

УДК 537



Горский П.В.

Горский П.В., док. физ.-мат. наук^{1,2}

¹Институт термоэлектричества НАН и МОН Украины,
ул. Науки, 1, Черновцы, 58029, Украина,
e-mail: anatysh@gmail.com;

²Черновицкий национальный университет
им. Ю.Федьковича, ул. Коцюбинского, 2,
Черновцы, 58012, Украина

**ОЦЕНКА ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО И ТЕПЛОВОГО КОНТАКТНЫХ
СОПРОТИВЛЕНИЙ И ТЕРМОЭДС ПЕРЕХОДНОГО КОНТАКТНОГО
СЛОЯ «ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ МАТЕРИАЛ-МЕТАЛЛ»
ОБУСЛОВЛЕННЫХ НЕПЛОСКОСТЬЮ ПОВЕРХНОСТИ
ПОЛУПРОВОДНИКА**

Теоретически исследовано влияние шероховатости поверхности полупроводника на электрическое и тепловое контактные сопротивления и термоЭДС переходного контактного слоя «термоэлектрический материал-металл». Распределение «впадин» и «горбов» на шероховатой поверхности моделируется «усеченным распределением Гаусса». Исследовано влияние параметров распределения на электрическое и тепловое контактные сопротивления и термоЭДС контакта «термоэлектрический материал-металл». Конкретные численные расчеты и построение графиков выполнены для случая контакта теллурида висмута с никелем. Оказалось, что электрическое и тепловое контактные сопротивления и термоЭДС при малых среднеквадратичных отклонениях высоты профиля немонотонно зависят от средней высоты профиля, но с приближением распределения «впадин» и «горбов» к равномерному стремятся к определенным асимптотическим значениям. При этом как тепловое и электрическое контактные сопротивления, так и термоЭДС, по мере приближения распределения «впадин» и «горбов» к равномерному возрастают при больших относительных значениях средней высоты профиля и уменьшаются при малых ее значениях. Библ. 10, рис. 5.

Ключевые слова: электрическое контактное сопротивление, термоЭДС, шероховатость поверхности, переходной слой, элементарные бруски, среднее значение, среднеквадратичное отклонение.

Введение

Предыдущими авторами опубликован ряд теоретических работ, посвященных расчетам электрических и тепловых контактных сопротивлений «ТЭМ - металл» [1 - 4]. В этих работах рассматривались барьерные и эмиссионные механизмы формирования электрического контактного сопротивления «ТЭМ - металл», диффузное рассеяние фононов на неровностях поверхности, как механизм формирования теплового контактного сопротивления «ТЭМ - металл», а также влияние диффузии металла в полупроводник и коэффициента

собираения носителей заряда металлическим электродом на электрическое контактное сопротивление «ТЭМ - металл». С другой стороны, из экспериментальных данных [5 – 8] известно, что качество обработки поверхности полупроводника существенным образом влияет на контактное сопротивление «термоэлектрический материал-металл», и, следовательно, на качество термоэлектрического преобразования энергии. Однако автору данной статьи неизвестны работы, где бы закономерно, в том числе с учетом конкретных числовых характеристик отклонения поверхности ТЭМ от идеальной плоскости, рассматривалось ее влияние на электрическое сопротивление и термоЭДС контакта «ТЭМ - металл». Именно такое рассмотрение и является целью предлагаемого исследования.

Следует отметить также, что в работе [9] приведены пределы глубины нарушенного слоя, возникающего при резании слитка термоэлектрического материала на ветви. Считается, что эта глубина может колебаться от 20 до 150 мкм.

