POLYPUBLIE

Simulations numériques du comportement thermomécanique de modules thermoélectriques

Thibaut Élie Clin

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

Date	2008
Type	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis Mémoire de maîtrise/Master's thesis
URL de PolyPublie PolyPublie URL	https://publications.polymtl.ca/8208/
Conditions d'utilisation Terms of use	© Tous droits réservés / All rights reserved
Référence Citation	Clin, T. É. (2008). Simulations numériques du comportement thermomécanique de modules thermoélectriques [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/8208/

Détails de la thèse
Thesis details

Directeurs de recherche Advisors	Sylvain Turenne
Programme Program	Non spécifié

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal
https://publications.polymtl.ca

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

SIMULATIONS NUMÉRIQUES DU COMPORTEMENT THERMOMÉCANIQUE DE MODULES THERMOÉLECTRIQUES

THIBAUT ÉLIE CLIN
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE MÉCANIQUE)
DÉCEMBRE 2008

© Thibaut Élie Clin, 2008

Library and Archives Canada

Published Heritage Branch

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque et Archives Canada

Direction du Patrimoine de l'édition

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence
ISBN: 978-0-494-48911-6
Our file Notre référence
ISBN: 978-0-494-48911-6

NOTICE:
The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:
L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

SIMULATIONS NUMÉRIQUES DU COMPORTEMENT THERMOMÉCANIQUE DE MODULES THERMOÉLECTRIQUES

présenté par : **CLIN Thibaut Élie**
en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. BALAZINSKI Marek, Ph.D., président
M. TURENNE Sylvain, Ph.D., membre et directeur de recherche
M. MASUT Remo A, Ph.D., membre

REMERCIEMENTS

Je voudrais remercier mon directeur de recherche, le Dr Sylvain Turenne, professeur titulaire au département de génie mécanique de l'École Polytechnique de Montréal, pour m'avoir permis de travailler sur ce projet et pour m'avoir encadré. J'ai apprécié l'autonomie qu'il m'a accordée, son sens critique, sa rigueur et son ouverture d'esprit.

J'aimerais également remercier mes collègues du Laboratoire de métallurgie des poudres, notamment le Dr Dimitry Vasilevskiy, Cédric André, Ouaheb Bourbia, Hao Yuan Chen, pour les conseils qu'ils m'ont donnés et leur sens du travail d'équipe.

Je remercie les gens avec qui je vis.

Ce travail de recherche a été financé par le Conseil de recherche en sciences naturelles et génie (CRSNG), par l'entremise du programme de projets stratégiques. Je les en remercie.

RÉSUMÉ

L'utilité des modules thermoélectriques s'accentue au fil du temps car la récupération d'énergie est devenue primordiale. Les deux modes de fonctionnement, générateur thermoélectrique ou absorbeur de chaleur, permettent aux modules thermoélectriques de toucher à de nombreux domaines. De plus, l'absence de pièces mobiles les rend fiables et durables. Les rendements de tels composants ne dépassent pas cependant 10%. Ils constituent donc d'excellentes sources d'énergie d'appoint. Les matériaux semi-conducteurs à la base des modules sont sujets à de nombreuses études sur les méthodes de fabrication et ainsi sur leur performance thermoélectrique et mécanique.

L'avantage des modules thermoélectriques réside dans leur faible taille, de l'ordre du millimètre ou moins en épaisseur, et de plusieurs millimètres en largeur. En mode Peltier, la différence de température entre les deux faces d'échange atteint environ 70°C, alors qu'en mode générateur, elle peut atteindre plusieurs centaines de degrés. La déformation thermomécanique devient importante et alors, les éléments thermoélectriques des modules sont sujets à des contraintes pouvant mener à la rupture. Il est donc préférable d'effectuer des simulations numériques modélisant le comportement thermomécanique des modules en opération. L'épaisseur des pattes est le facteur important sur les performances, mais l'augmentation des contraintes avec la diminution d'épaisseur impose une limite dimensionnelle. Dans le présent travail de recherche, une géométrie spécifique de module est mise en place et trois hauteurs de pattes sont analysées. Le modèle possède une symétrie pour le cas de matériau à propriétés mécaniques isotropes, mais non pour le modèle plus réaliste. On ne prend donc pas en compte cette symétrie.

Un module est au moins constitué de cinq matériaux différents dont les propriétés mécaniques sont très variées. Les matériaux thermoélectriques sont fabriqués par extrusion ce qui permet d'augmenter leur résistance mécanique, en comparaison avec les méthodes de croissance cristallographique. Cette méthode de fabrication leur donne une texture particulière jouant sur les propriétés élastiques et thermomécaniques du tellurure de bismuth.

La raison principale d'apparition des contraintes étant la dilatation thermique, l'écart de ce coefficient entre deux couches de matériaux ajoute des contraintes de cisaillement aux interfaces. La plasticité du cuivre et de l'alliage d'étain est prise en compte dans le modèle tandis que les autres matériaux ne sont sollicités que dans le domaine élastique. La faible résistance mécanique des pattes de tellurure de bismuth est compensée par le relâchement des contraintes dans les matériaux plastiques. Des simulations en régime permanent sont suffisantes pour modéliser ces comportements.

L'état de contraintes est observé à partir de la contrainte équivalente de Von Mises. Cette contrainte est obtenue à partir du second invariant du tenseur des contraintes et définit le niveau de cisaillement pouvant causer une déformation plastique ou un endommagement. La diminution d'épaisseur du module (réduction de la longueur des pattes) augmente la valeur maximale des contraintes de Von Mises. L'étude des contraintes dans le sens de l'épaisseur montre aussi des contraintes de compression du côté froid des pattes. On calcule des contraintes maximales proches de la limite à la rupture du matériau thermoélectrique pour un ΔT de l'ordre de 100°C. Par ailleurs, la comparaison des deux modèles (propriétés mécaniques des matériaux thermoélectriques isotropes et anisotropes) ne présente pas de grandes différences. Par conséquent, en utilisant un modèle symétrique, le maillage pourra être plus fin, pour ainsi améliorer la précision de la simulation par éléments finis.

ABSTRACT

Thermoelectrics modules utility increases nowadays because energy recovery has become very important. Modules are used in a lot of different fields because of their two functions, thermoelectric generator and heat absorber. Immobility of module's components gives reliability and durability. Because their efficiency is about 10%, they represent a very good backing supply of energy. Semi-conductor materials are subjected to specific research about fabrication, thermoelectric and mechanical performances.

Thermoelectric modules advantages are their small size, typically less than a millimeter in thickness and several millimeters in width. Ttemperatures difference between the two switching faces reaches 70°C when it is used as heat absorber. By using it in generator mode, temperature difference can reach several hundred degrees. Thermo mechanical strain becomes high and thermoelectric pellets undergo stresses that could lead to fracture. Therefore, numerical simulations of thermo mechanical behavior of modules under operating conditions are useful. Thickness of pellets is a very important parameter on performances, but increase of stresses with the diminution of module thickness imposes a dimensional limit. This research work presents a design study of specific module geometry. Influence of three thicknesses is analyzed. The symmetry of the module was not considered because the properties of the thermoelectric materials are not isotropic.

A module is constituted of five different materials having various mechanical properties. Thermoelectric materials are extruded so that they are more resistant than conventional ones fabricated by crystallographic growth. The hot extrusion method gives a particular texture that influences elastic and thermo mechanical properties.

Shear stresses appear in the legs of the module because of thermal expansion mismatch between different materials. Copper and tin alloy plasticity is taken into account while the other materials are strained only in the elastic domain. The weakness of thermoelectric legs is compensated by stress relaxation due to plastic deformation in other materials. Simulations in steady state are precise enough to model the module behavior.

Stress state is regarded as Von Mises equivalent stress. It is computed from the second deviatoric stress invariant and defines a shear stress level that can induce a plastic deformation or damages. Decrease of module's thickness (decrease of thermoelectric legs lengths) increases Von Mises stress value. Stresses study show compression of the legs at the cold face. Temperature gradient of 100°C was simulated and the resulting calculated stresses were close to the mechanical strength of the materials. Moreover, comparison between the two models (where mechanical properties are isotropic or anisotropic) doesn't show huge differences. Consequently, a symmetric model could be achieved to obtain finer mesh that would result in more accurate predictions.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS iv

RÉSUMÉ v

ABSTRACT vii

TABLE DES MATIÈRES ix

LISTE DES FIGURES xi

LISTE DES ÉQUATIONS xv

LISTE DES TABLEAUX xvi

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS xvii

INTRODUCTION 1

Chapitre 1 Revue des connaissances et de littérature 4

1.1 Théorie de la thermoélectricité des modules Peltier 4

1.1.1 Effets thermoélectriques 4

1.1.2 Equations régissant le fonctionnement d'un module Peltier 7

1.1.3 Figure de mérite et optimisation 10

1.2 Comportement thermomécanique des matériaux 20

1.2.1 Introduction 20

1.2.2 Thermomécanique des matériaux isotropes 22

1.2.3 Thermomécanique des matériaux orthotropes 27

1.3 Revues bibliographique sur les expériences et les simulations 33

1.3.1 Étude d'un modèle similaire 33

1.3.2 Première approche numérique sur un module Peltier 36

1.3.3 Simulation numérique d'un module 40
1.4 Caractérisation des matériaux 46
1.4.1 Caractérisation des propriétés thermoélectriques 46
1.4.2 Caractérisation des propriétés mécaniques 51
Chapitre 2 Introduction de l'article 56
2.1 Méthode numérique 56
2.2 Contenu de l'article 60
Chapitre 3 Numerical Simulation of the Thermomechanical Behavior of Extruded Bismuth Telluride Alloys Modules 61
Abstract 61
Introduction 63
Thermoelectric Materials Characteristics and Properties 66
Module Geometry and Numerical Simulation Parameters 71
Result of Numerical Simulations 76
Conclusions 88
Acknowledgment 88
References 88
Chapitre 4 Résultats complémentaires 88
Chapitre 5 Discussion générale 93
CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS 107
RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES 110

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1: Effet Seebeck. 4
Figure 1.2: Effet Peltier. 5
Figure 1.3: Effet Thomson. 5
Figure 1.4: Schéma d'un thermocouple. 7
Figure 1.5: Décomposition de l'équation du flux de chaleur absorbée. 10
Figure 1.6: Rendement pour un générateur en fonction de R_0/R[1]. 14
Figure 1.7: Puissance, courant et tension pour un générateur thermoélectrique en fonction de R_0/R et de R_c/R (0 et 0.2) [1]. 14
Figure 1.8: Modèle réel d'un thermocouple. 15
Figure 1.9: Variation de $D(x)$ en fonction de la résistance électrique de contact(A), de la résistance thermique de contact(B), de la résistance thermique (C) et de l'épaisseur de la céramique(D) [1]. 18
Figure 1.10: Procédé d'extrusion et structure cristalline du Bi_2Te_3. 21
Figure 1.11 : Représentation par résistance thermique. 21
Figure 1.12 : Schématisation de la dilatation thermique. 25
Figure 1.13 : Description des déformations dans la direction x. 26
Figure 1.14 : Contrainte résiduelle dû à l'anisotropie des coefficients de dilatation. 27
Figure 1.15 : Déformation d'un matériau orthotrope. 29
Figure 1.16: Plan de symétrie. 30
Figure 1.17 : Structure cristalline hexagonal. 30
Figure 1.18: Dimensions et maillage[14]. 34
Figure 1.19: Module d'Young en fonction de la température[14]. 34
Figure 1.20: Coefficient de Poisson et de dilatation thermique [14]. 35
Figure 1.21: Résultats des simulations [14]. 36
Figure 1.22: Générateur en cascade[16]. 37
Figure 1.23: Contraintes suivant z [16]. 38

Figure 1.24: Design des deux modules. À gauche à base de Mn-Si, à droite à base de Bi-Te [17]. 38
Figure 1.25 : Montage de mesure des performances [17]. 39
Figure 1.26: Simulation numérique [17]. 39
Figure 1.27 : Design et dimension du module étudié [18]. 40
Figure 1.28: Localisation de la zone étudiée [18]. 42
Figure 1.29: Comparaison de l'image prise au microscope et de la zone simulée [18]. 42
Figure 1.30: Module en mode absorption (a) et en mode générateur (b) [18]. 43
Figure 1.31: Comparaison de l'image prise au microscope et de la zone simulée [18]. 44
Figure 1.32: Mesure de la résistivité par les méthodes à quatre contacts et deux contacts. 46
Figure 1.33: Détermination du coefficient Seebeck par balayage d'une microsonde. ... 47
Figure 1.34: Mesure de la diffusivité thermique. 49
Figure 1.35: Mesure Harman. 50
Figure 1.36: Résultats de la mesure Harman pour un échantillon de Bi_2Te_3 de type n. . 51
Figure 1.37: Échantillon pour la mesure ultrason. 52
Figure 1.38: Échos de l'onde. 52
Figure 1.39: Eprouvette de traction de Sn-5%Sb [30]. 54
Figure 2.1 : Fonctions d'interpolation. 58
Figure 3.1: Coordinate system related to the extruded rod and cut disc. The grey portion on the disc illustrates (for one type, n or p) the quarter of the disc surface used for the fabrication of legs for a single module. The thickness of the cut disk corresponds to the length of the legs. A similar portion from the material of the opposite type is also necessary to fabricate the module. 67
Figure 3.2: Variation of elastic stiffness constants along the radius of the extruded rod (R= 1.27 mm). The numbers refer to positions of legs in the disc

(see details for the anisotropic simulation and Figure 3.5). The intersection of the vertical line associated with each number and the curve corresponding to a given property indicates the value of that property for a given position of the leg in the module. 70

Figure 3.3: Geometry of the TE module simulated numerically (without the upper alumina substrate). 72

Figure 3.4: Meshing of the TE module showing the relative size of the elements for legs of 1 mm. 73

Figure 3.5: Map of p- and n-type legs showing how their properties are related to their position in the extruded rod. A given number indicates the same elastic stiffness constants, whose values can be obtained from Figure 3.2. The upper left corner corresponds to the center of the extruded rod. ... 74

Figure 3.6: Von Mises stress distribution in a module subjected to a temperature difference of 100°C while keeping unconstrained surfaces (cold side on the bottom). The top alumina substrate is included in simulation but not shown. The red color represents higher calculated Von Mises stress values 77

Figure 3.7: a) Stress distribution along a line passing through the corners of the legs located in the direction of the arrow, as shown in the module representation (b). Stress values are given at each node of the mesh for the hot side of the legs in a free standing module, for the three ΔT values simulated. 78

Figure 3.8: Magnified deformation of modules (one p-n couple shown) under boundary conditions a) free-standing (legs of 500 µm), b) cold side ceramic surface anchored (legs of 500 µm) and c) hot side anchored (legs of 250 µm). Deformation amplification factor: 75. The color code indicates the Von Mises stress levels (red: higher value, blue: lower value) 81

Figure 4.1 : Influence de l'épaisseur de cuivre : a) 400 µm b) 100 µm 88

Figure 4.2 : Design d'un thermocouple et distribution de température. 90
Figure 4.3 : Influence de la de section et de la hauteur des pattes (ΔT=130°C)..... 91
Figure 4.4 : Étude de convergence..... 92
Figure 5.1 : Contraintes de compression σ_{zz} (échelle en Pascal), axe z parallèle aux pattes : (a) face inférieure froide brasée et pattes de 1mm, (b) faces libres et pattes de 1mm, (c) face chaude brasée et pattes de 0.5mm..... 94
Figure 5.2 : Sens de numérotation des nœuds indiqués par la flèche. 95
Figure 5.3 : Variation de la contrainte de Von Mises : a) pattes de 0.5mm ; b) pattes de 0.25mm..... 96
Figure 5.4 : Déformation thermique de cisaillement ε_{xy} (déformation dans la direction y sur un plan de normale x) dans le repère global. 97
Figure 5.5 : Déformation ε_{xy} totale au niveau des connecteurs d'étain, pattes de 1mm, face chaude brasée. 99
Figure 5.6 : Déformation ε_{xz} totale au niveau des connecteurs d'étain, pattes de 1mm, face chaude brasée. 99
Figure 5.7 : Déformation ε_{yz} totale au niveau des connecteurs d'étain, pattes de 1mm, face chaude brasée. 100
Figure 5.8 : Déformation thermique ε_{rr}..... 101
Figure 5.9 : a) déplacements u_r ; b) ε_{rr} élastique du côté chaud pour une configuration module libre possédant de pattes de 1mm ; c) ε_{rr} totale pour la même configuration. 103
Figure 5.10 : ε_{rr} élastique pour un module libre possédant des pattes de 0.25mm..... 104

LISTE DES ÉQUATIONS

Équation 1.2 : Gradient de flux thermique au sein du matériau. 6
Équation 1.3: Relations de Kelvin. 6
Équation 1.4 : Définition de la force thermoélectrique 6
Équation 1.6 : Équations de conservation. 8
Équation 1.8 : Flux de chaleur dans chaque patte 9
Équation 1.9 : Flux de chaleur total. 9
Équation 1.10 : Conductance thermique et résistance électrique total d'un thermocouple. 9
Équation 1.11 : Courant maximal. 10
Équation 1.12 : Flux de chaleur maximal. 10
Équation 1.13 : Écart de température maximal. 11
Équation 1.14 : Figure de mérite 11
Équation 1.19 : Coefficient de performance. 12
Équation 1.20 : Courant maximal et coefficient de performance maximal. 13
Équation 1.27 : Loi de Fourier pour un thermocouple 22
Équation 1.29 : Relation déformation-contrainte 23
Équation 1.38 : Relation contrainte déformation pour un matériau orthotrope. 28
Équation 1.40 : Matrice de raideur d'un matériau isotrope transverse 31
Équation 1.41 : Matrice de souplesse. 31
Équation 1.43 : Constantes d'ingénieures. 32
Équation 2.2 : Équation de continuité de la charge électrique. 56
Équation 2.3 : Couplage des équations. 57
Équation 2.7 : Forme matricielle 59
Équation 2.8 : Matrices thermoélectriques. 59
Équation 2.9 : Matrices thermomécaniques. 59

