys. B* **22** 117303
- [6] Zhang Y Q, Shi Y, Pu L, Zhang R, Zheng Y D 2008 *Acta. Phy. Sin.* **57** 5198 (in Chinese) [张轶群, 施毅, 濮林, 张荣, 郑有焯 2008 物理学报 **57** 5198]
- [7] Min G, Rowe D M 1992 *J. Power Sources* **38** 253
- [8] Rowe D M, Min G 1998 *J. Power Sources* **73** 193
- [9] Rowe D M 1981 *Appl. Energ.* **8** 269
- [10] Rowe D M 1991 *Appl. Energ.* **40** 241
- [11] Miguel Fisac, Francesc X. Villasevil, Antonio M. López 2014 *J. Power Sources* **252** 264
- [12] Wang C H, Lin T, Lin M B, Zhong D L 2011 *Journal of Guangdong University of Technology* **2** 47 (in Chinese) [王长宏, 林涛, 林明标, 钟达亮 2011 广东工业大学学报 **2** 47]
- [13] Liu L, Zhang S L, Ma Y K, Wu G H, Zheng Sh K, Wang Y Q 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 038802 (in Chinese) [刘磊, 张锁良, 马亚坤, 吴国浩, 郑树凯, 王永青 2013 物理学报 **62** 038802]
- [14] Chen J, Yan Z, Wu L 1996 *J. Applied Phy.* **79** 8823
- [15] Xuan X C, Ng K C, Yap C, Chua H T 2002 *INT Journal Heat Mass Transfer* **45** 5159
- [16] Karri M A, Thacher E F, Helenbrook B T 2011 *Energy Convers Manage* **52** 1596
- [17] O'Shaughnessy S M, Deasy M J, Kinsella C E, Doyle J V, Robinson A J 2013 *Appl. Energ.* **102** 374
- [18] Shiho Kim 2013 *Appl Energ* **102** 1458
- [19] Gaowei Liang, Jiemin Zhou 2011 *Appl. Energ.* **88** 5193
- [20] Wei Jieting, Xiong Linchang, Wang Hao 2012 *Energy Procedia* **17** 1570
- [21] Rezanian A, Rosendahl a L A, Yin H 2014 *J. Power Sources* **255** 151
- [22] He Wei, Su Y h 2011 *Appl. Energ.* **88** 5083
- [23] Qu, Li M D, Le W, Lin Q 2005 *Gryogenics* **144** 20 (in Chinese) [屈健, 李茂德, 乐伟, 林泉 2005 低温工程 **144** 20]
- [24] Dr. Terry Hendricks 2006 *Engineering Scoping Study of Thermoelectric Generator Systems for Industrial Waste Heat Recovery Pacific Northwest National Laboratory William T. Choate BCS, Incorporated* [chapter1]

Analysis and simulation of semiconductor thermoelectric power generation process*

Wang Chang-Hong^{1)†} Lin Tao¹⁾ Zeng Zhi-Huan²⁾

1) (Faculty of Materials and Energy, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510006, China)

2) (State Power Generation Co., Ltd., Zhongshan 528437, China)

(Received 22 April 2014; revised manuscript received 28 May 2014)

Abstract

This paper presents an improved model of thermoelectric power generation, taking into consideration the effect of air heat transfer in a closed cavity between the thermoelectric couples. We have used the ANSYS software, under the condition of different numbers of thermoelectric couples and different models, to simulate numerically and analyze the temperature field and, the voltage field of thermoelectric power generation. Results show that the energy conversion efficiency of 127 pairs of thermoelectric couples increases rapidly as the temperature gradient between the hot and cold ends increases as compared with 1 pair of thermoelectric units; it is enhanced from 0.39% to 5.16% at an average of 3.02% while the temperature gradient varies from 20 °C to 220 °C. The output voltage of the chip, power, and energy conversion efficiency would increase as the cross-sectional area increases while the cold junction temperature stays at 305 °C, and the cold arm galvanic greater the temperature difference across the greater the increase rate, and thermoelectric power generation chip resistance, along with the cross-sectional area of the galvanic arm decreases. The output power can be up to 28.9W as the temperature difference is 220 °C.

Keywords: thermoelectric generation, thermoelectric model, numerical simulation, conversion efficiency

PACS: 72.15.Jf, 73.43.Cd, 75.40.Mg, 88.05.Bc

DOI: 10.7498/aps.63.197201

* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51306040).

† Corresponding author. E-mail: wangchh@gdut.edu.cn