Расчет электрического и теплового контактных сопротивлений и термоЭДС переходного контактного слоя «ТЭМ - металл», обусловленных неплоскостностью поверхности ТЭМ, и обсуждение полученных результатов

Предварительно опишем физическую модель, которая использовалась в процессе расчетов. Пусть у нас есть ТЭМ с неплоской поверхностью. Поскольку такую поверхность можно представить как совокупность случайно расположенных «впадин» и «горбов» со случайными глубинами и высотами, то проведем мысленные горизонтальные плоскости через «вершину» наивысшего «горба» и через «дно» самой глубокой «впадины». Расстояние между этими параллельными плоскостями мы и будем считать известной толщиной d_0 переходного слоя. Для «конструирования» переходного слоя заполним все свободные от ТЭМ промежутки между горизонтальными плоскостями металлом. Автору данной статьи такой статистический подход представляется более предпочтительным, чем моделирование неровностей объектами конкретной геометрической формы, например, полусферами [10]. Опишем теперь методы расчета электрического контактного сопротивления и термоЭДС переходного контактного слоя «ТЭМ - металл» в рамках этой физической модели.

Начнем с расчета контактного сопротивления. Разбив площадь контакта на элементарные площадки величиной ds , мы тем самым разобьем наш переходной контактный слой на элементарные бруски длиной d_0 , соединенные между собой параллельно. Каждый из них состоит из «металлической» части длиной d_0x и «полупроводниковой» части длиной $d_0(1-x)$, где x – случайное число из интервала $[0; 1]$. Поэтому суммарная проводимость контакта равна:

$$\Sigma = \int_S \frac{ds}{d_0 [\rho_m x + \rho_s (1-x)]}, \quad (1)$$

где ρ_m и ρ_s – соответственно удельные сопротивления металла и ТЭМ, S – площадь контакта. Применяя к (1) теорему о среднем, найдем такое окончательное выражение для электрического контактного сопротивления:

$$r_c = d_0 \left\langle \frac{1}{\rho_m x + \rho_s (1-x)} \right\rangle^{-1}, \quad (2)$$

где угловые скобки означают усреднение по достаточно большой по объему последовательности случайных (псевдослучайных) чисел из интервала $[0; 1]$. Еще одно модельное предположение, которое мы сделаем, будет заключаться в том, что наши

псевдослучайные числа мы будем считать распределенными в указанном интервале в соответствии с так называемым «усеченным распределением Гаусса», которое представим в виде:

$$f(x) = \frac{\exp\left[-(x-a)^2/2s^2\right]}{\int_0^1 \exp\left[-(x-a)^2/2s^2\right] dx}, \quad (3)$$

где a и s – некоторые параметры, причем $0 \leq a \leq 1$. Предел $s \rightarrow \infty$ соответствует равномерному распределению, для которого $f(x) = 1$. Тогда контактное сопротивление окончательно равняется:

$$R_c = d_0 \left[\int_0^1 \frac{f(x) dx}{\rho_m x + \rho_s (1-x)} \right]^{-1}. \quad (4)$$

Используя формулы (3) и (4), рассмотрим влияние параметров распределения, которые и характеризуют качество обработки поверхности полупроводника, на значение контактного сопротивления. Результаты расчетов контактного сопротивления для пары теллурид висмута-никель приведены на рис.1 для толщины 20 мкм и значений a , равных 0.928, 0.5 и 0.072, соответственно. При этом мы считали, что $\rho_m = 8.7 \cdot 10^{-6}$ Ом·см, а $\rho_s = 1.25 \cdot 10^{-3}$ Ом·см.

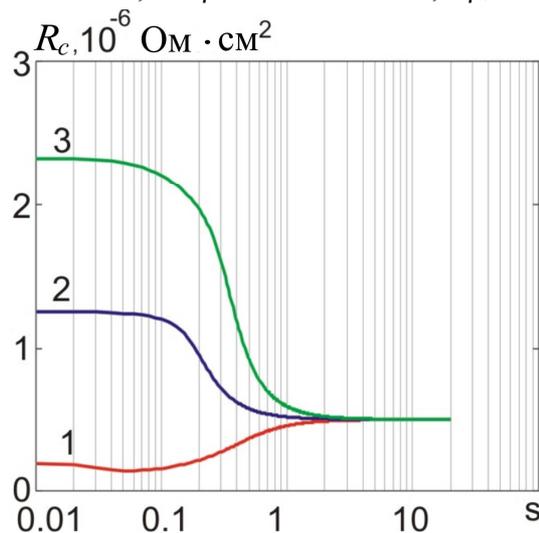


Рис. 1. Зависимость электрического контактного сопротивления пары теллурид висмута-никель при $d_0 = 20$ мкм от значения s при значениях a , равных: 1) 0.928; 2) 0.5; 3) 0.072.