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1: Propriétés électriques, thermiques, thermoélectriques, mécaniques [18]. 41
Tableau 1.2: Variation des propriétés du PbSn en fonction de la température [18]. 41
Tableau 1.3: Erreur entre la mesure et la simulation [18] 45
Tableau 1.4 Constantes élastiques du tellurure de bismuth[26] 53
Tableau 3.1: Properties of p- and n-type bismuth telluride based alloys used for numerical simulations. Ranges of values of TE properties correspond to their variation between 20 and 120°C. 68
Tableau 3.2: Properties of other materials used in module assembly. 75
Tableau 3.3: Maximum Von Mises stress (MPa) in different module configurations for a temperature difference of 100°C between the hot and cold sides. 79
Tableau 5.1 : Déformations mécaniques et totales. 105

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Thermoélectrique

T	Température
$\alpha_{a,b}$	Coefficient de Seebeck du matériau a ou b
$\pi_{a,b}$	Coefficient Peltier du matériau a ou b
$\tau_{a,b}$	Coefficient Thomson du matériau a ou b
V_α	Potentiel thermoélectrique
Q	Chaleur fournie ou absorbée totale
J	Densité de courant
α_D	Force thermoélectrique due à la diffusion des électrons
α_n	Force thermoélectrique due à la concentration des porteurs de charges
α_F	Force thermoélectrique due au niveau de Fermi
μ	Mobilité
q	Charge électrique
D	Coefficient de diffusion
k	Constante de Boltzmann
$\lambda_{n,p}$	Conductivité thermique
$\rho_{n,p}$	Résistivité électrique
$A_{n,p}$	Section des pattes des semi-conducteurs
l_0	Épaisseur des pattes des semi-conducteurs
λ	Conductance thermique totale des pattes des semi-conducteurs
R_0	Résistance électrique totale des pattes des semi-conducteurs
$q_{n,p}$	Flux de chaleur traversant la patte n ou p
Q_π	Flux de chaleur dû à l'effet Peltier
Q_λ	Flux de chaleur dû à la conduction de chaleur

Q_ρ	Flux de chaleur dû à l'effet Joule
Φ	Coefficient de performance du module Peltier
Z	Figure de mérite
ZT	Figure de mérite adimensionnelle
W	Puissance électrique fournie ou récupérée
I_{max}	Courant maximal applicable au module
$Q\ max$	Chaleur maximale absorbée
$T\ max$	Différence de température applicable
Tm	Température moyenne du module
P_{c0}	Puissance de sortie prenant en compte la résistance de contact
R_c	Résistance de contact
η	Rendement d'un module générateur
σ	Conductance électrique
r	Rapport de conductivité thermique
w	Rapport d'épaisseur
R	Résistance électrique totale

Mécanique

Φ	Flux de chaleur
$R_{C,SC,e,Cu}$	Résistance thermique des composants d'un module
$l_{C,SC,e,Cu}$	Épaisseur des composants d'un module
$S_{C,SC,e,Cu}$	Section des composants d'un module
ε_{ij}	Tenseur de déformation
σ_{ij}	Tenseur des contraintes
δ_{ij}	Indice de Kronecker
α	Coefficient de dilatation thermique
E	Module d'Young
υ	Coefficient de poisson

C_{ijkl}	Matrice de raideur
S_{ijkl}	Matrice de souplesse
K	Module d'élasticité volumique
μ	Module de cisaillement
λ	Module de Lamé
ε_{th}	Déformation thermique
ε_{el}	Déformation élastique
ρ	Masse volumique
C_p	Chaleur spécifique
D	Coefficient de diffusion thermique
t	Temps
m	Masse
v	Vitesse de l'onde ultrason

Numérique

$\dot{q}$	Génération de chaleur par unité de volume W/m^3
q	Flux de chaleur W/m^2
J	Vecteur de densité de courant A/m^2
E	Vecteur d'intensité du champ électrique V/m
D	Vecteur de densité électrique C/m^2
$[\lambda]$	Matrice de conductivité thermique $W/m \cdot K$
$[\sigma]$	Matrice de conductivité électrique S/m
$[\alpha]$	Matrice de coefficient de Seebeck V/K
$[\Pi]=T[\alpha]$	Matrice de coefficient Peltier V
$[\varepsilon]$	Matrice de permittivité diélectrique F/m
$[B]$	Matrice de relation déplacement-déformation

$\{\beta\} = [D]\{\alpha\}$	Vecteur des coefficients thermo élastique
$[D]$	Matrice de rigidité élastique
u	Vecteur des déplacements
T	Vecteur des températures
F	Vecteur de somme des forces nodales élémentaires
Q	Vecteur de somme des flux de chaleur générés élémentaires

INTRODUCTION

Les modules thermoélectriques sont des dispositifs qui permettent de convertir de l'énergie thermique en énergie électrique, et inversement. À la base de ces modules, on utilise des éléments de matériaux semi-conducteurs de types n et p qui sont connectés en série d'un point de vue électrique et en parallèle d'un point de vue thermique. L'effet Peltier est mis en évidence dans les applications de refroidisseurs ; en faisant circuler un courant à travers les éléments du module, on génère une différence de température sur les deux faces du module. On peut ainsi utiliser de tels modules pour refroidir des composants électroniques par exemple en brasant le côté froid du module au composant duquel on veut retirer la chaleur. À l'inverse, lorsque les deux faces d'un module sont exposées à des températures différentes, un courant électrique est généré; le module fonctionne alors comme un générateur d'électricité.

Les éléments semi-conducteurs qui sont couramment utilisés dans les modules opérant autour de la température ambiante sont constitués d'alliages à base de tellurures de bismuth (Bi_2Te_3). La méthode conventionnelle pour élaborer de tels alliages est basée sur la solidification dirigée qui permet de produire des cristaux allongés. La méthode de fabrication développée au laboratoire de recherche de l'École Polytechnique suit plutôt une approche de métallurgie des poudres. La mécanosynthèse permet d'élaborer les alliages alors que l'extrusion à chaud mène à la production de tiges qui peuvent par la suite être découpées pour obtenir les éléments, ou pattes, des modules. L'extrusion de poudre permet non seulement d'obtenir un alliage texturé avec des propriétés favorables dans le sens de l'axe d'extrusion mais aussi une microstructure à très petits grains, procurant au matériau des propriétés mécaniques largement supérieures à celle des matériaux obtenus par solidification dirigée.

Il est possible de tirer avantage de cette meilleure résistance mécanique lorsqu'on veut produire des modules thermoélectriques plus minces (pattes plus courtes). Avec de tels modules, on peut en effet démontrer que l'on obtient une densité de puissance (chaleur pompée) qui augmente en amincissant le module. Cependant, un inconvénient important survient lors de la réduction d'épaisseur d'un module. Si celui-ci est exposé à un même intervalle de température qu'un module plus épais, le gradient thermique plus élevé à travers le module entraîne aussi un gradient de contrainte mécanique plus important. Les contraintes générées proviennent principalement de l'assemblage des différents matériaux qui constituent le module. Les variations de coefficient de dilatation conduisent à l'apparition de contraintes de tension et de cisaillement qui peuvent être supérieures à la résistance mécanique des éléments et ainsi limiter la possibilité de diminuer l'épaisseur du module. Aussi, l'anisotropie des propriétés thermoélectriques peut être la source de contraintes générées par un gradient de température.

C'est donc ici que se situe l'objectif du présent travail de recherche. Le but des travaux consiste à simuler numériquement le comportement thermomécanique du module dans des conditions typiques d'opération. Les données particulières des alliages anisotropes développés à l'École Polytechnique seront utilisées. On utilisera aussi comme principale variable différentes longueurs des pattes du module (250, 500 et 1000 μm) afin d'évaluer l'influence de ce paramètre sur l'amplitude des contraintes générées. L'autre variable importante consiste au mode de fixation des surfaces du module. On considérera des faces libres et brasées.

Le présent mémoire se compose d'un premier chapitre portant sur une revue bibliographique qui inclut une description théorique de la thermoélectricité, du comportement élastique isotrope et plastique des composants d'un module ainsi que les propriétés anisotropes du Bi_2Te_3. La dernière partie du chapitre 1 présente quelques résultats de simulation numérique du comportement des modules. Le chapitre 2 présente le contexte du chapitre 3 qui prend la forme d'un article qui a été présenté dans une

conférence internationale et dans la revue *Journal of Electronic Materials*. Le dernier chapitre expose des résultats complémentaires à l'article de simulations numériques permettant de mieux comprendre le comportement du module. Une attention particulière est portée à la description des niveaux de contrainte à l'interface entre les pattes du module et les connecteurs électriques.

Chapitre 1 Revue des connaissances et de littérature

1.1 Théorie de la thermoélectricité des modules Peltier

1.1.1 Effets thermoélectriques

Les effets thermoélectriques sont des phénomènes physiques et sont au nombre de trois. Ils sont tous découverts au cours du XIX^{ème} siècle. L'effet Seebeck est découvert en 1821 par Thomas Johann Seebeck. Jean Peltier découvre l'effet Peltier en 1834 et enfin William Thomson démontre l'existence d'un lien entre les deux effets précédents en 1851. Les Figure 1.1, Figure 1.2, Figure 1.3 décrivent ces trois phénomènes :

- Effet Seebeck (génération de tension)
- Effet Peltier (absorption de chaleur)
- Effet Thomson (chaleur absorbée ou dégagée en présence d'un courant et d'un gradient de température dans un matériau)

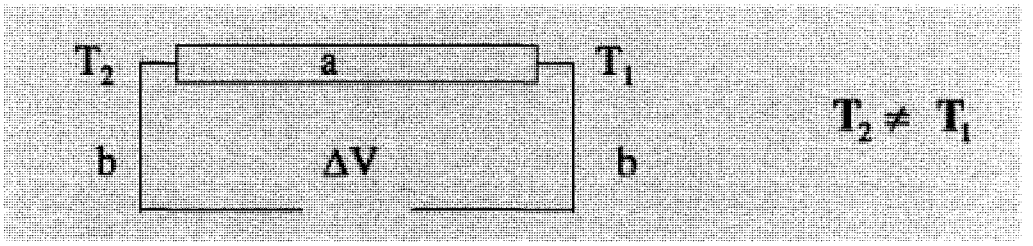


Figure 1.1: Effet Seebeck.

$$\Delta V = (\alpha_a - \alpha_b) \times (T_2 - T_1) = V_\alpha$$

Équation 1.1

L'effet Seebeck permet de créer une différence de potentiel ΔV en présence d'une différence de température $\Delta T=T_2-T_1$ aux deux extrémités du conducteur a, à la jonction

du matériau b. α_a et α_b sont les pouvoirs thermoélectriques des matériaux a et b. Les thermocouples utilisent directement ce principe.

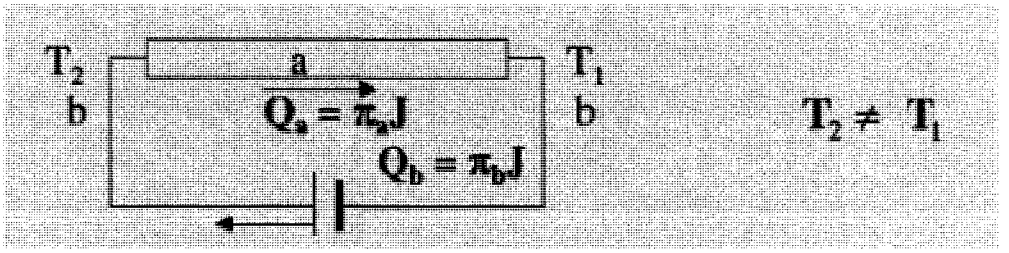


Figure 1.2: Effet Peltier.

Tel qu'illustré à la Figure 1.2, l'application d'un courant $I = \iint_S JdS$ dans une jonction de deux matériaux a et b s'accompagne d'une chaleur émise et absorbée aux extrémités du matériau a. Les coefficients Peltier des matériaux a et b, π_a et π_b, permettent d'évaluer la chaleur qui traverse le système par l'équation $Q = (\pi_a - \pi_b) \times J$. La direction dans laquelle la jonction est traversée et le signe de π_a et π_b déterminent si la chaleur est absorbée ou libérée. L'effet Peltier, phénomène réversible, n'est pas fonction de la forme ou dimension de la jonction contrairement à l'effet Joule, phénomène irréversible, qui ne requiert pas de jonction et qui est fonction des dimensions.

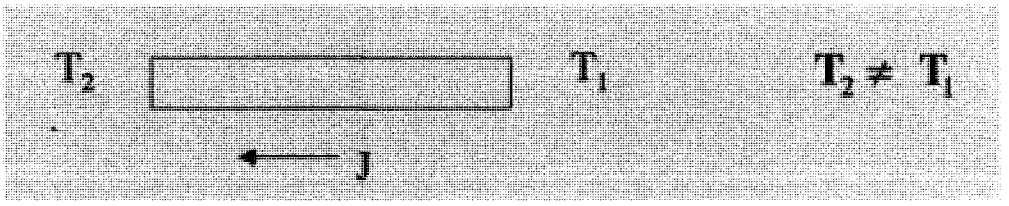


Figure 1.3: Effet Thomson.

Lorsqu'une densité de courant J traverse un matériau soumis a un gradient de température, on peut définir une chaleur absorbée ou dégagée par unité de temps dans

chaque segment dx du matériau. Le paramètre τ est le coefficient Thomson. Aucune jonction n'est nécessaire, comme le montre la Figure 1.3, à la différence des effets Peltier et Seebeck.

$$\frac{dQ}{dx} = \tau \times J \times \frac{dT}{dx}$$

Équation 1.2 : Gradient de flux thermique au sein du matériau.

Ces trois effets sont relies entre eux par les relations de Kelvin (Lord Kelvin = William Thomson), 1855:

$$\tau_a - \tau_b = T\frac{d\alpha_{ab}}{dT} \;;\; \pi_{ab} = \alpha_{ab} \times T$$

Équation 1.3: Relations de Kelvin.

Les matériaux pris en compte sont des semi-conducteurs ayant donc des électrons ou des trous en excès. Le matériau est forcément soumis à un gradient de température et à un champ électrique. Les électrons sont soumis à un courant de dérive, ou loi d'Ohm, provenant du champ électrique et un courant de diffusion lié au gradient de température. Les électrons sont attirés par la source chaude. Les paramètres régissant les calculs de courant sont la mobilité des électrons, la concentration des porteurs de charges n, le coefficient de diffusion D des électrons ainsi que les niveaux de Fermi F. Les équations de continuité et de Poisson, avec ces équations de courant, forment les équations d'évolution. La force thermoélectrique, ou coefficient de Seebeck α, est fonction de la variation des paramètres α_D, α_n et α_F. Ces coefficients sont les variations de α par rapport au coefficient de diffusion, à la concentration de porteurs et au déplacement du niveau de Fermi.

$$\alpha = \alpha_D + \alpha_n + \alpha_F$$

Équation 1.4 : Définition de la force thermoélectrique.

Avant d'établir l'Équation **1.4** on utilise la relation d'Einstein $\mu_n = q\frac{D_n}{kT}$ (indice n pour le type n), qui utilise la caractéristique de la mobilité qui est fonction de la température ou de l'énergie, qui est elle-même proportionnelle à la température.

Les modules thermoélectriques fonctionnent donc sur ces trois effets en absorption de chaleur ou en génération de courant. Le matériau b est du cuivre et le matériau a est le semi-conducteur de type n ou de type p. Les semi-conducteurs sont brasés au cuivre avec un alliage d'étain. Nous allons voir plus en détail les particularités des modules du point de vue design et performance.

1.1.2 Equations régissant le fonctionnement d'un module Peltier

Ces modules sont formés d'une jonction métallique du côté froid ainsi que du côté chaud. La jonction chaude est à une température proche de l'ambiante. En faisant traverser la jonction par un courant venant du type n vers le type p, le module fonctionne en mode d'absorption de chaleur. Les pattes des conducteurs possèdent une épaisseur commune l_0 et des sections A_p et A_n respectivement pour les pattes de type p et n. Les pattes sont reliées en série électriquement et en parallèle thermiquement.

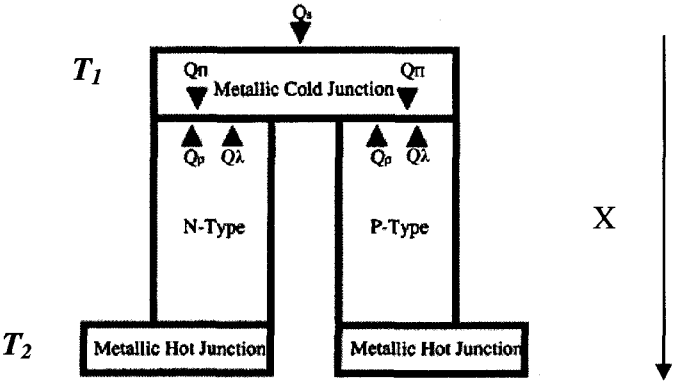


Figure 1.4: Schéma d'un thermocouple.

Ceci est le modèle idéal. On peut donc écrire pour chaque patte le flux de chaleur la traversant et provenant de la source vers le dissipateur thermique [1].

$$Q_p = \alpha_p IT - \lambda_p A_p \frac{dT}{dx} \;;\; Q_n = \alpha_n IT - \lambda_n A_n \frac{dT}{dx}$$

Équation 1.5

La chaleur Peltier est opposée à la conduction de chaleur. Dans le cas de génération de puissance, la chaleur Peltier et la chaleur par conduction sont de même signe. La création de chaleur par unité de longueur due à l'effet Joule dans chaque branche peut être déterminée par l'équation de conservation d'énergie:

$$-\lambda_p A_p \frac{d^2T}{dx^2} = I^2 \frac{\rho_p}{A_p} \;;\; -\lambda_n A_n \frac{d^2T}{dx^2} = I^2 \frac{\rho_n}{A_n}$$

Équation 1.6 : Équations de conservation.