Из рисунка видно, что с ростом s электрическое контактное сопротивление достаточно быстро (уже при $s = 10$) достигает асимптотического значения, которое отвечает $s \rightarrow \infty$, т.е. равномерному распределению «впадин» и «горбов» по шероховатой поверхности. Это значение равно:

$$R_c = \frac{d_0 (\rho_s - \rho_m)}{\ln(\rho_s / \rho_m)}, \quad (5)$$

то есть, приблизительно $5 \cdot 10^{-7}$ Ом·см².

Кроме того из рисунка видно, что при малых значениях s электрическое контактное сопротивление тем меньше, чем ближе значение a к единице. Значение $a = 1$ отвечает абсолютно гладкой поверхности, поэтому понятно, что в этом случае $R_c = 0$ (на рисунке этот случай не показан).

Из рисунка также видно, что с уменьшением a контактное сопротивление растет, поскольку уменьшение a отвечает росту длины «полупроводниковой» и уменьшению длины «металлической» части каждого из элементарных брусков, которые образуют переходной слой. Таким образом, в соответствии с кривой 1, наименьшее значение контактного сопротивления при исследованных условиях равняется около $2 \cdot 10^{-7} \text{ Ом} \cdot \text{см}^2$.

Результаты аналогичных расчетов для $d_0 = 150$ мкм приведены на рис. 2.

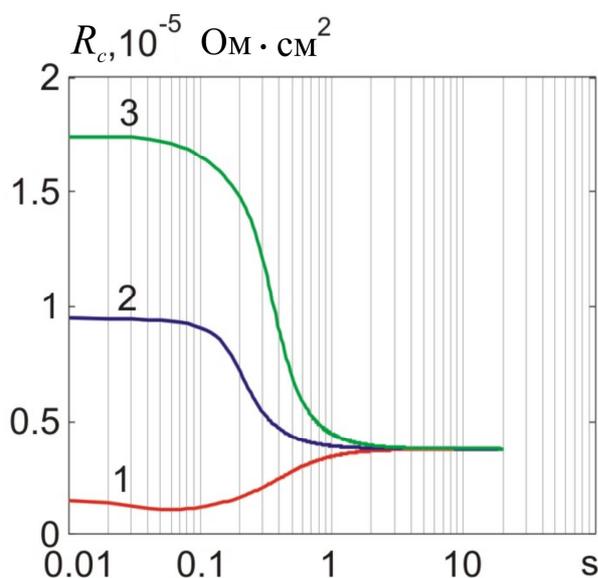


Рис. 2. Зависимость электрического контактного сопротивления пары теллурид висмута-никель при $d_0 = 150$ мкм от значения s при значениях a , равных: 1) 0.928; 2) 0.5; 3) 0.072.

При этих условиях наименьшее значение контактного сопротивления равняется $10^{-6} \text{ Ом} \cdot \text{см}^2$, а его асимптотическое значение равняется $3.75 \cdot 10^{-6} \text{ Ом} \cdot \text{см}^2$.

Следовательно, из расчетов видно, что характер обработки поверхности, который задается параметрами распределения (4), существенным образом влияет на значение контактного сопротивления. Наилучшая ситуация реализуется в случае, когда перепад высот существенно больше шероховатости поверхности. При этих условиях «металлическая» часть элементарных брусков существенно больше «полупроводниковой», что и объясняет сравнительно малое значение контактного сопротивления в этом случае.

Полностью аналогично можно определить тепловое контактное сопротивление R_t , обусловленное шероховатостью поверхности. Оно равняется:

$$R_t = d_0 \left[\int_0^1 \frac{f(x) dx}{\kappa_m^{-1} x + \kappa_s^{-1} (1-x)} \right]^{-1}. \quad (6)$$

Результаты расчетов теплового контактного сопротивления по формуле (6) приведены на рис. 3, 4.

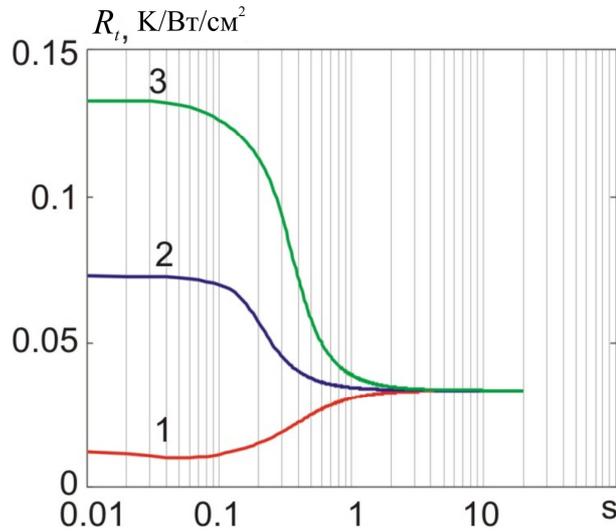


Рис.3. Зависимость теплового контактного сопротивления пары теллурид висмута - никель при $d_0 = 20$ мкм от значения s при значениях a , равных: 1) 0.928; 2) 0.5; 3) 0.072.

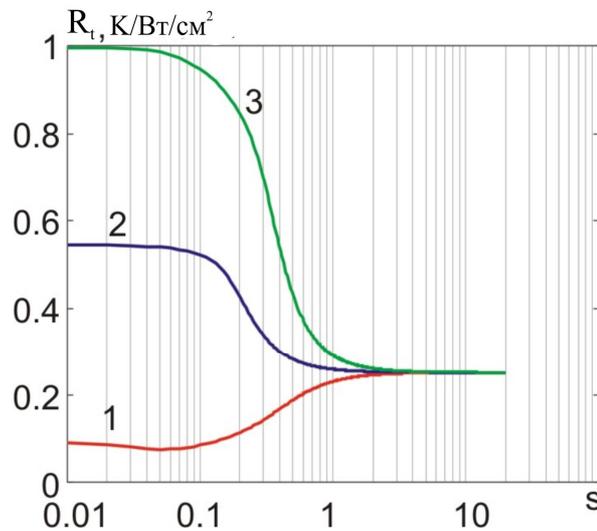


Рис.4. Зависимость теплового контактного сопротивления пары теллурид висмута-никель при $d_0 = 150$ мкм от значения s при значениях a , равных: 1) 0.928; 2) 0.5; 3) 0.072.

Из рисунков видно, что поведение теплового контактного сопротивления как функции s является полностью аналогичным поведению электрического контактного сопротивления в результате аналогии между переносом тепла и заряда. Наименьшее значение теплового контактного сопротивления при рассмотренных условиях равно $0.01 \text{ K}\cdot\text{cm}^2/\text{Вт}$, а асимптотические значения при толщинах переходных слоев 20 и 150 мкм соответственно равны 0.033 и $0.251 \text{ K}\cdot\text{cm}^2/\text{Вт}$.

ТермоЭДС контактного слоя находится как ЭДС параллельно соединенных элементарных брусков, каждому из которых присущи свои ЭДС и внутреннее сопротивление, обусловленные соотношением длин «металлической» и «полупроводниковой» частей каждого из них.

Учитывая это, найдем сначала термоЭДС элементарного бруска. По определению эта термоЭДС равняется отношению перепада термоэлектрического напряжения на бруске к перепаду температуры на нем. Следовательно, сначала нужно найти распределение температуры в элементарном бруске. С этой целью запишем стационарное уравнение теплопроводности при отсутствии внешних источников тепла для одномерного случая. Оно будет иметь вид:

$$\frac{d}{dy} \left(\kappa \frac{dT}{dy} \right) = 0, \quad (7)$$

где κ зависящая от координаты теплопроводность материала бруска. Общее решение данного уравнения таково:

$$T = C_1 \frac{dy}{\kappa} + C_2, \quad (8)$$

где C_1 и C_2 произвольные константы, которые могут быть найдены из краевых условий. Поэтому термоЭДС элементарного бруска равна:

$$\alpha_b = \frac{\int_0^{d_0} \alpha dT}{\int_0^{d_0} dT} = \frac{\int_0^{d_0} (\alpha/\kappa) dy}{\int_0^{d_0} (1/\kappa) dy} = \frac{(\alpha_m/\kappa_m)x + (\alpha_s/\kappa_s)(1-x)}{(1/\kappa_m)x + (1/\kappa_s)(1-x)}, \quad (9)$$