On applique les conditions limites suivantes : $T=T_1$ à $x=0$ et $T=T_2$ à $x=l_0$ et on résout les Équation **1.6**:

$$\lambda_p A_p \frac{dT}{dx} = -I^2 \frac{\rho_p}{A_p} \times (x - l_0/2) + \frac{\lambda_p A_p \times (T_2 - T_1)}{l_0}$$

$$\lambda_n A_n \frac{dT}{dx} = -I^2 \frac{\rho_n}{A_n} \times (x - l_0/2) + \frac{\lambda_n A_n \times (T_2 - T_1)}{l_0}$$

Équation 1.7

On obtient le flux de chaleur à $x=0$ en combinant les Équation **1.5** et Équation **1.7** $\lambda_p A_p \frac{dT}{dx} = -I^2 \frac{\rho_p}{A_p} \times (x - l_0/2) + \frac{\lambda_p A_p \times (T_2 - T_1)}{l_0}$:

$$Q_p = \Pi_p \times I \times T_1 - \lambda_p \times \frac{A_p}{l_0} \times \Delta T - \frac{1}{2} \times I^2 \times \rho_p \times \frac{l_0}{A_p}$$

$$Q_n = -\Pi_n \times I \times T_1 - \lambda_n \times \frac{A_n}{l_0} \times \Delta T - \frac{1}{2} \times I^2 \times \rho_n \times \frac{l_0}{A_n}$$

Équation 1.8 : Flux de chaleur dans chaque patte.

On retrouve les trois flux de chaleurs différents dans les deux pattes. Le flux de chaleur absorbé total, soit la puissance de refroidissement en régime permanent, est la somme de Q_p et Q_n.

$$Q = (\alpha_p - \alpha_n) I T_1 - \lambda \Delta T - \tfrac{1}{2} I^2 R_0$$

Équation 1.9 : Flux de chaleur total.

$$\lambda = \lambda_p \times \frac{A_p}{l_0} + \lambda_n \times \frac{A_n}{l_0} \text{ et } R_0 = \rho_p \times \frac{l_0}{A_p} + \rho_n \times \frac{l_0}{A_n}$$

Équation 1.10 : Conductance thermique et résistance électrique total d'un thermocouple.

On voit sur la Figure 1.4 le sens des flèches indiquant le sens du flux de chaleur. Il y en a trois différents : flux dû à l'effet Peltier $Q\pi$, flux dû à la conduction $Q\lambda$ et flux dû à l'effet Joule $Q\rho$. Un modèle en régime transitoire est aussi définissable [2]. On peut suivre l'évolution de la température froide ou chaude avec le temps.

1.1.3 Figure de mérite et optimisation

$$Q = (\alpha_p - \alpha_n) I T_1 - \lambda \Delta T - \tfrac{1}{2} I^2 R_0$$

Équation 1.9 nous indique que la chaleur Peltier varie linéairement avec le courant *I*. La chaleur joule est en I^2. Il existe donc une valeur précise de *I* pour laquelle la chaleur absorbée est maximale.

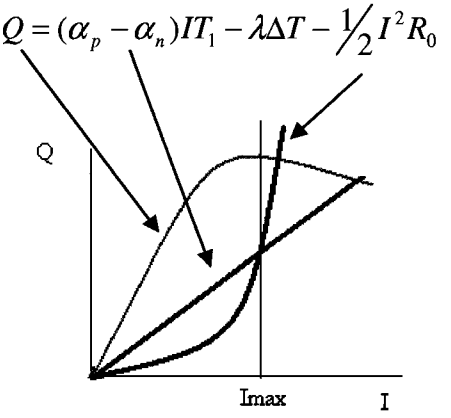


Figure 1.5: Décomposition de l'équation du flux de chaleur absorbée.

En résolvant $\frac{dQ}{dI} = 0$ on trouve la valeur d'I_{max} pour une valeur de Qmax :

$$I_{max} = (\frac{\alpha_p - \alpha_n}{R_0}) \times T_1$$

Équation 1.11 : Courant maximal.

Et donc

$$Q\max = \frac{(\alpha_p - \alpha_n)^2}{2R_0} T_1^{\,2} - \lambda \Delta T$$

Équation 1.12 : Flux de chaleur maximal.

On remarque que si la différence de température est trop élevée, le pouvoir de refroidissement sera négatif, donc on trouve ΔT max lorsque Qmax=*0* :

$$\Delta T \max = \frac{(\alpha_p - \alpha_n)^2}{2\lambda R_0} T_1^2$$

Équation 1.13 : Écart de température maximal.

On définit ainsi la figure de mérite du thermocouple comme suit :

$$Z = \frac{(\alpha_p - \alpha_n)^2}{\lambda \times R_0}$$

Équation 1.14 : Figure de mérite.

Et on peut réécrire l'Équation **1.13** :

$$\Delta T \max = \frac{1}{2} \times Z \times T_1^2$$

Équation 1.15

La figure de mérite Z est donc le facteur de performance d'une configuration particulière d'un thermocouple puisqu'il prend en compte les dimensions dans la résistance électrique et conductance thermique. C'est la figure de mérite du couple et non du matériau. Afin d'optimiser cette figure de mérite, il faut bien sur minimiser le produit λR. En augmentant le rapport de longueur sur section des pattes du module, R augmente. Afin d'optimiser la figure de mérite par rapport au produit λR de façon a le rendre minimal, on trouve le rapport sur les sections donné dans l'Équation **1.16**:

$$\frac{A_p}{A_n} = \left(\frac{\rho_p \lambda_n}{\rho_n \lambda_p} \right)^{1/2}$$

Équation 1.16

En pratique, dans un module, les sections des pattes n et p sont identiques. Les équations précédentes sont valides pour le modèle idéal car il ne prend en compte que

les propriétés des matériaux semi-conducteurs. Il est possible de considérer la figure de mérite de la paire de matériaux sans prendre en compte les dimensions mais seulement les propriétés des matériaux:

$$Z = \left(\frac{(\alpha_p - \alpha_n)}{(\lambda_p \rho_p)^{1/2} + (\lambda_n \rho_n)^{1/2}} \right)^2$$

Équation 1.17

De ce fait, on peut parler de la figure de mérite d'un semi-conducteur de type p ou n séparément.

On peut maintenant définir le coefficient de performance Φ dans l'Équation **1.19,** d'un module de refroidissement. On fournit au module l'énergie électrique :

$$W = U \times I = (\alpha_p - \alpha_n) I (T_2 - T_1) + R_0 \times I^2$$

Équation 1.18

Le coefficient de performance est donc :

$$\Phi = Q/W = \frac{(\alpha_p - \alpha_n) I T_1 - \lambda \Delta T - 1/2 I^2 R_0}{(\alpha_p - \alpha_n) I \Delta T + R_0 I^2}$$

Équation 1.19 : Coefficient de performance.

Ce coefficient de performance possède un maximum que l'on trouve en résolvant $d\Phi/dI = 0$. On trouve un courant I_Φ et un coefficient de performance Φ_{max} valant :

$$I_{\Phi} = \frac{(\alpha_p - \alpha_n)(T_2 - T_1)}{R_0\left((1+ZTm)^{1/2} - 1\right)}$$

$$\Phi_{max} = \frac{T_1\left[(1+ZTm)^{1/2} - T_2/T_1\right]}{(T_2 - T_1)\left[(1+ZTm)^{1/2} + 1\right]} \quad ; Tm = \frac{T_1 + T_2}{2}$$

Équation 1.20 : Courant maximal et coefficient de performance maximal.

Ce coefficient de performance est lié à la capacité de refroidissement du couple de matériaux. On peut aussi définir un facteur d'efficacité pour les modules de génération On inverse le rapport du coefficient de performance en W/Q. De plus, il faut remplacer la source de courant par une résistance. Celle-ci entre en compte dans le calcul de l'énergie électrique récupérée et plus précisément dans le calcul du courant généré. Il faut remarquer par ailleurs que la valeur de la résistance de sortie doit avoir une valeur précise que l'on obtient grâce à une nouvelle optimisation. La valeur de la résistance de sortie est proche ou égale à celle du circuit interne du module. Cette valeur permet d'obtenir la valeur maximale de la puissance électrique par unité de surface, grandeur plus représentative de la puissance générée pour le module de génération. Le circuit électrique étant constitué d'un assemblage en série de pattes de types n et p, si on considère *N* couples, on peut multiplier par *N* la tension, la résistance interne et le flux de chaleur fourni. L'Équation **1.21** définit un rendement pour *N* thermocouples, identiques à celui d'un thermocouple:

$$\eta_N = \eta = \frac{R_0 I^2}{((\alpha_p - \alpha_n) I T_h + \lambda \Delta T - \frac{1}{2} I^2 R)}$$

Équation 1.21

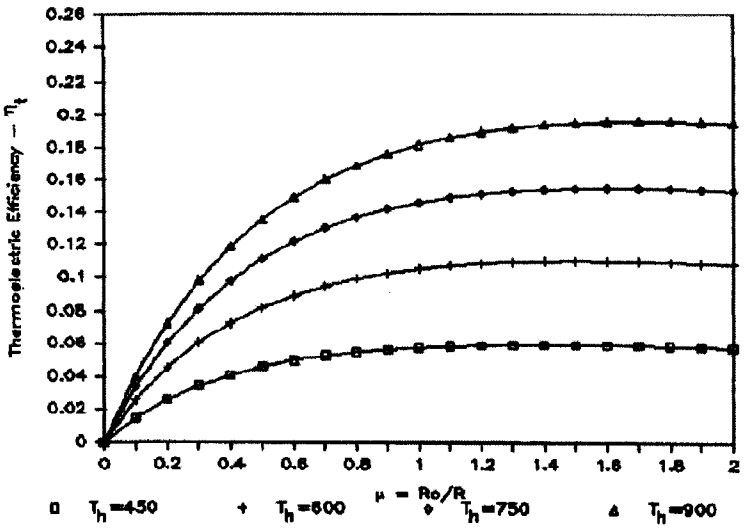


Figure 1.6: Rendement pour un générateur en fonction de R_0/R[1].

La Figure 1.6 expose l'évolution du rendement en fonction de R_0/R et de la température chaude. Ce rendement est fonction du rendement connu de Carnot $(T_2-T_1)/T_2$ qui augmente avec l'imposition de la température chaude. Ici la figure de mérite vaut 2.2×10^{-3} K^{-1}.

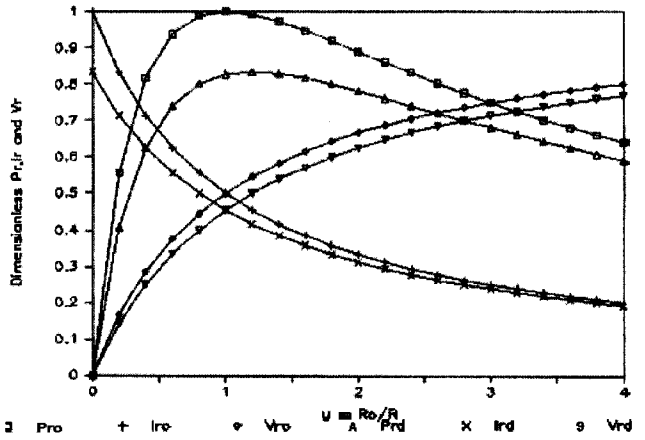


Figure 1.7: Puissance, courant et tension pour un générateur thermoélectrique en fonction de R_0/R et de R_c/R (0 et 0.2) [1].

En mode générateur thermoélectrique, les résultats théoriques de l'optimisation sur la puissance de sortie par rapport à la résistance donnent pour $\mu = R_0/R$ une valeur de 1 comme le montre la Figure 1.7. C'est le rapport optimal pour la puissance électrique de sortie. La valeur optimale dépend aussi de la résistance de contact R_c.

L'étude théorique d'un couple de matériaux thermoélectriques n-p a permis de mettre en évidence les paramètres importants dans l'optimisation de l'efficacité d'un module Peltier ou de la puissance recueillie par un module de génération. Toutefois, seule la paire de matériaux a été prise en compte dans le calcul. En réalité, les résistances des autres matériaux doivent être pris en compte ainsi que les résistances de contact électriques et thermiques influençant les performances des modules [3]. Un module est composé d'une plaque de céramique, isolant électrique, une couche de cuivre, une couche d'alliage d'étain, une couche de nickel très fine, servant de barrière de diffusion de l'étain dans le matériau semi-conducteur. La Figure 1.8 représente le modèle réel.

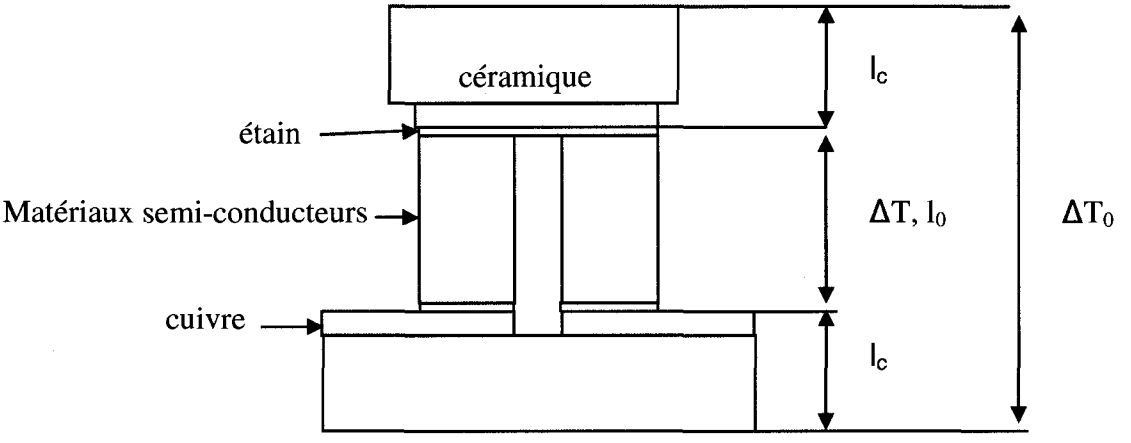


Figure 1.8: Modèle réel d'un thermocouple.

Comme on l'a dit précédemment, le circuit électrique est en série tandis que le circuit thermique est en parallèle. Des modèles prenant en compte les résistances électriques et thermiques des différents matériaux sont mis en place afin d'étudier les performances [4,5]. Une analogie entre le circuit électrique et thermique est possible. On pourra définir les résistances thermiques comme à l'Équation **1.27** présentée plus loin.

- Flux de chaleur (W), courant (A)
- Température (K), tension (V)
- Conductivité thermique ($Wm^{-1}K^{-1}$), conductivité électrique ($\Omega^{-1}m^{-1}$)
- Masse thermique (J/K), condensateur électrique (F)

Il faut ajouter qu'il y a plusieurs contacts : entre étain et semi-conducteur, cuivre-étain, et cuivre-céramique, ce dernier étant un contact thermique uniquement. Toutefois, on peut considérer quatre contacts électriques importants par thermocouple. On prend le cas de génération d'électricité. Pour un model idéal, la puissance maximale vaut :

$$W = \frac{(2\alpha\Delta T_0)^2}{4R_0}$$

Équation 1.22

Avec $R_0 = 2\rho\frac{l_0}{A_0}$ la résistance électrique totale du thermocouple.

Concernant le modèle réel, le ΔT connu est celui au bord des deux plaques de céramiques. On a donc :

$$\Delta T = \frac{\Delta T_0}{1+2\left(\lambda/\lambda_c\right)\left(l_c/l_0\right)}\text{, on prend } r = \frac{\lambda}{\lambda_c} \text{ et } w = \frac{l_c}{l_0}$$

Équation 1.23

En prenant en compte de la même manière les résistances de contact tel que $R=R_0+R_c$,

$$R = 2\rho\left(\frac{l_0}{A_0}\right)\left(1+\frac{n}{l_0}\right) \quad n=2\rho_c/\rho,\ R_c=4\rho_c/A_0$$

Équation 1.24

En effectuant la substitution de l'Équation **1.23** et **1.24** dans l'Équation **1.22,** on trouve :

$$P_{c0} = \frac{W}{(1+{}^{n}\!/_{l_0})(1+2rw)^2}$$

Équation 1.25

L'Équation **1.25** permet de définir le rapport $D(x)$ valant P_c/W. Il définit la variation relative de puissance d'un modèle ayant un rapport de section sur longueur A/L avec le modèle idéal ayant un rapport A_0/L_0.

$$D(x) = \frac{P_c}{W} = \frac{ax^2}{\left(x+{}^{n}\!/_{l_0}\right)(x+2rw)^2} \quad \text{avec } a=A/A_0 \text{ et } x=l/l_0$$

Équation 1.26

P_c est donc la puissance de sortie d'un modèle réel ayant pour référence un modèle idéal. La Figure 1.19 montre l'évolution de $D(x)$ en fonction de x. La référence du modèle idéal est présente sur chaque graphe. Ces résultats montrent que la puissance de sortie augmente avec le raccourcissement des pattes jusqu'à atteindre un maximum puis baisse avec la réduction de la longueur. Un travail d'optimisation sur la géométrie permet d'obtenir le maximum d'énergie que l'on peut créer. La géométrie des modules Peltier est généralement optimisée pour augmenter le coefficient de performance ou pour avoir un ΔT plus grand. De plus, la valeur de la puissance de sortie est affectée par les

contacts thermiques et électriques, par la conductivité thermique et par l'épaisseur de la céramique. La diminution de l'épaisseur ou l'augmentation de la conductivité thermique du matériau céramique permet d'augmenter la puissance de sortie. Concernant les contacts, on peut les négliger dans le cas de pattes longues à sections faibles. Par contre, dans le cas de récupération de chaleur à faible température, les pattes sont courtes.

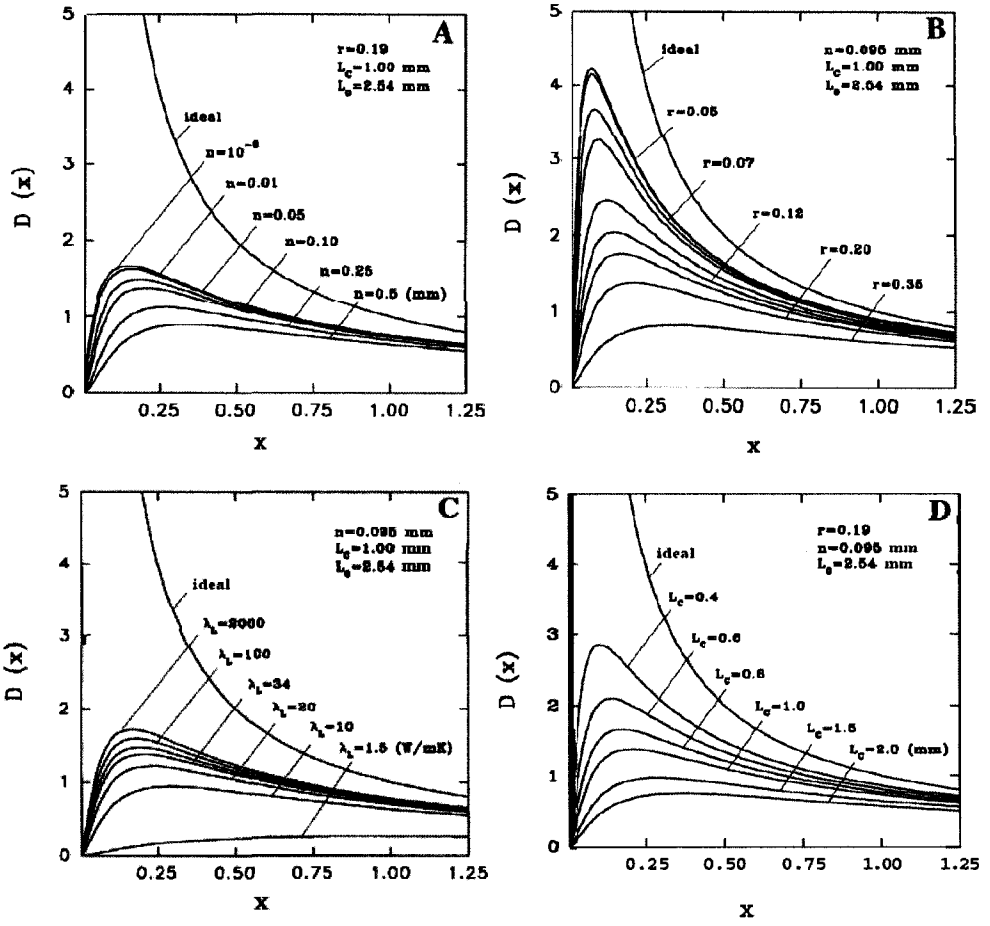


Figure 1.9: Variation de *D(x)* en fonction de la résistance électrique de contact(A), de la résistance thermique de contact(B), de la résistance thermique (C) et de l'épaisseur de la céramique(D) [1].

Tout ce travail d'optimisation est effectué sur un thermocouple. On a vu que l'on peut optimiser de différentes façons : la géométrie, la résistance de sortie dans le cas de générateur thermoélectrique, le coefficient de performance, la puissance, la différence de température, la chaleur absorbée. Au final, une optimisation sur la géométrie prenant en compte les différents paramètres est nécessaire. L'optimisation sera différente selon le mode d'utilisation du module. De plus, un travail préliminaire d'optimisation des propriétés des matériaux est établi à partir de la figure mérite Z, le but étant de l'augmenter au maximum. L'objectif est d'augmenter le produit $\alpha^2\sigma$, pour cela un compromis doit être trouvé car l'augmentation de l'un diminue l'autre en général. La meilleure manière d'augmenter cette figure de mérite est donc de diminuer la conductivité thermique.

1.2 Comportement thermomécanique des matériaux

1.2.1 Introduction

L'effet Seebeck ainsi que l'effet Peltier existent grâce à la présence d'un gradient de température dans les matériaux semi-conducteurs de type n et p. Ce gradient est amplifié par leur faible conductivité thermique. Le module thermoélectrique est composé de plusieurs matériaux (alumine, alliage d'étain, cuivre et matériaux semi-conducteurs) ayant des propriétés mécaniques bien différentes du fait de leur nature chimique et de la texture (orientation cristalline) et de la stéréologie (arrangement des grains dans l'espace) [6]. L'alumine est isotrope et a un comportement purement élastique dans les conditions d'utilisation des modules. L'étain et le cuivre sont aussi isotropes, mais possèdent un comportement plastique non négligeable. La stéréologie a surtout une influence sur le matériau semi-conducteur qui découle du procédé de mise en forme. Nous considérons ici comme semi-conducteur le tellurure de bismuth (Bi_2Te_3). Tous les matériaux mis à part ce dernier sont isotropes. Le procédé de mise en forme utilisé est une extrusion à chaud précédé d'une attrition permettant de créer les liaisons de l'alliage Bi_2Te_3. Ce procédé donne des propriétés mécaniques spécifiques dues à une orientation préférentielle des grains dans un plan parallèle à l'axe de la tige extrudée. La particularité du Bi_2Te_3 est qu'il est anisotrope ; ses coefficients de dilatations thermiques ne sont pas identiques dans toutes les directions. Ce coefficient est supérieur dans le sens radial de la tige extrudée à celui dans les sens axial et tangentiel, qui sont identiques. Cette orientation particulière de l'axe c du réseau cristallin dans la direction radiale diminue sa résistance mécanique et donc sa constante élastique dans ce sens alors que la dilatation radiale est supérieure [7].

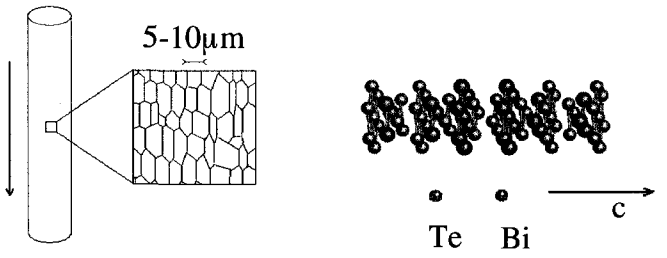


Figure 1.10: Procédé d'extrusion et structure cristalline du Bi_2Te_3.

C'est la température dans chaque composant du module qui va déterminer son expansion due aux effets thermiques. Le cas étudié est celui d'un générateur thermoélectrique car la différence de température est généralement plus élevée. On considèrera un ΔT de 100°C. On utilise la représentation par résistance thermique.

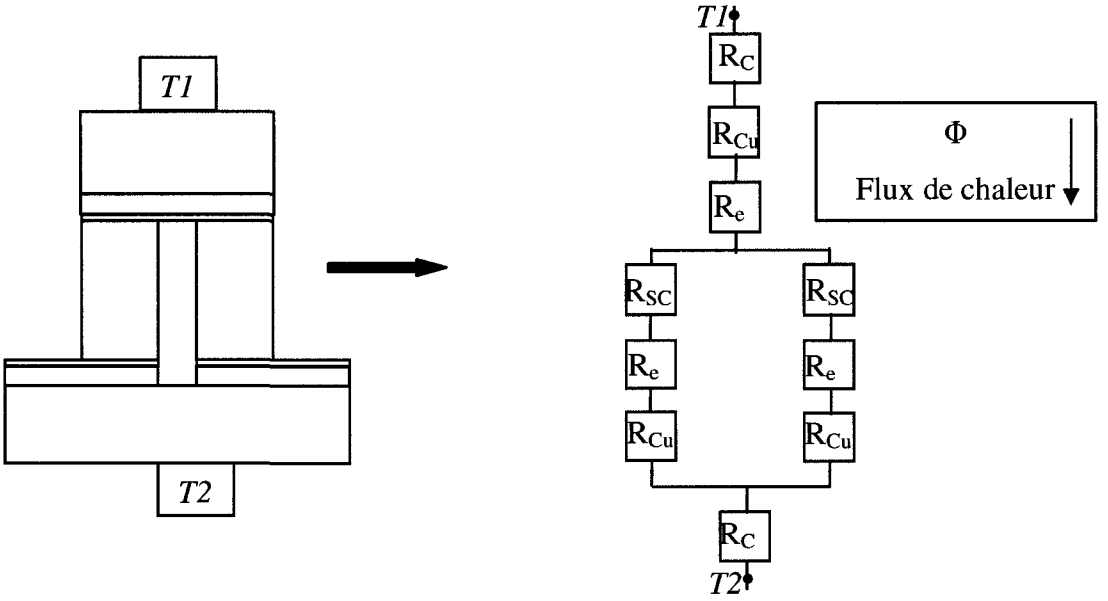


Figure 1.11 : Représentation par résistance thermique.

Suivant la loi de Fourier et l'analogie possible entre l'électricité et la thermique, les sections à travers lesquelles le flux de chaleur se propage sont identiques pour la céramique, le cuivre et l'étain. On choisit donc la même section S dans la deuxième partie de l'Équation **1.27** :

$$\Delta T = \left(\frac{l_C}{\lambda_C S_C} + \frac{l_{Cu}}{\lambda_{Cu} S_{Cu}} + \frac{l_e}{\lambda_e S_e} + \frac{\left(\frac{l_{SC}}{(\lambda_{SC})_n S_{SC}} + \frac{l_e}{\lambda_e S_e} + \frac{l_{Cu}}{\lambda_{Cu} S_{Cu}} \right) \times \left(\frac{l_{SC}}{(\lambda_{SC})_p S_{SC}} + \frac{l_e}{\lambda_e S_e} + \frac{l_{Cu}}{\lambda_{Cu} S_{Cu}} \right)}{\left(\frac{l_{SC}}{(\lambda_{SC})_p S_{SC}} + \frac{l_e}{\lambda_e S_e} + \frac{l_{Cu}}{\lambda_{Cu} S_{Cu}} + \frac{l_{SC}}{(\lambda_{SC})_n S_{SC}} + \frac{l_e}{\lambda_e S_e} + \frac{l_{Cu}}{\lambda_{Cu} S_{Cu}} \right)} + \frac{l_C}{\lambda_C 2 S_C} \right) \times \Phi$$

$$\Delta T = \left(\frac{l_C}{\lambda_C S} + \frac{l_{Cu}}{\lambda_{Cu} S} + \frac{l_e}{\lambda_e S} + \frac{\left(\frac{l_{SC}}{(\lambda_{SC})_n S_{SC}} + \frac{l_e}{\lambda_e S} + \frac{l_{Cu}}{\lambda_{Cu} S} \right) \times \left(\frac{l_{SC}}{(\lambda_{SC})_p S} + \frac{l_e}{\lambda_e S} + \frac{l_{Cu}}{\lambda_{Cu} S} \right)}{\left(\frac{l_{SC}}{(\lambda_{SC})_p S_{SC}} + 2 \times \frac{l_e}{\lambda_e S} + 2 \times \frac{l_{Cu}}{\lambda_{Cu} S} + \frac{l_{SC}}{(\lambda_{SC})_n S_{SC}} \right)} + \frac{l_C}{\lambda_C 2 S} \right) \times \Phi$$

Équation 1.27 : Loi de Fourier pour un thermocouple.

On prend les valeurs moyennes des propriétés thermiques dans la plage de température étudiée. Grâce à cette équation, on trouve le flux de chaleur traversant le thermocouple, permettant ainsi de trouver la distribution de température dans chaque matériau. Nous ne ferons pas le calcul ici même s'il est possible. Dans un module, chaque thermocouple est en parallèle impliquant une modification du modèle employé pour les résistances thermiques. La différence de température aux bornes du semi-conducteur est inférieure à ce qui est imposée à la limite des céramiques.

1.2.2 Thermomécanique des matériaux isotropes

En thermomécanique, la déformation d'une pièce est fonction des forces appliquées et de la dilation thermique du matériau. Pour un matériau isotrope, la relation contrainte-déformation (ou déformation-contrainte) est simple puisque le module d'Young, le coefficient de Poisson et le coefficient de dilatation thermique sont invariants dans toutes les directions.

Cela ne pose donc aucun problème à écrire l'Équation **1.28** sous forme indicielle :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E}\sigma_{ij} - \frac{\nu}{E}\sigma_{kk}\delta_{ij} + \alpha \Delta T \delta_{ij}$$

Équation 1.28

δ_{ij} est l'indice de Kronecker valant 1 lorsque i=j et 0 sinon. Voici ce que donne l'équation déformation-contrainte sous forme tensorielle complète :

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix} = \frac{1}{E} \begin{bmatrix} 1 & -\nu & -\nu & 0 & 0 & 0 \\ -\nu & 1 & -\nu & 0 & 0 & 0 \\ -\nu & -\nu & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2(1+\nu) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2(1+\nu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2(1+\nu) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} + \alpha\Delta T \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Équation 1.29 : Relation déformation-contrainte.

On remarque que le coefficient de dilatation thermique n'a pas de composante de cisaillement. Les déformations engendrées par la différence de température sont communément appelées déformations libres. Voici les mêmes relations dans les sens contrainte-déformation :

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{1+\nu}\left\{\varepsilon_{ij} + \frac{\nu}{1-2\nu}\varepsilon_{kk}\delta_{ij}\right\} - \frac{E\alpha\Delta T}{1-2\nu}\delta_{ij}$$

Équation 1.30

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & 1-\nu & \nu & 0 & 0 & 0 \\ \nu & \nu & 1-\nu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix} - \frac{E\alpha\Delta T}{1-2\nu} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Équation 1.31 : Relation contrainte-déformation.

Dans la première forme, la matrice devant le vecteur de contraintes est nommée matrice de souplesse alors que dans la deuxième, la matrice est appelée matrice de rigidité. Pour celle-ci, on remarque le facteur 2 devant les déformations de cisaillement dans le vecteur des déformations. Toutes les formes n'utilisent pas ce facteur 2 et il faut faire attention à l'entrée des constantes dans les codes d'éléments finis. Voilà la forme indicielle utilisant ces deux matrices :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\left(\varepsilon_{kl} - \alpha\Delta T\delta_{kl}\right) \qquad \varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl} + \alpha\Delta T\delta_{ij}$$

Avec

$$C_{ijkl} = \frac{E}{2(1+\nu)}\left(\delta_{il}\delta_{jk} + \delta_{ik}\delta_{jl}\right) + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}\delta_{ij}\delta_{kl}$$

$$S_{ijkl} = \frac{1+\nu}{2E}\left(\delta_{il}\delta_{jk} + \delta_{ik}\delta_{jl}\right) - \frac{\nu}{E}\delta_{ij}\delta_{kl}$$

D'autres coefficients autres que le module d'Young et le coefficient de Poisson peuvent être utilisés. Ils sont obtenus par une autre mesure des propriétés : module d'élasticité volumique, module de cisaillement et module de Lamé :

$$\text{Module d'élasticité volumique } K = \frac{E}{3(1-2\nu)}$$

$$\text{Module de cisaillement } \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

$$\text{Module de Lamé } \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$$

Équation 1.32: Autres constantes élastiques.

À partir de cela, nous pouvons commencer à expliquer le comportement thermomécanique d'un tel matériau. Le cas plus intéressant est celui ou deux matériaux de propriétés mécaniques différentes ayant des coefficients de dilatation différents sont fixés entre eux. C'est exactement le cas d'un module thermoélectrique. Une température chaude T_1 est imposée sur la face d'un des matériaux et une température libre T_2 apparaît suite à la conduction de chaleur à l'intérieur des deux matériaux placés en série. On

rappelle que dans un module, chaque thermocouple est en parallèle thermiquement. Nous allons complexifier le problème par la suite avec l'ajout de pattes thermoélectriques avec comportement anisotrope.

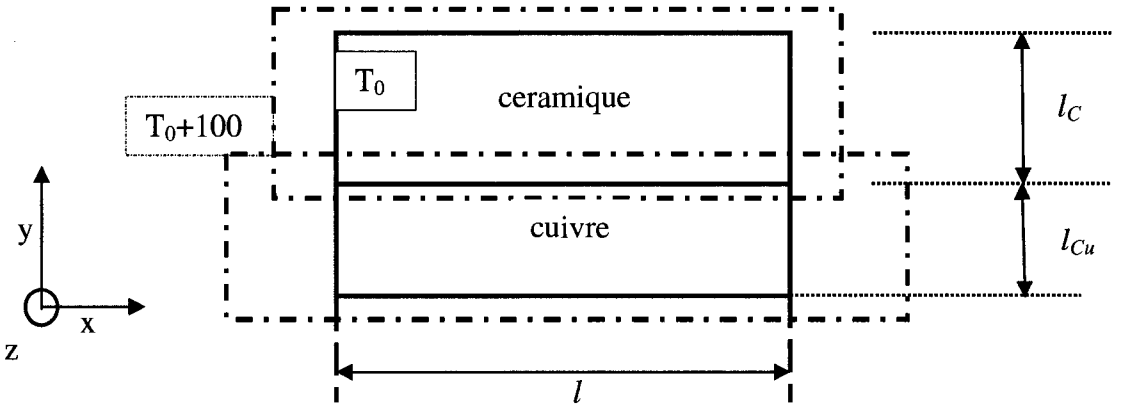


Figure 1.12 : Schématisation de la dilatation thermique.