где $\alpha_m, \kappa_m, \alpha_s, \kappa_s$ – термоЭДС и теплопроводности металла и ТЭМ, соответственно.

Следовательно, общая термоЭДС переходного слоя, обусловленного шероховатостью поверхности, равна:

$$\alpha_c = \frac{\int_0^1 [\rho_m x + \rho_s (1-x)]^{-1} [(\alpha_m/\kappa_m)x + (\alpha_s/\kappa_s)(1-x)] [(1/\kappa_m)x + (1/\kappa_s)(1-x)]^{-1} f(x) dx}{\int_0^1 [\rho_m x + \rho_s (1-x)]^{-1} f(x) dx}. \quad (10)$$

Результаты расчета термоЭДС пары теллурид висмута-никель приведены на рис. 5.

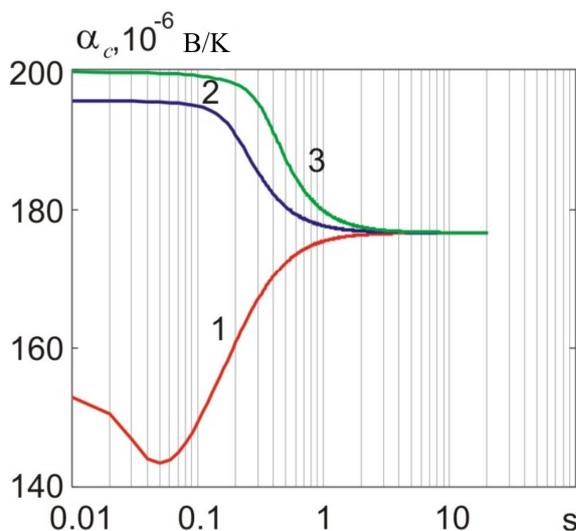


Рис.5. Зависимость термоЭДС пары теллурид висмута - никель при $d_0 = 150$ мкм от значения s при значениях a , равных: 1) 0.928; 2) 0.5; 3) 0.072.

Из рисунка видно, что термоЭДС пары теллурид висмута-никель качественно зависит от величины s при разных a так же, как и электрическое и тепловое контактные сопротивления. Это сходство обусловлено тем, что вследствие малой теплопроводности ТЭМ в сравнении с металлом при прочих равных условиях основная часть перепада температуры на элементарном бруске приходится на его полупроводниковую часть. Наименьшее значение термоЭДС в данном случае составляет около 145 мкВ/К, а ее асимптотическое значение, которое соответствует равномерному распределению «впадин» и «горбов», равняется 176 мкВ/К. Случай «короткого замыкания», когда переходной слой полностью состоит из металла, в данной статье не рассматривается.