Ce schéma explicatif montre les déformations de chaque matériau comme s'ils étaient libres, non fixés l'un à l'autre. De ce fait, le déplacement d'un point contact (coin) entre le cuivre et la céramique se décrit de la manière suivante. Le cuivre se déforme de la quantité totale $\alpha_{Cu} \times \Delta T \times l_{Cu}$ dans la direction y, où ΔT vaut 100. Il en est de même pour l'alumine avec ses propres coefficients. Dans la direction x, les déformations du cuivre et de la céramique sont identiques à l'équilibre donc :

$$\varepsilon_{Cu} = \varepsilon_C$$

Équation 1.33

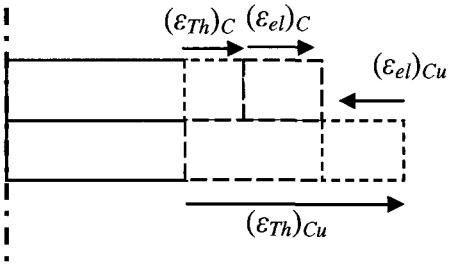


Figure 1.13 : Description des déformations dans la direction x.

Ces déformations sont séparées en une partie thermique et une partie élastique de telle manière que théoriquement, α_{Cu} est supérieure à α_C. Cela signifie que la déformation élastique suivant x dans le cuivre sera négative et dans la céramique positive:

$$(\varepsilon_{Th} - \varepsilon_{el})_{Cu} = (\varepsilon_{Th} + \varepsilon_{el})_C$$

Équation 1.34

La contrainte résiduelle élastique vaut donc : $\sigma_{xx} = -E_{Cu} \times (\varepsilon_{el})_{Cu}$ pour le cuivre et $\sigma_{xx} = E_C \times (\varepsilon_{el})_C$ pour la céramique. La céramique est en tension et le cuivre en compression. Ceci prouve l'existence de contraintes de cisaillement à cette interface. Les matériaux étant isotropes, le même comportement se produit dans la direction z. Nous effectuons le même travail pour la direction y, mais cette fois-ci, les deux matériaux ne sont pas en parallèle mais en série. Les deux plaques se dilatent librement. Les contraintes valent donc $\sigma_{yy} = E \times \alpha \Delta T$ dans chaque matériau. Ceci est vrai, car les plaques sont fixées l'une à l'autre sans autre restriction sur la face supérieure du céramique et inférieure du cuivre. Ce sont les conditions frontières qui vont faire varier les contraintes à l'intérieur des matériaux. Par ailleurs, nous avons considéré une approche isotherme du problème. En réalité, l'équation de conduction de la chaleur va définir la variation de température dans la céramique et le cuivre. Cette variation de

température est linéaire dans ces deux matériaux et est définie par la résistance thermique de chacun. Il est clair que la variation n'est pas grande car la valeur de la conductivité thermique est élevée donc l'hypothèse d'une étude isotherme est respectée. Cette hypothèse n'est pas vrai pour les semi-conducteurs car le gradient thermique est élevé, cause principale des effets Seebeck et Peltier. Ajouté à ce gradient de température, le matériau a un comportement anisotrope, isotrope transverse plus précisément. Il est donc nécessaire de complexifier le modèle en rajoutant tous les éléments composant un module et d'expliquer le comportement thermomécanique d'un matériau orthotrope.

1.2.3 Thermomécanique des matériaux orthotropes

La déformation des pattes est complexe compte tenu de l'orthotropie élastique du matériau et de l'anisotropie du coefficient de dilatation. Prenons un disque dans une section d'une barre extrudée que nous chauffons ou refroidissons. Dans le premier cas, l'expansion radiale est restreinte par l'expansion tangentielle, ce qui impose des contraintes de compression dans le sens radial et des contraintes de tension dans le sens tangentiel. Il se produit l'inverse lorsqu'on refroidit cette section[8].

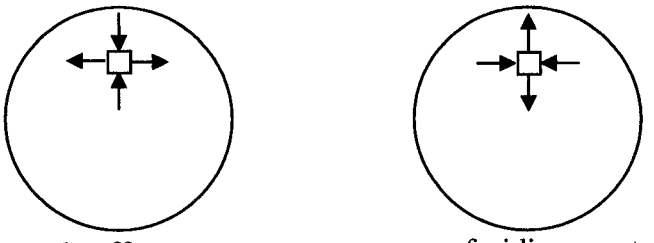


Figure 1.14 : Contrainte résiduelle dû à l'anisotropie des coefficients de dilatation.

En plus de cette anisotropie du coefficient de dilatation, l'orthotropie élastique complexifie la distribution de contraintes. La forme indicielle reste inchangée mais les constantes élastiques dépendent de chaque direction :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\left(\varepsilon_{kl} - \alpha\Delta T\delta_{kl}\right)$$

Équation 1.35

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl} + \alpha_{ij}\Delta T$$

Équation 1.36

L'Équation **1.35** définit C_{ijkl}, un tenseur d'ordre 4. Il devrait donc y avoir 81 composantes mais il existe des symétries dans la matrice de raideur ce qui permet de réduire la matrice à 21 composantes:

$$C_{ijkl} = C_{klij} = C_{jikl} = C_{ijlk}$$

Équation 1.37

La forme générale de la relation contrainte-déformation pour un matériau orthotrope est :

$$\sigma = C(\varepsilon - \alpha\Delta T)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{14} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{15} & c_{25} & c_{35} & c_{45} & c_{55} & c_{56} \\ c_{16} & c_{26} & c_{36} & c_{46} & c_{56} & c_{66} \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} \\ \alpha_{22} \\ \alpha_{33} \\ 2\alpha_{23} \\ 2\alpha_{13} \\ 2\alpha_{12} \end{bmatrix}$$

Équation 1.38 : Relation contrainte déformation pour un matériau orthotrope.

Où $c_{11} \equiv C_{1111}$ $c_{12} \equiv C_{1122} = C_{2211}$. La forme faisant intervenir la matrice de souplesse avec $s_{11} = S_{1111}$, $s_{12} = S_{1122}$ est:

$$\varepsilon = S\sigma + \alpha\Delta T$$

$$S = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{12} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{13} & S_{23} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{14} & S_{24} & S_{34} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{15} & S_{25} & S_{35} & S_{45} & S_{55} & S_{56} \\ S_{16} & S_{26} & S_{36} & S_{46} & S_{56} & S_{66} \end{bmatrix}$$

L'interprétation de ces constantes est plus aisée en utilisant la souplesse. En appliquant une contrainte uni-axiale σ_{11}, le volume subit une déformation d'extension et de cisaillement.

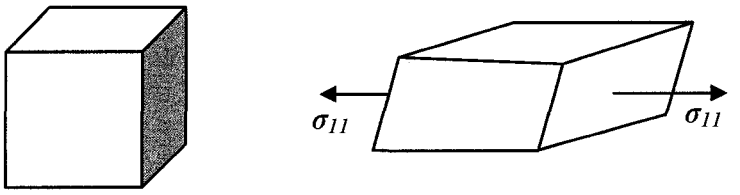


Figure 1.15 : Déformation d'un matériau orthotrope.

$$\varepsilon_{11} = s_{11}\sigma_{11}, \quad \varepsilon_{22} = s_{12}\sigma_{11}, \quad \varepsilon_{33} = s_{13}\sigma_{11}$$
$$\varepsilon_{23} = s_{14}\sigma_{11}, \quad \varepsilon_{13} = s_{15}\sigma_{11}, \quad \varepsilon_{12} = s_{16}\sigma_{11}$$

Équation 1.39

Selon l'Équation **1.39**, la constante S_{11} correspond à une souplesse uni-axiale (comme $1/E$) tandis que les rapports S_{12}/S_{11} et S_{13}/S_{11} sont les valeurs généralisées du coefficient de Poisson. Ils quantifient la contraction latérale du volume résultant d'une tension uni-axiale. On remarque l'apparition de déformations de cisaillement qui ne sont pas présentes dans un matériau isotrope subissant une tension uni-axiale. Mais soyons plus précis dans la définition de la matrice de raideur. Si un matériau a un plan de symétrie, alors l'application d'une contrainte normale ou parallèle à ce plan induit uniquement une déformation dans la direction normale et parallèle à ce plan. Comme on

peut le voir à la Figure 1.16, on considère e_1 normal à ce plan de symétrie. Alors, $C_{1112} = C_{1113} = C_{2212} = C_{2213} = C_{3312} = C_{3313} = 0$. Il reste donc 13 constantes élastiques.

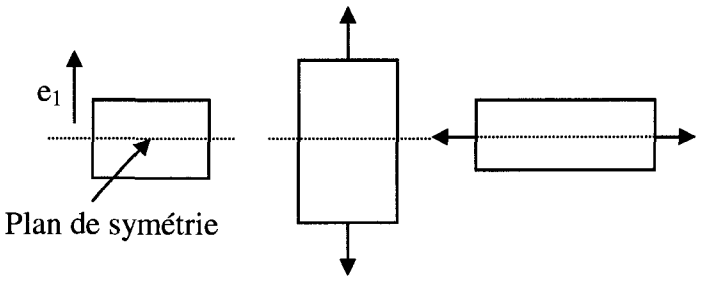


Figure 1.16: Plan de symétrie.

La particularité du Bi_2Te_3 fabriqué par extrusion est qu'il possède un plan de symétrie parallèle à l'axe de la tige.

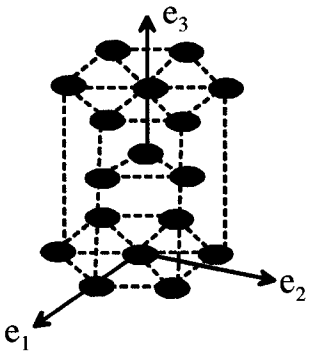


Figure 1.17 : Structure cristalline hexagonal.

On choisit e_3 comme étant l'axe c perpendiculaire à ce plan de symétrie, alors l'isotropie transverse implique $c_{22} = c_{11}$, $c_{23} = c_{13}$, $c_{55} = c_{44}$, $c_{66} = (c_{11} - c_{12})/2$, donnant la forme de la matrice de raideur suivante :

$$\mathbf{C}=\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & \textit{sym} & & c_{44} & 0 & 0 \\ & & & 0 & c_{44} & 0 \\ & & & 0 & 0 & (c_{11}-c_{12})/2 \end{bmatrix}$$

Équation 1.40 : Matrice de raideur d'un matériau isotrope transverse.

En utilisant les constantes d'ingénieures connues, la matrice de souplesse est de la forme :

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix} 1/E_p & -\nu_p/E_p & -\nu_{tp}/E_t & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_p/E_p & 1/E_p & -\nu_{tp}/E_t & 0 & 0 & 0 \\ -\nu_{pt}/E_p & -\nu_{pt}/E_p & 1/E_t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/\mu_t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\mu_t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/\mu_p \end{bmatrix}$$

Équation 1.41 : Matrice de souplesse.

Avec :

$$E_1 = E_2 = E_p \quad E_3 = E_t$$
$$\nu_{12} = \nu_{21} = \nu_p$$
$$\nu_{31} = \nu_{32} = \nu_{tp}$$
$$\nu_{13} = \nu_{23} = \nu_{pt}$$
$$\mu_{13} = \mu_{23} = \mu_t$$
$$\mu_p = E_p/2(1+\nu_p)$$

Les coefficients de Poisson ne sont pas symétriques mais respectent la loi :

$$\nu_{tp}/E_t = \nu_{pt}/E_p$$

Équation 1.42

On peut de plus relier les constantes élastiques et les constantes d'ingénieures par les relations suivantes :

$$E_p = \left(c_{11}^2 c_{33} + 2c_{13}^2 c_{12} - 2c_{11}c_{13}^2 - c_{33}c_{12}^2\right)/\left(c_{11}c_{33} - c_{13}^2\right)$$

$$E_t = \left(c_{11}^2 c_{33} + 2c_{13}^2 c_{12} - 2c_{11}c_{13}^2 - c_{33}c_{12}^2\right)/\left(c_{11}^2 - c_{12}^2\right)$$

$$\nu_p = (c_{12}c_{33} - c_{13}^2)/(c_{11}c_{33} - c_{13}^2)$$

$$\nu_{tp} = (c_{13}c_{11} - c_{12}c_{13})/(c_{11}^2 - c_{12}^2)$$

$$\nu_{pt} = (c_{11}c_{13} - c_{12}c_{13})/(c_{11}c_{33} - c_{13}^2)$$

$$\mu_{23} = c_{44}, \quad \mu_{13} = c_{55} \quad \mu_{12} = c_{66}$$

Équation 1.43 : Constantes d'ingénieures.

Le plan de symétrie donne la matrice des coefficients de dilatation thermique :

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3 \end{bmatrix}$$

Équation 1.44

Il faut se remettre dans le contexte d'un module thermoélectrique fabriqué à base de Bi_2Te_3 extrudé. Le plan de symétrie est parallèle aux directions axiale et tangentielle de la tige. L'alliage de brasage placé entre le cuivre et les semi-conducteurs a un coefficient de dilatation élevé par rapport aux deux autres matériaux. Les coins des pattes, subissant la plus grande extension, vont être très sollicités. Malgré tout, le comportement plastique de l'alliage de brasage et du cuivre va permettre de réduire grandement ces contraintes. L'extension de l'alumine, du cuivre et de l'étain, comme le montre la Figure 1.12, va engendrer des contraintes de tension du côté chaud du générateur thermoélectrique. La différence de dilatation thermique des matériaux induit des contraintes de cisaillement. L'anisotropie de l'expansion du Bi_2Te_3 ajoute des contraintes internes dans les pattes de

thermoélectrique. Plus les constantes de raideur du semi-conducteur vont être élevées, plus les contraintes vont augmenter.

1.3 Revues bibliographique sur les expériences et les simulations

1.3.1 Étude d'un modèle similaire

Beaucoup de simulations sont faites pour obtenir une amélioration des performances d'un module. Les modèles d'analogie électrique et thermique sont très utiles dans ce sens. En général, le logiciel utilisé est SPICE [9]. La partie intéressante des modules thermoélectriques est la nouvelle utilité qu'ils commencent à prendre dans l'industrie [10]. Cela se voit pour l'automobile [11], l'industrie spatiale, et d'autres comme le textile! Les références de l'article [12] nous amènent vers des sites d'entreprises utilisant la technologie des thermoélectriques de manière très intéressante. Dans ces différents domaines, les conditions d'utilisation des matériaux varient fortement [13]. De même, le design des modules varie. Un choix de matériaux judicieux doit être effectué si on veut augmenter les capacités des modules en même temps que la résistance mécanique. Évidemment, un paramètre important dans le calcul des performances aussi bien électrique que mécanique est la variation des propriétés thermiques, électriques et mécaniques en fonction de la température. Les simulations utilisant SPICE se rapprochent fortement de la vérité sur les performances avec des erreurs inférieures à 5%.

La première étude [14] a été effectuée sur une gaufre de céramique à l'intérieur duquel des éléments de boucles carrées de cuivre sont insérés, collés à l'alumine. Elle se concentre donc sur un chauffage inductif de l'ensemble. Une validation expérimentale est de plus effectuée. Cette validation permet de repérer les points de fissure probables. Seule une plaque de céramique est étudiée par la simulation numérique. La Figure 1.18

montre les dimensions de la plaque et des boucles de cuivre. Le SQ signifie que ce sont des dimensions carrées. Le maillage autour des boucles de cuivre est très serré.

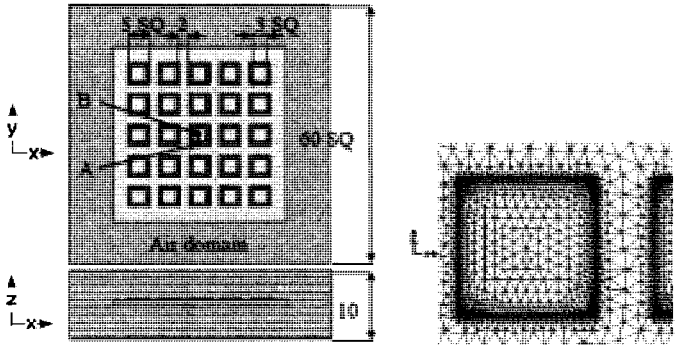


Figure 1.18: Dimensions et maillage[14].

Ce modèle nous permet de comparer les contraintes à l'interface cuivre-alumine avec les modules. Les dimensions en millimètre sont comparables à certains modules Peltier. Le chauffage s'effectuant par induction, la température qu'atteignent les matériaux est très élevée puisqu'elle atteint au minimum 500°C. Toutes les données matériaux sont entrées en fonction de la température de 0 à 1000°C. La Figure 1.19 montre la variation du module d'Young qui est linéaire. Pour le cuivre, il passe de 130 GPa à 105 GPa entre 0 et 1000°C et de 380 à 330 GPa pour l'alumine dans la même plage de température. La Figure 1.20 nous montre la non-linéarité des coefficients de Poisson et de dilatation thermique avec la température.

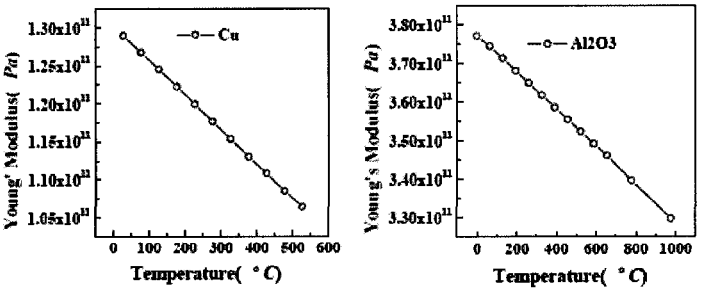


Figure 1.19: Module d'Young en fonction de la température[14].

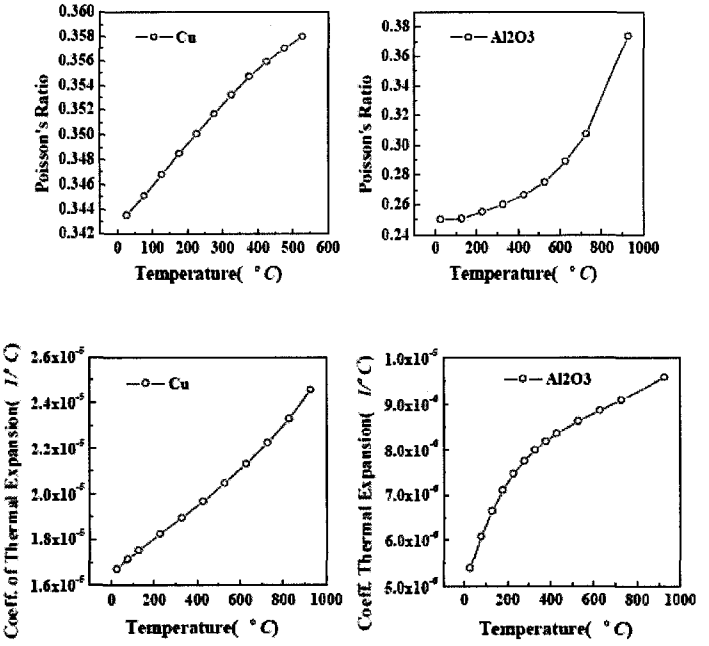


Figure 1.20: Coefficient de Poisson et de dilatation thermique [14].

La méthode numérique utilisée est indirecte car les trois champs de degrés de libertés sont calculés séparément afin de les implanter comme condition initiale pour le modèle suivant. Tout d'abord, le champ électromagnétique est calculé afin d'obtenir les valeurs de la densité de courant et donc de la chaleur joule créée, permettant d'avoir la distribution de température. Ces valeurs sont ensuite utilisées pour la solution du modèle thermomécanique.

On voit la distribution de température sur la Figure 1.21. La différence entre les bords et le centre de la céramique est significative. Ce gradient va imposer une forme convexe particulière à la plaque de céramique. Les quatre coins subissent le maximum de déplacement par rapport au centre de la plaque. Les résultats des simulations montrent une bonne concordance avec l'expérimentation concernant l'augmentation de température. On peut en déduire que les contraintes thermiques calculées seront précises.

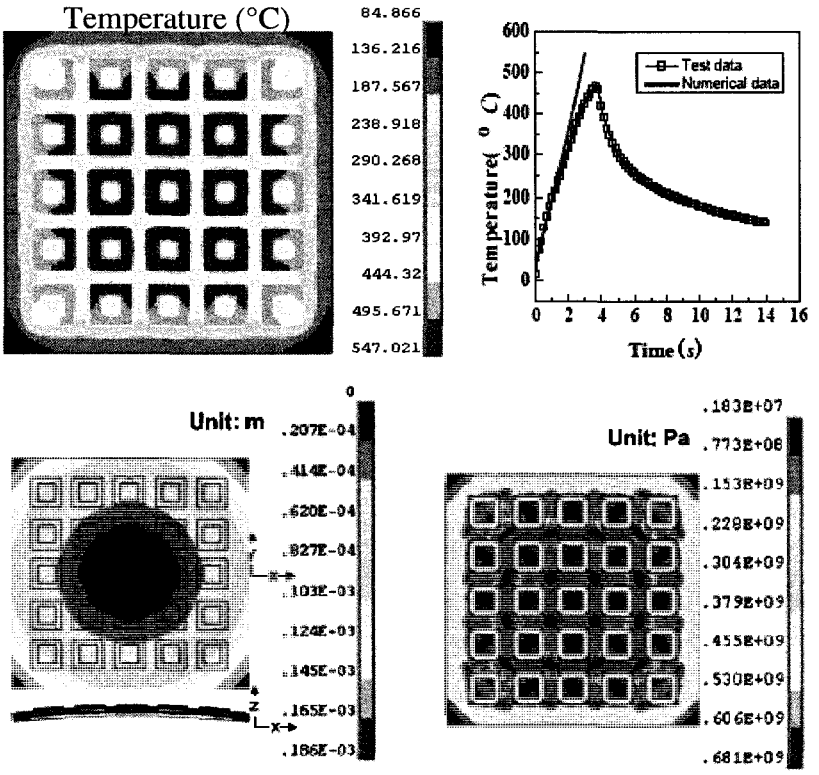


Figure 1.21: Résultats des simulations [14].

Les contraintes atteignent 300 MPa dans le cuivre avec une température imposée de l'ordre de 500°C. Le comportement plastique du cuivre n'est pas pris en compte dans ce modèle. Les contraintes en seraient encore diminuées. On va retrouver cette forme de déformation de la céramique dans la simulation du comportement des modules.

1.3.2 Première approche numérique sur un module Peltier

Une approche de simulation du comportement thermomécanique devient nécessaire car les éléments thermoélectriques ont, en général, une faible résistance à la rupture [10, 15]. Peu d'articles étudient l'aspect thermomécanique car une connaissance des performances mécaniques des matériaux est primordiale et qu'elles sont difficiles à mesurer. Un article de l'ICT 2004 (*International Conference on Thermoelectrics*) [16]

étudie les contraintes thermiques dans un module constitué de Bi-Te. À la base, c'est un générateur thermoélectrique en cascade, c'est-à-dire qu'il est composé de deux modules : un fait de siliciures sur le haut récupérant directement la chaleur à la source et un autre de Bi-Te. Le module constitué de siliciures possède des pattes de type p de composition $MnSi_{1.73}$ alors que le type n est du $Mg_2Si_{0.4}Sn_{0.6}$. Les matériaux sont obtenus par frittage. Ces modules ne sont constitués que de 7 paires et ont une dimension carrée de 23.5mm et une hauteur de plusieurs millimètres. Le cuivre relie les différentes paires. L'empilement est effectué en mettant une plaque d'AlN entre les deux modules. Il faut préciser que la mesure des performances est effectuée avec l'empilement fixé entre la source et le dissipateur afin d'empêcher l'apparition de contraintes pouvant réduire les performances ou endommager le dispositif. Une amélioration des interfaces a été effectuée pour diminuer les pertes thermiques. Grâce à tout cela, ils arrivent à un rendement supérieur à 10% pour la cascade.

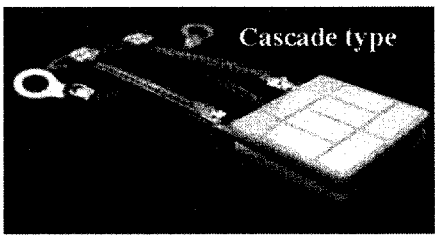


Figure 1.22: Générateur en cascade[16].

La simulation du comportement thermomécanique est effectuée sur le module du côté froid. La condition d'utilisation est l'imposition d'un ΔT de 250°C appliqué au module fabriqué à partir de Bi-Te avec une température froide à 30°C. La simulation montre la contrainte suivant z dans le sens de l'épaisseur. Les deux faces du module sont libres. On le remarque en voyant la déformation amplifiée qui nous montre la forme convexe que prend le module soumis à une température chaude sur sa face supérieure. La contrainte la plus élevée est localisée à l'interface entre le Bi-Te et le matériau conducteur (cuivre). Le cuivre va permettre de relaxer fortement les contraintes thermiques.

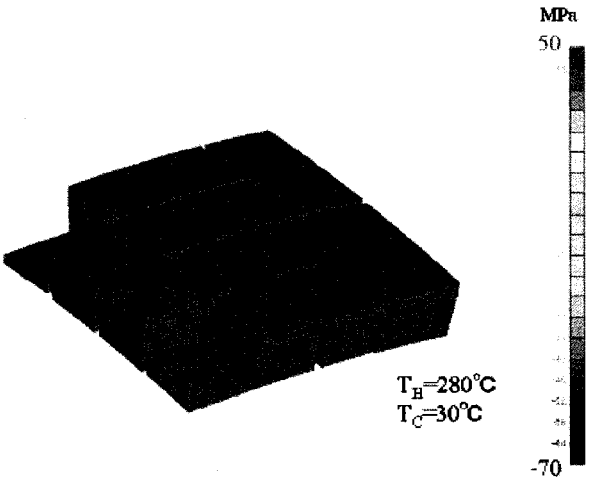


Figure 1.23: Contraintes suivant z [16].

Un deuxième article [17] a été écrit par les mêmes auteurs sur le même type de module en cascade et une simulation du comportement thermomécanique a été effectuée. Le design des modules est légèrement modifié. Des matériaux de même nature sont utilisés pour la fabrication des modules : Mn-Si et Bi-Te pour les modules chaud et froid respectivement. Les pattes de siliciure de manganèse ont une section de $4.5 \times 4.5 mm^2$ et une hauteur de 7 millimètres. Il en est de même pour le module de Bi-Te avec des pattes plus hautes.



Figure 1.24: Design des deux modules. À gauche à base de Mn-Si, à droite à base de Bi-Te [17].

Avec ces modules à huit pattes, le rendement atteint cette fois-ci 12% pour la cascade dans les mêmes conditions de mesure que dans l'article précédent [19].



Figure 1.25 : Montage de mesure des performances [17].

Les résultats de la simulation thermomécanique de l'ensemble de la cascade donnent la contrainte de Von Mises. La différence de température appliquée est de 520°C. La contrainte calculée atteint 315 MPa dans le cuivre de la face chaude libre connectant les pattes de manganèse de siliciure. Comme prévu, les coins des pattes subissent la contrainte maximale.

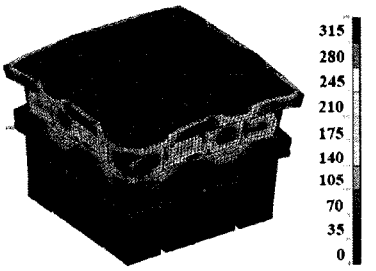
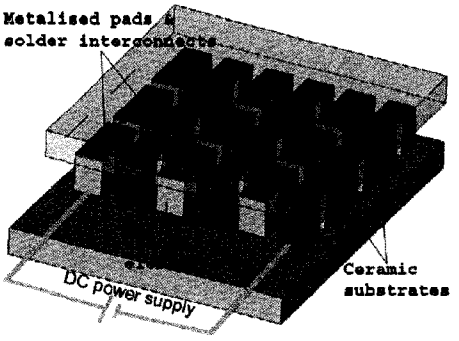


Figure 1.26: Simulation numérique [17].

Les conditions de l'étude thermomécanique sont imprécises. La description des caractéristiques des matériaux et de l'imposition des conditions frontières laisse des incertitudes sur les résultats. Par sa taille, les contraintes sont encore plus élevées que pour un module ayant une hauteur de pattes inférieure au mm car les sections et hauteur des pattes sont grandes.

1.3.3 Simulation numérique d'un module

L'étude du prochain article [18] est beaucoup plus intéressante car plus précise. Une comparaison avec l'expérience est effectuée afin de valider les résultats de simulation. L'intérêt des auteurs concerne la miniaturisation des modules et donc la fiabilité de ces structures. Les tailles des différents composants du module utilisées sont données dans le tableau suivant :



Components	Dimensions
Top ceramic substrate	3.0 mm × 3.0 mm × 0.28 mm
Bottom ceramic substrate	3.8 mm × 3.0 mm × 0.28 mm
TE elements	0.3 mm × 0.3 mm × 0.4 mm
TE element pitch	0.45 mm × 0.45 mm
Solder interconnections	0.3 mm × 0.3 mm × 0.02 mm

Figure 1.27 : Design et dimension du module étudié [18].

Les propriétés thermoélectriques, premièrement, sont utilisées pour la simulation thermoélectrique permettant d'obtenir les températures nodales servant de chargement pour la simulation thermomécanique suivante. Les propriétés mécaniques des matériaux, autres que l'alliage de brasage, sont introduites dans le logiciel indépendamment de la température. Elles sont dans le Tableau 1.1: Propriétés électriques, thermiques, thermoélectriques, mécaniques [18].

Tableau 1.1: Propriétés électriques, thermiques, thermoélectriques, mécaniques [18].

Material properties	TE element (n-type/p-type)	Cu strap	Solder	Ceramic
Thermal conductivity ($W\ m^{-1}\ °C^{-1}$)	1.3/1.2	385	57	25
Resistivity (Ω m)	$1.05 \times 10^{-5}/9.8 \times 10^{-6}$	1.7×10^{-8}	2.2×10^{-8}	10^{12}
Seebeck coefficient ($\mu V\ °C^{-1}$)	−165/210	—	—	—
Young's modulus (GPa)	31.7	120	Table 3	340
Poisson ratio	0.33	0.3	0.35	0.22
Coefficient of thermal expansion	1.3×10^{-5}	1.7×10^{-5}	2.24×10^{-5}	6.8×10^{-6}

Par contre les propriétés mécaniques de l'alliage d'étain-plomb dépendent de la température variant de -40°C à 90°C.

Tableau 1.2: Variation des propriétés du PbSn en fonction de la température [18].

Temperature (°C)	−40	0	30	60	90
Young's modulus (GPa)	40.554	34.474	29.914	25.354	20.794
Yield stress (MPa)	38	31	25.6	20.3	14.9
Stress (MPa) at strain 0.2%	46.4	39.1	32.2	25.5	17.9
Stress (MPa) at strain 0.5%	50.2	42.3	34.8	27.4	19.3

On remarque dans le Tableau 1.2 que le matériau devient plus souple avec l'augmentation de température et donc l'élasticité s'en voit réduite. La zone étudiée va se situer aux alentours de 30°C. Toutefois la charge cyclique du module va influer sur le matériau.

La technique de corrélation par image utilise un microscope à force atomique qui permet de mesurer ces déformations à l'échelle nanométrique. Le détail de la technique est donné dans un autre article [19] du même auteur. Les images de la zone étudiée sont prises avec le microscope avant la mise en marche du module et pendant le fonctionnement. La corrélation est effectuée avec un logiciel "maison" par la suite pour quantifier les déplacements et donc les déformations. La zone étudiée est l'interface entre un élément thermoélectrique et le cuivre, soit l'alliage de brasage.

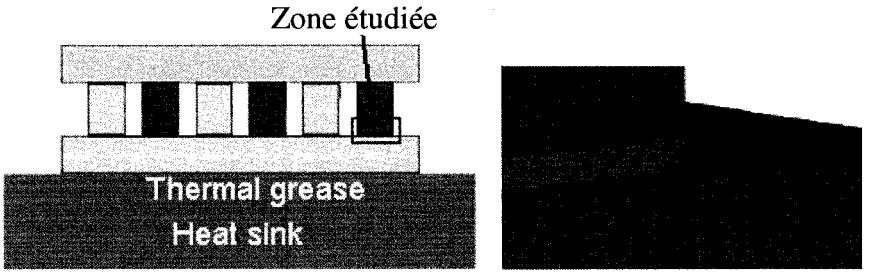


Figure 1.28: Localisation de la zone étudiée [18].

On voit que le cuivre est un substrat posé sur la céramique servant de fondation au module. La couche d'alliage de brasage a une épaisseur de 20 nm. La photo prise grâce au microscope pour la corrélation fait 5µm sur 5µm et comprend 512×512 pixels. La zone étudiée (Figure 1.28) est réduite à 3.7µm sur 3.7µm afin d'éviter les effets de bord. La Figure 1.29 donne une image prise par le microscope suivi de la corrélation et la comparaison avec les simulations (absorption de chaleur) :

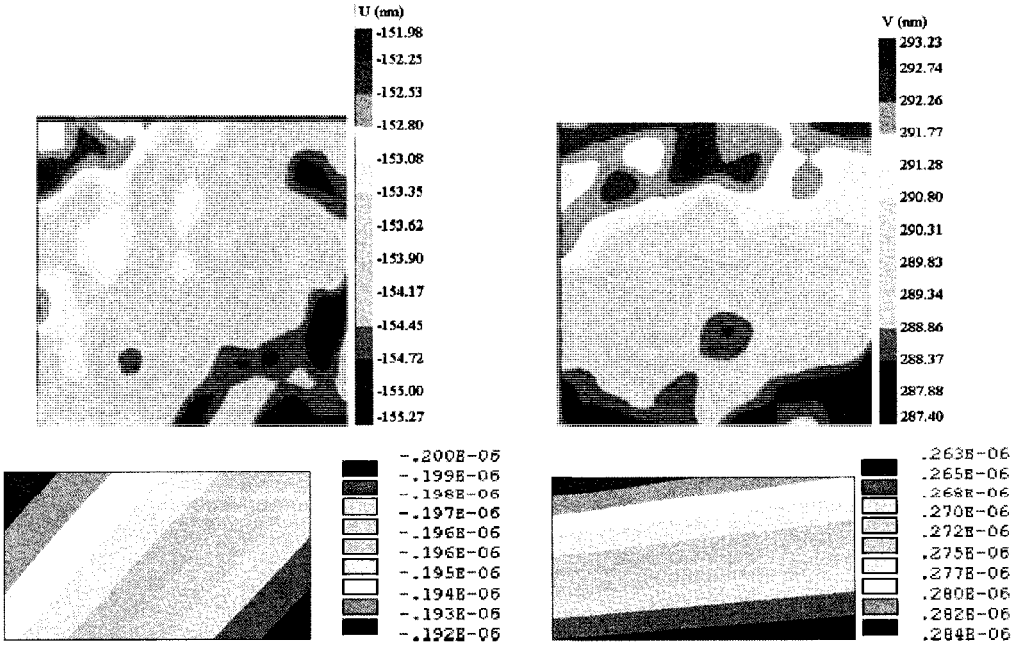


Figure 1.29: Comparaison de l'image prise au microscope et de la zone simulée [18].

Les résultats sont ensuite comparés avec les simulations. Ces dernières sont effectuées via le logiciel Ansys 10 et les résultats sont obtenus pour le régime permanent. Les deux modes de fonctionnement d'un module ont été simulés, soit en mode de refroidissement et en mode génération. On retrouve les formes convexes pour le générateur électrique et la forme concave pour l'absorbeur de chaleur. Seule la moitié du module est simulée grâce à la symétrie.