Выводы

1. Установлено, что электрическое контактное сопротивление переходного слоя «ТЭМ-металл», обусловленное отклонением поверхности полупроводника от идеальной плоскости, для пары «никель - теллурид висмута» при толщине переходного слоя 20 мкм составляет $5 \cdot 10^{-7}$, а при толщине 150 мкм – $3.8 \cdot 10^{-6}$ Ом·см² при условии равномерного распределения «впадин» и «горбов» в пределах слоя.
2. Установлено, что тепловое контактное сопротивление переходного слоя «ТЭМ-металл», обусловленное отклонением поверхности полупроводника от идеальной плоскости, для пары «никель-теллурид висмута» при толщине переходного слоя 20 мкм составляет 0.033, а при толщине 150 мкм – 0.251 К·см²/Вт при условии равномерного распределения «впадин» и «горбов» в пределах слоя.
3. Установлено, что термоЭДС переходного контактного слоя «никель - теллурид висмута р-типа», обусловленная шероховатостью поверхности полупроводника, не зависит от толщины контактного слоя и составляет 176 мкВ/К.
4. Поскольку значение контактного сопротивления, которое приходится «назначать» с целью согласования реальных и расчетных значений параметров термоэлектрических модулей, на порядок больше приведенного в данной статье, то это свидетельствует, во-первых, о том, что основная часть контактного сопротивления не обусловлена шероховатостью поверхности полупроводника, во-вторых – о том, что существуют резервы уменьшения контактного сопротивления. Однако для их выявления и использования необходимы последующие углубленные теоретические и экспериментальные исследования механизмов формирования контактного сопротивления.

Литература

1. Anatyshuk L.I. Contact resistance between metal and thermoelectric material / Anatyshuk L.I., Dugaev V.K., Litvinov V.I., Volkov V.L. // Journal of Thermoelectricity. – 1994. – No 1. – P.70-77.
2. Da Silva L.W., Kaviany M. Micro-thermoelectric cooler: interfacial effects on thermal and electrical transport. // Int. Journ of Heat and Mass Transfer. – 2004, vol.478 – P.2417-2435.
3. Вихор Л.М. Электрическое сопротивление контакта термоэлектрический материал-металл / Вихор Л.М., Горский П.В. // Термоэлектричество. – 2015. – №2. – С.16-24.

4. Вихор Л.Н. Перенос тепла и электрического заряда на границе «термоэлектрический материал-металл» / Вихор Л.Н., Горский П.В. // Термоэлектричество. – 2015. – №6. – С.5-15.
5. Алиева Т.Д., Абдинов Д.Ш., Салаев Э.Ю. Влияние обработки поверхностей термоэлектрических материалов на свойства термоэлементов, изготовленных из твердых растворов $Bi_2Te_3 - Sb_2Te_3$ и $Bi_2Te_3 - Bi_2Se_3$ // Изв. АН СССР. Неорганические материалы. – 1981. – Т.17. – №10. – С.1773-1776.
6. Gupta R.P. Practical contact resistance measurement method for bulk Bi_2Te_3 -based thermoelectric devices / Gupta R.P., McCarty R., Sharp J. // J. of electron. mat. – 2013. – P.1-5 (doi: 10.1007/s11664-013-2806-6).
7. D. Ilzyser, A. Sher, M. Shilon. Electrical contacts to thermoelectric bismuth telluride based alloys / D. Ilzyser, A. Sher, M. Shilon // Third international conf. on thermoelectric energy conversion. – March 12-14, 1980. – P.200-202.
8. Белоногов Е.К. Модификация поверхности термоэлектрических ветвей на основе твердого раствора $Bi_2Te_3 - Bi_2Se_3$ методом импульсной фотонной обработки / Белоногов Е.К., Дыбов В.А., Костюченко А.В. и др. // Конденсированные среды и межфазные границы – 2017. – Т.19. – №4. – С.479-488.
9. Сабо Е.П. Технология халькогенных термоэлементов. Физические основы. Раздел 3. Технология коммутации веток термоэлемента. Продолжение. 3.5. Электрохимическая металлизация / Сабо Е.П. // Термоэлектричество. – 2011. – №1. – С.26-35.
10. Хольм Г. Электрические контакты / Г. Хольм. – М.: Иностран. лит., 1981. – 464 с.

Поступила в редакцию 24.08.2018.