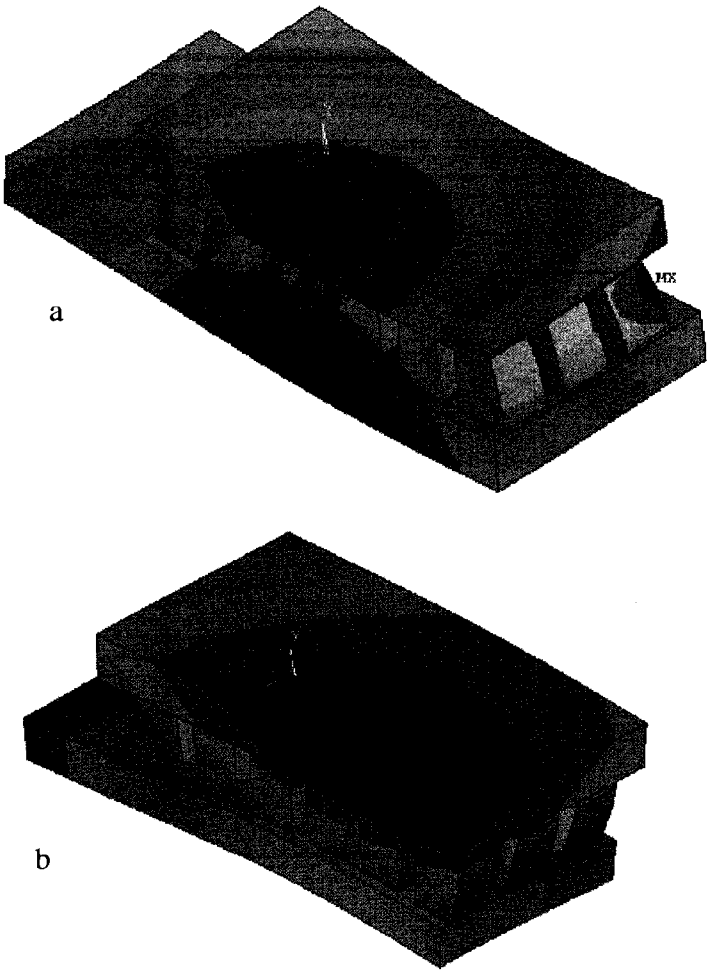


Figure 1.30: Module en mode absorption (a) et en mode générateur (b) [18].

La zone étudiée de l'alliage de brasage est située sur la partie inférieure du module, là où la céramique est posée sur le dissipateur thermique. À cet endroit, les déformations ne sont pas les plus élevées car le brasage ne subit qu'une faible variation de température. La variation de température au niveau de la céramique chaude pourrait jouer sur le microscope et ajouter des erreurs de mesure à cause de la distorsion. La forme des déplacements mesurés pour l'absorption de chaleur, comme on le voit dans l'exemple suivant, est très proche des valeurs simulées. Par contre ce n'est pas le cas pour lorsque la céramique supérieure est chaude. Le module ayant passé d'un mode à l'autre, des contraintes cycliques sont apparues et expliqueraient la différence entre les deux.

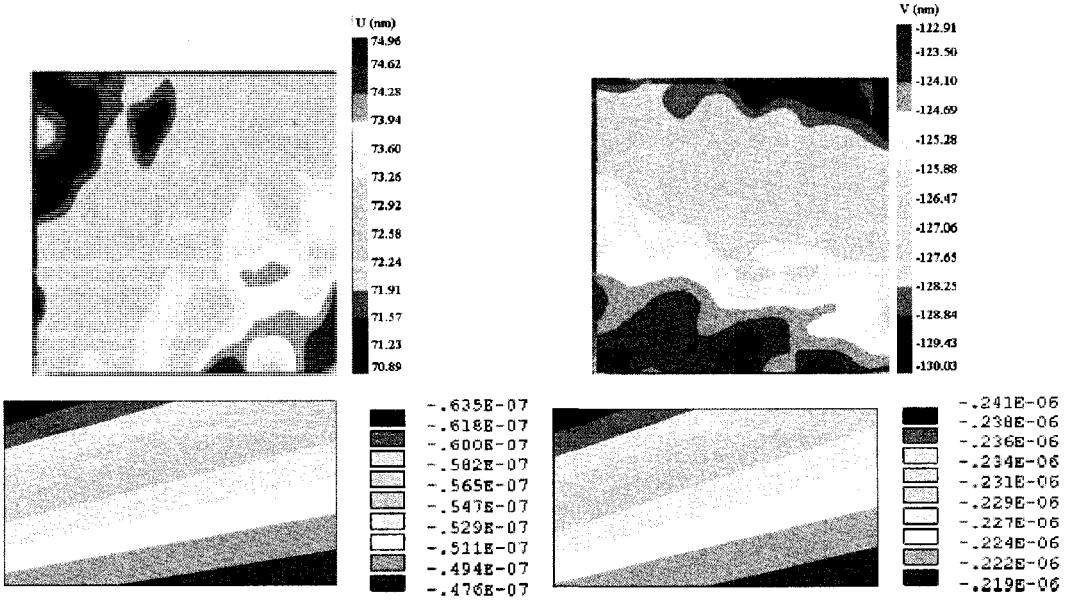


Figure 1.31: Comparaison de l'image prise au microscope et de la zone simulée [18].

En plus de la forme des déplacements, l'analyse quantitative du Tableau 1.3 indique des erreurs non négligeables pour les deux cas :

Tableau 1.3: Erreur entre la mesure et la simulation [18].

Operation mode	Displacement difference	Measured value (nm)	Predicted value (nm)	Difference
Cooling stage	u	3.29	1.63	1.66 nm or 50.4%
	v	5.83	6.77	−0.94 nm or −16.1%
Heating stage	u	4.07	3.23	0.84 nm or 20.6%
	v	7.12	5.18	1.94 nm or 27.2%

Pour le cas du chauffage, on atteint des erreurs de 23% en moyenne pour les déplacements en x et y alors que pour le refroidissement, elles sont de 50.4% pour le déplacement u et de 16% pour la valeur de v. L'aspect intéressant est la prise en compte de la variation de température dans les propriétés élasto-plastiques de l'alliage. Cela signifie que les contraintes aux coins des pattes des thermoélectriques en sont diminuées grâce au relâchement des contraintes par la déformation de l'alliage de brasage. Entre les deux articles sur l'allègement des contraintes au niveau de l'interface élément thermoélectrique et cuivre, le premier utilise le relâchement par la déformation du cuivre et l'autre celle de l'alliage de brasage Sn-Pb. La comparaison entre les deux types de module est impossible vu la différence de dimension entre les deux, mais l'utilité du cuivre et de l'alliage de brasage dans la fiabilité des modules ne fait aucun doute.

D'autres études plus pointues sur le comportement des conducteurs électriques ou des alliages d'interface sont faites. Leur utilité se distingue particulièrement dans les composants électriques de très faible dimension. Ces articles [20-22] utilisent la dépendance en fonction du temps des déformations. La vitesse de celles-ci entre en considération. Différents modèles de fluage sont présentés et différents matériaux sont comparés. Le temps entre donc en compte dans la fiabilité des interfaces.

1.4 Caractérisation des matériaux

1.4.1 Caractérisation des propriétés thermoélectriques

À propos des propriétés thermoélectriques, on considère le coefficient de Seebeck, la résistivité électrique et la conductivité thermique car ces trois termes apparaissent dans la formule de la figure de mérite du matériau, définissant les performances. On peut mesurer ces trois paramètres séparément pour obtenir la figure de mérite proprement dite. Plusieurs techniques peuvent être utilisées pour mesurer ces propriétés indépendamment ou en même temps. Tout d'abord, la résistivité est la propriété la plus simple à mesurer puisqu'il suffit de fournir du courant à une branche du matériau. La difficulté réside plus dans la précision de la mesure que dans la méthode. La qualité des contacts va définir cette précision.

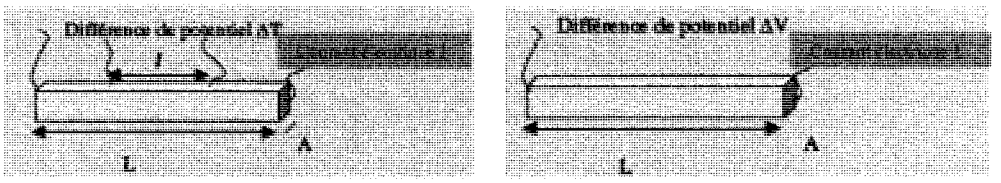


Figure 1.32: Mesure de la résistivité par les méthodes à quatre contacts et deux contacts.

$$\rho = \frac{\Delta V}{I} \times \frac{A}{L}$$

Équation 1.45

La Figure 1.32 définit deux méthodes différentes. Grâce à la méthode à quatre contacts, la variation de résistivité avec la position le long d'une tige est prise en compte. Concernant le cuivre et l'étain, les propriétés électriques sont connues. Par contre pour le tellurure de bismuth (Bi_2Te_3), celles-ci le sont moins. Un des problèmes quant à la mesure de la résistivité ou de la conductivité, est l'effet Seebeck apparaissant lors de l'imposition du courant.

$$\Delta V = \rho \frac{l}{A} I + |\alpha| \Delta T$$

Équation 1.46

On peut résoudre ce problème en analysant la réponse dans le temps afin de séparer les deux types de voltage. La mesure du coefficient de Seebeck s'effectue en imposant un gradient de température et en mesurant le voltage en sortie :

$$\alpha = \frac{\Delta V}{\Delta T}$$

Équation 1.47

On obtient en réalité la valeur moyenne du coefficient de Seebeck dans le gradient de température imposé. Des techniques plus précises permettent d'obtenir la valeur du coefficient à une température donnée. La limitation en température dans les méthodes de mesure dépend du domaine d'utilisation du thermo-élément. La technique illustrée à la Figure 1.33 permet de mesurer le coefficient en fonction de la position sur l'échantillon.

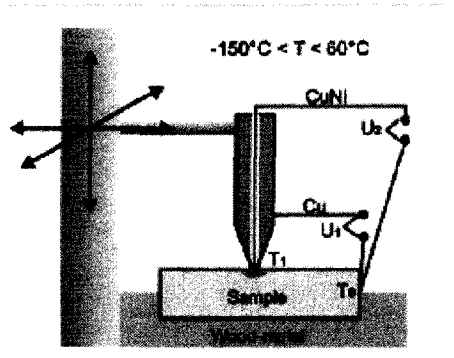


Figure 1.33: Détermination du coefficient Seebeck par balayage d'une microsonde.

La dernière propriété thermoélectrique à mesurer est la conductivité thermique. On peut la déterminer grâce à la méthode du flux de chaleur axial :

$$\lambda(T) = \frac{Q}{A}\frac{L}{\Delta T}$$

Équation 1.48

On mesure cette propriété dans une direction précise alors que la conductivité est une propriété anisotrope. Beaucoup d'autres méthodes ou montages de mesure existent pour les techniques comparatives. On trouve ainsi la méthode de diffusivité thermique.

$$D = \frac{\lambda}{\rho C_p} \text{ en } {}^{m^2}\!/_{s}$$

Équation 1.49

Avec $D = 1.37\frac{l^2}{\pi^2 t_{0.5}}$ où $t_{0.5}$ est le temps à 0.5% de la réponse, $C_p = \frac{Q}{l\rho\Delta T_{\max}}$ en ${}^{J}\!/_{kg.K}$, ρ masse volumique de l'échantillon et l l'épaisseur de l'échantillon. On mesure séparément chaque donnée pour en tirer la conductivité. La Figure 1.34 montre des courbes de diffusivité thermique en fonction de la température. Ces essais sont effectués par méthode flash laser sur trois échantillons différents : deux de types n et un de type p. La chaleur spécifique est mesurée par calorimétrie différentielle en comparant avec un échantillon de référence dont on connaît les propriétés.

$$Q = \left(mC_p\Delta T\right)_{ref} - \left(mC_p\Delta T\right)_{échantillon}$$

Équation 1.50

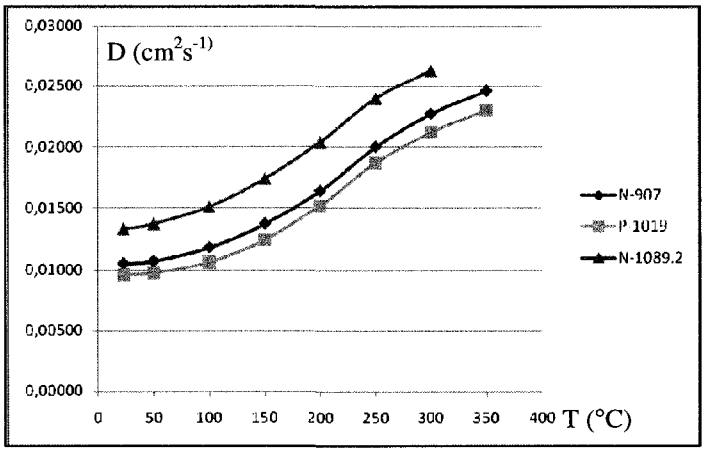


Figure 1.34: Mesure de la diffusivité thermique.

Ces techniques indirectes pour la valeur de la figure de mérite, laissent de grandes incertitudes pour la valeur finale. La méthode Harman permet de mesurer ces valeurs pour en tirer la valeur de figure de mérite directement. On la mesure dans le sens de l'extrusion du matériau. Par cette technique, on observe la variation avec le temps du potentiel pris sur les deux faces d'un échantillon. Dans la Figure 1.35, on montre le profil du voltage en fonction du temps. On impose un courant positif et négatif alternativement en laissant un temps de relaxation.

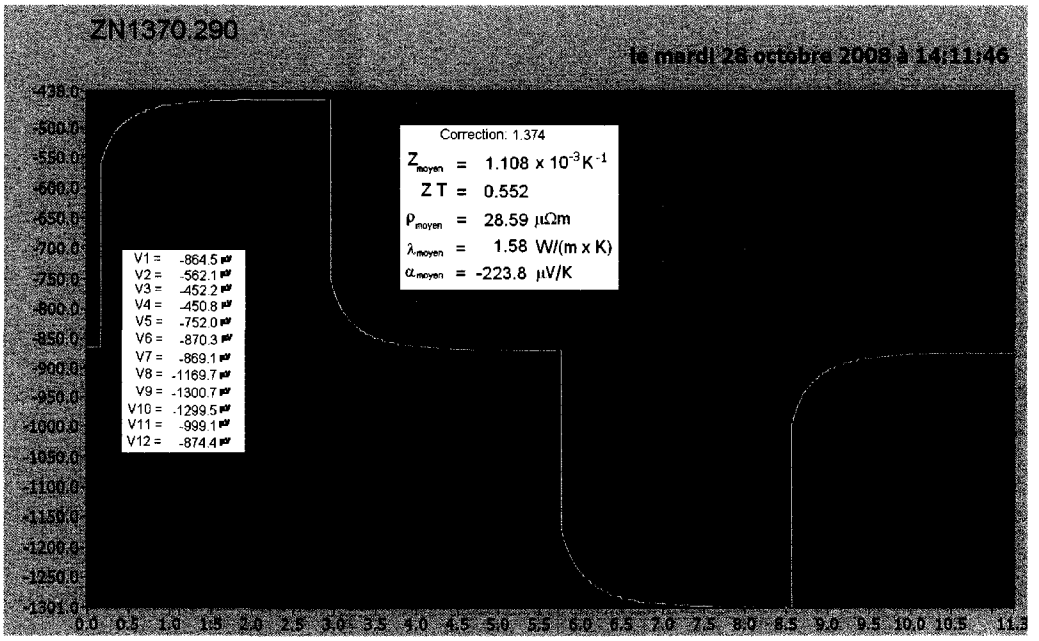


Figure 1.35: Mesure Harman.

Le problème de cette technique est l'utilisation de contacts électriques et thermiques. Il faut s'assurer qu'ils soient bons car on néglige leur influence sur la mesure. En réalité, un coefficient correctif est utilisé pour palier ce problème.

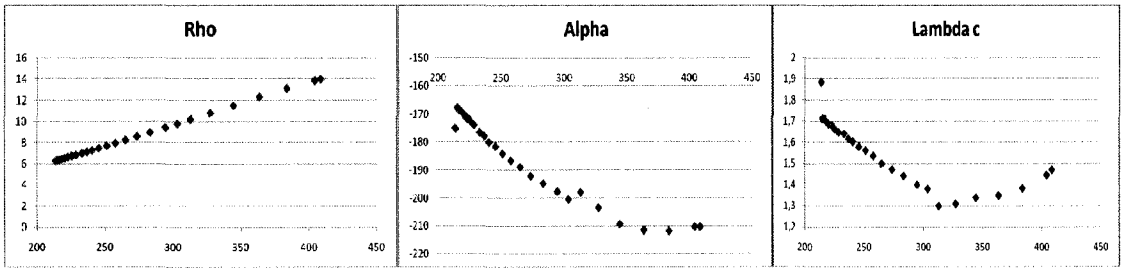


Figure 1.36: Résultats de la mesure Harman pour un échantillon de Bi_2Te_3 de type n.

Les échantillons d'essais ont une dimension de 5×5×5 mm^3 et sont extraits du centre de la barre extrudée qui fait entre 400 à 600 mm de long. Les mesures pour une même section varient selon la position par rapport à l'axe de la tige. Les conditions d'extrusion ont notamment une influence sur ces performances [23, 24]. La comparaison entre un échantillon extrudé et un échantillon obtenu par croissance cristallographique y est faite aussi. Par ailleurs, on remarque que les propriétés thermoélectriques sont meilleures pour le type p que pour le type n.

1.4.2 Caractérisation des propriétés mécaniques

Il reste donc à caractériser les propriétés mécaniques. Celles-ci sont aussi sujettes à des variations avec la température. L'inclusion du dopage et l'apparition des défauts diminuent la résistance mécanique, notamment le module d'Young [25]. La texture donnée par le procédé d'extrusion diminue aussi la résistance mécanique dans certaines directions [7]. L'écoulement dans le cylindre d'extrusion impose des forces et un cisaillement important au bord de la tige, produisant ainsi une forte déformation des grains du matériau et l'alignement de la direction des axes c (radial) et a (axial) du cristal. C'est pour cela que l'on observe une diminution des constantes élastiques dans le sens radial et une augmentation dans les directions tangentielle et axiale. Les mesures se font par ultrason. La vitesse de l'onde est directement reliée aux constantes élastiques :

$$v = \sqrt{\frac{C_{ii}}{\rho}}$$

Équation 1.51

On utilise différents échantillons afin de mesurer les constantes C_{rr}, $C_{\theta\theta}$ et C_{zz} dans les directions principales.