P.V. Gorskiy, *Doctor Phys.-math. Science*

Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,

1, Nauky str, Chernivtsi, 58029, Ukraine,

e-mail: anatykh@gmail.com

²Yu.Fedkovych Chernivtsi National University,

2, Kotsiubynskyi str., Chernivtsi, 58012, Ukraine

IMINATION OF THE ELECTRICAL AND THERMAL CONTACT RESISTANCES AND THERMOEMF OF “THERMOELECTRIC MATERIAL-METAL” TRANSIENT CONTACT LAYER DUE TO SEMICONDUCTOR SURFACE ROUGHNESS

The impact of semiconductor surface roughness on the electrical and thermal contact resistances and thermoEMF of “thermoelectric material (TEM)-metal” transient contact layer is studied theoretically. The distribution of “hollows” and “humps” on the rough surface is simulated by the “truncated Gaussian distribution”. The impact of distribution parameters on the electrical contact resistance and thermoEMF of “thermoelectric material-metal” contact is studied. Specific numerical calculations and plotting is made for the case of bismuth telluride-nickel contact. It turned out that the electrical and thermal contact resistances and thermoEMF at low root-mean-square deviations of profile height nonmonotonically

depend on the average profile height, however, as the distribution of “hollows” and “humps” approaches the uniform, they tend to certain asymptotic values. In so doing, both the thermal and electrical contact resistances and thermoEMF increase at high relative values of the average profile height and decrease and its low values. *Bibl. 10, Fig. 5.*

Key words: electrical contact resistance, thermoEMF, surface roughness, transient layer, elementary bars, average value, root-mean-square deviation.

References

1. Anatyshuk L.I., Dugaev V.K., Litvinov V.I., Volkov V.L. (1994). Contact resistance between metal and thermoelectric material. *J. Thermoelectricity*, 1, 70-77.
2. Da Silva L.W., Kaviani M. (2004). Micro-thermoelectric cooler: interfacial effects on thermal and electrical transport. *Int. Journ of Heat and Mass Transfer*, 478, 2417-2435.
3. Vikhor L.M., Gorskiy P.V. (2015). Electrical resistance of “thermoelectric material-metal” contact. *J. Thermoelectricity*, 2, 16-24.
4. Vikhor L.M., Gorskiy P.V. (2015). Heat and charge transport at “thermoelectric material-metal” boundary. *J. Thermoelectricity*, 6, 5-15.
5. Alieva T.D., Abdinov D.Sh., Salaev E.Yu. (1981). Vlianiie obrabotki poverkhnociei termoelektricheskikh materialov na svoistva termoelementov izgotovlennykh iz tverdykh rastvorov $\text{Bi}_2\text{Te}_3 - \text{Sb}_2\text{Te}_3$ i $\text{Bi}_2\text{Te}_3 - \text{Bi}_2\text{Se}_3$ [The influence of processing of thermoelectric material surfaces on the properties of thermoelements made of $\text{Bi}_2\text{Te}_3 - \text{Sb}_2\text{Te}_3$ and $\text{Bi}_2\text{Te}_3 - \text{Bi}_2\text{Se}_3$ solid solutions]. *Izvestiia Akademii nauk SSSR. Neorganicheskie materialy – Bulletin of the USSR Academy of Sciences. Inorganic Materials*, 17(10), 1773-1776 [in Russian].
6. Gupta R.P., McCarty R., Sharp J. (2013). Practical contact resistance measurement method for bulk Bi_2Te_3 -based thermoelectric devices. *J. of Electron. Mat.*, 1-5 (doi: 10.1007/s11664-013-2806-6).
7. Ilzyser D., Sher A., Shilon M. (1980). Electrical contacts to thermoelectric bismuth telluride based alloys. Proc of Third International Conf. on Thermoelectric Energy Conversion (March 12-14, 1980), 200-202.
8. Belonogov E.K., Dybov V.A., Kostiuhenko A.V. et al. (2017). Modification of surface of thermoelectric legs based on $\text{Bi}_2\text{Te}_3 - \text{Bi}_2\text{Se}_3$ solid solution by pulse phonon treatment method. *Condensed Matter and Interphases*, 19(4), 479-488.
9. Sabo E.P. (2011). Technology of chalcogen thermoelements. Physical foundations. Section 3. Technology of connection of thermoelement legs. Continuation. 3.5. Electrochemical metallization. *J. Thermoelectricity*, 1, 26-35.
10. Holm R. (1981). Elektricheskie kontakty [Electrical contacts]. Moscow: Inostrannaya literatura [Russian transl].

Submitted 24.08.2018.