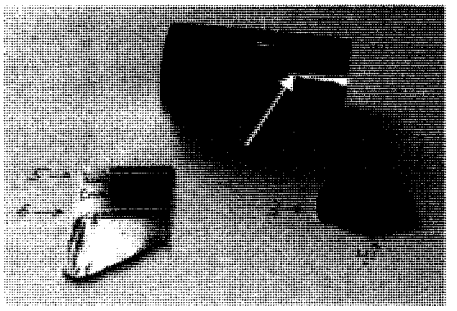


Figure 1.37: Échantillon pour la mesure ultrason.

Sur la Figure 1.37, les lignes 3 et 4 permettent de mesurer la constante C_{zz}. La ligne 0 permet de mesurer C_{rr}. L'échantillon rectangulaire, possédant les lignes 5 et 6, a été taillé au centre d'une tige. On observe l'amplitude du signal ultrasonore en fonction du temps, montrant les échos successifs à travers l'épaisseur de l'échantillon rectangulaire. Les curseurs jaunes et rouges sur la Figure 1.38 identifient les deux premiers échos qui servent à établir le délai de propagation à travers l'échantillon.

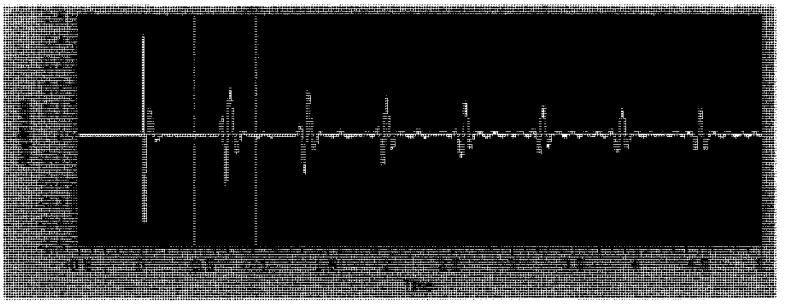


Figure 1.38: Échos de l'onde.

Les valeurs pour un monocristal de Bi_2Te_3 sont données dans le Tableau 1.4 :

Tableau 1.4 Constantes élastiques du tellurure de bismuth[26]

C_{mn}	Bi_2Te_3 (GPa)
C_{11}	68.47
C_{66}	23.35
C_{33}	47.68
C_{44}	27.38
C_{13}	27.03
C_{14}	13.25

Ajouté à cela, la résistance à la rupture en traction d'un élément thermoélectrique lié au cuivre par une interface de nickel et d'alliage d'étain-antimoine, est de l'ordre de 60 MPa et 40 MPa pour les types n et p respectivement. Le nickel placé entre le brasage et le semi-conducteur agit comme barrière de diffusion [27].

L'anisotropie se répercute aussi sur le coefficient d'expansion thermique. Sur un monocristal de tellurure de bismuth, le coefficient de dilatation du cristal est de 22.2×10^{-6} K^{-1} et 12.9×10^{-6} K^{-1} dans la direction des axes c et a respectivement. Pour un échantillon polycristallin de la tige extrudée de type n, les mesures ont révélé des valeurs de 16.8×10^{-6} K^{-1} et 13.9×10^{-6} K^{-1} pour les directions radiale et axiale. La déformation plastique lors du processus est la cause de la variation du coefficient de dilatation et des constantes élastiques près de la périphérie de la tige. Pour le type p, on trouve des coefficients de 18.6×10^{-6} K^{-1} et 14×10^{-6} K^{-1}.

Il reste à caractériser les autres matériaux constituant un module Peltier. Tout d'abord la céramique, étant la fondation du module, est très résistante et possède une faible valeur de dilatation thermique. Elle sert aussi d'isolant électrique. Sa conductivité thermique moyenne est élevée. Toutes les propriétés sont données dans l'article [28]. C'est un matériau isotrope avec une haute limite à la rupture.

Concernant le cuivre, premier élément lié à l'alumine, son expansion thermique est élevée ainsi que sa conductivité thermique. Son épaisseur dans le module agit sur les performances électriques et sur la fiabilité du module. Une faible contrainte le rend plastique très rapidement. Cette particularité permet de relâcher les contraintes dans les éléments thermoélectriques. Sa dépendance en température est faible dans le gradient étudié. Les courbes des Figure 1.19 etFigure 1.20 montrent la variation des propriétés des deux matériaux avec la température. Notre domaine d'étude étant de 20 à 120°C, nos valeurs de module d'Young et de coefficient de Poisson seront considérées constantes.

La couche permettant de lier le cuivre aux éléments thermoélectriques est un alliage d'étain. On peut le composer avec du plomb, élément polluant ou de l'antimoine comme c'est notre cas (Sn-5%Sb). Son comportement plastique est encore plus accentué que celui du cuivre. Sa résistance à la rupture est assez faible. Par ailleurs, ce composé possède un comportement viscoplastique important pour le phénomène de fluage [29]. La vitesse de chargement agit fortement sur la résistance mécanique de l'alliage d'interface. Il est dit que pour des éprouvettes subissant une vitesse de déformation de 10^{-3} et 10^{-4} s^{-1}, la limite à la rupture passe de 42 à 23 MPa.

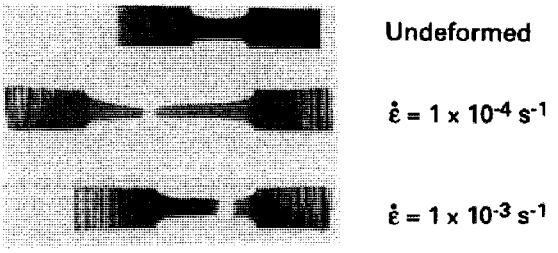


Figure 1.39: Eprouvette de traction de Sn-5%Sb [30].

On remarque sur la Figure 1.39 que la déformation est beaucoup plus importante pour le taux de 10^{-4} s. Les contraintes vont être d'autant plus relaxées que ce phénomène apparaît. Les chargements cycliques diminuent les performances des modules à cause de la fatigue engendrée. Le point de fusion des alliages étain-antimoine est de 245°C, plus haut comparé à l'alliage plomb-étain valant 183°C. Il va donc limiter leur utilisation.

L'écart du coefficient de dilatation thermique avec le cuivre est égal à celui avec le tellurure de bismuth.

En comparaison, l'alliage composé d'étain et plomb est plus ductile. Pour le Sn-37Pb par exemple, le module d'Young est beaucoup plus faible, donc les contraintes vont diminuer. Beaucoup d'autres alliages [30] sont possibles suivant les propriétés utiles dans le domaine d'application. Le choix de l'alliage de brasage est donc très important. Pour la fiabilité du module. D'autres propriétés sont aussi importantes, comme la mouillabilité, car elle caractérise la capacité de l'alliage à s'attacher aux éléments thermoélectriques et la force de cohésion.

Chapitre 2 Introduction de l'article

2.1 Méthode numérique

Pour les simulations numériques, la méthode de couplage direct des champs est utilisée. Le logiciel Ansys permet les deux méthodes : couplage direct ou indirect. Cela dépend du type d'analyse. Par exemple, dans le cas d'une analyse thermomécanique, le champ de contraintes ne va pas faire varier la variation de température dans le système donc aucune itération entre les deux champs n'est nécessaire. Par ailleurs les méthodes de maillage et de résolution sont importantes. Il en existe deux différentes, appelés h-*Method* et p-*Method*. Ansys utilise ces deux méthodes suivant l'élément utilisé. La h-*Method* consiste à augmenter le nombre d'éléments afin d'augmenter la précision des résultats tandis que la p-*Method* augmente le degré des fonctions d'interpolation sans augmenter le nombre de nœuds. La méthode de résolution choisie pour le présent article est la h-*Method*, en prenant toutefois des éléments quadratiques pour limiter le nombre de nœuds.

Comme on l'a mentionné plus haut, le couplage entre les champs est direct. La valeur des contraintes va dépendre du champ de température. Les équations gouvernantes de la thermoélectricité s'écrivent comme suit :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot q = \dot{q}$$

Équation 2.1 : Équation de la chaleur.

$$\nabla \cdot \left(J + \frac{\partial D}{\partial t} \right) = 0 \text{ avec } D = [\varepsilon] \cdot E$$

Équation 2.2 : Équation de continuité de la charge électrique.

$$q = [\Pi] \cdot J - [\lambda] \cdot \nabla T$$
$$J = [\sigma] \cdot (E - [\alpha] \cdot \nabla T)$$

Équation 2.3 : Couplage des équations.

En l'absence d'un champ magnétique, le champ électrique est irrotationnel et donc dérive d'un potentiel scalaire, dans ce cas électrique (théorème de Stokes) :

$$E = -\nabla \varphi$$

Équation 2.4 : Définition du champ électrique.

En régime permanent et en substituant dans les équations 2.1 et 2.2, elles s'écrivent :

$$\nabla([\Pi] \cdot J) - \nabla \cdot ([\lambda] \cdot \nabla T) = \dot{q}$$
$$\nabla \cdot ([\sigma] \cdot [\alpha] \cdot \nabla T) + \nabla([\sigma] \cdot \nabla \varphi) = 0$$

Équation 2.5

Afin de résoudre ces équations, il est nécessaire d'introduire une procédure d'éléments finis. La méthode la plus connue est celle de Petrov-Galerkin. Pour cela, on approxime la température et le potentiel électrique comme suit :

$$T = N \cdot T_e$$
$$\varphi = N \cdot \varphi_e$$

Équation 2.6

L'Équation **2.6** définit T_e comme le vecteur des températures nodales, φ_e le vecteur du potentiel électrique nodal et N le vecteur des fonctions d'interpolations élémentaires :

Par exemple, $$T = [N_1 \quad N_2 \quad N_3 \quad N_4 ...] \cdot \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ ... \end{bmatrix}$$

Avec N_i fonction d'interpolation au i^{ème} nœud. La Figure 2.1 donne en exemple des fonctions d'interpolation pour un élément 2D :

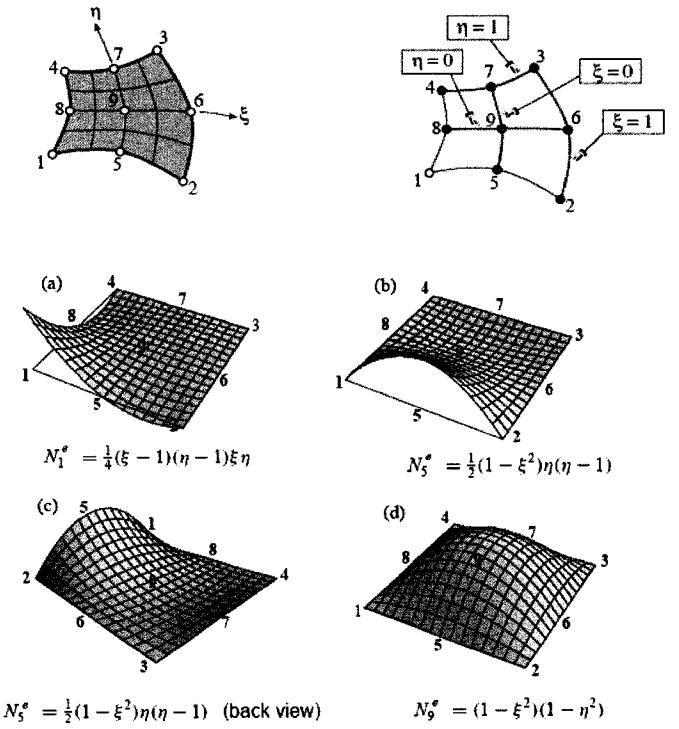


Figure 2.1 : Fonctions d'interpolation.

Dans notre cas, il y a 20 nœuds par éléments. Chaque nœud possède 5 degrés de liberté : les 3 déplacements, le potentiel électrique et la température. Tout compte fait, l'Équation **2.7** donne le système général thermo-électro-structurel :

$$\begin{bmatrix} M & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \ddot{u} \\ \ddot{T} \\ \ddot{V} \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} C & 0 & 0 \\ C^{Tu} & C^{T} & 0 \\ 0 & 0 & C^{V} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{T} \\ \dot{V} \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} K & K^{uT} & 0 \\ 0 & K^{T} & 0 \\ 0 & K^{VT} & K^{V} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ T \\ V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ Q \\ I \end{pmatrix}$$

Équation 2.7 : Forme matricielle.

On définit les termes thermoélectriques dans l'Équation **2.8** :

$$K^{T} = \int_{vol} \nabla N \cdot [\lambda] \cdot \nabla N \cdot d(vol) = \text{matrice de rigidité thermique élémentaire}$$

$$K^{V} = \int_{vol} \nabla N \cdot [\sigma] \cdot \nabla N \cdot d(vol) = \text{matrice de rigidité électrique élémentaire}$$

$$K^{VT} = \int_{vol} \nabla N \cdot [\sigma] \cdot [\alpha] \cdot \nabla N \cdot d(vol) = \text{matrice de couplage de l'effet Seebeck}$$

Équation 2.8 : Matrices thermoélectriques.

On ne définira pas les matrices devant les deux premiers vecteurs car le temps n'est pas pris en compte dans la méthode de résolution. Toutefois, il est intéressant de les définir pour les termes thermomécaniques :

$$K = \text{matrice de rigidité élémentaire} = \int_{vol} [B]^{t} [D][B] \cdot d(vol)$$

$$K^{uT} = \text{matrice de rigidité thermo élastique élémentaire} = -\int_{vol} [B]^{t} \{\beta\} \left(\nabla \{N\}^{t}\right) \cdot d(vol)$$

$$[C^{Tu}] = \text{matrice d'amortissement thermo élastique élémentaire} = -T_0 [K^{ut}]^{T}$$

$$C^{T} = \text{Matrice de chaleur spécifique élémentaire}$$

Équation 2.9 : Matrices thermomécaniques.

Des matrices carrées de la taille du nombre de degrés de libertés sont ensuite construites par le logiciel.

2.2 Contenu de l'article

L'article a été accepté pour présentation à la 27ème Conférence International sur les Thermoélectriques (ICT). Il est prévu de publier cet article dans la revue *Journal of Electronic Materials* avec comité de lecture. Il présente un modèle de générateur thermoélectrique étudié pour les simulations thermomécaniques, choisi de telle sorte que l'on puisse fabriquer quatre modules dans une section de tige extrudée. Un souci de productivité est donc pris en compte. Ce mode de fabrication des modules nous oblige à introduire deux repères spécifiques : un en coordonnées cylindriques, afin de prendre en compte l'isotropie transverse des pattes de thermoélectriques, et l'autre, en coordonnées cartésiennes, utile pour les autres matériaux constituant le module, et ayant des propriétés mécaniques isotropes. Leurs propriétés thermiques et thermoélectriques sont elles aussi isotropes. L'objectif est d'analyser la fiabilité d'un générateur soumis à une différence de température de 100°C. Les paramètres intervenant dans l'étude sont la hauteur des pattes et les conditions frontières sur les plaques de céramique. La hauteur des pattes est importante car elle va influer sur les performances du module. La réduction de leur hauteur est primordiale pour obtenir une plus grande densité de pompage de chaleur. On va donc étudier au total neufs simulations différentes : trois hauteurs de pattes et trois conditions frontières différentes. Par ailleurs, une comparaison est réalisée entre le modèle utilisant des propriétés isotropes constantes pour les éléments thermoélectriques et le modèle s'approchant de la réalité, prenant en compte des propriétés variables d'une patte à l'autre. Un modèle multilinéaire est mis en place afin d'observer l'influence de la plasticité de l'alliage Sn-Sb et du cuivre sur la réduction des contraintes.

Chapitre 3 Numerical Simulation of the Thermomechanical Behavior of Extruded Bismuth Telluride Alloys Modules

Th. Clin, S. Turenne, D. Vasilevskiy, R.A. Masut

École Polytechnique de Montréal, C.P. 6079, Succ. Centre-Ville, Montréal (Québec), H3C 3A7, Canada
sturenne@polymtl.ca

Abstract

Our research group developed over the past years a method to produce n- and p-type bismuth telluride alloys by mechanical alloying and powder extrusion. The resulting extruded rods possess a particular crystalline texture, which is advantageous for module fabrication processes, but may have an impact on the stress distribution in modules under operating conditions. The reported mechanical strength of the extruded polycrystalline thermoelectric (TE) materials is larger than those of materials produced by directional solidification allowing the fabrication of thinner TE modules in order to increase power densities. The stress arising from the resulting higher thermal gradients in thinner legs can eventually become greater than the TE material strength which would limit further module thickness reduction. We present results of numerical simulations of TE modules behavior undertaken to evaluate the effect of leg lengths (1 mm, 500 and 250 μm) on the stress level imposed by a given temperature difference that could cause their fracture. It appears that (a) the boundary conditions imposed on the outer (ceramic) surfaces

delimiting the module (e.g. both free or one anchored on a flat rigid surface) and (b) the mechanical strength of the soldering alloys, in contact with the TE alloy, condition in an important way the stress distribution on the TE alloy elements. We have also examined the effect of the crystalline texture of the extruded TE materials on the distribution and levels of stress, and found it to be marginal.

Introduction

Most current thermoelectric (TE) modules operating near ambient temperature are based on $(Bi_xSb_{1-x})_2(Te_ySe_{1-y})_3$ alloys which are selected to optimize the thermoelectric properties of n- and p-type materials. These alloys are elaborated conventionally by directional solidification resulting in elongated grains having the *c*-axis of the crystal structure oriented perpendicularly to the direction of growth in order to better take advantage of their anisotropic thermoelectric properties. Our approach is to produce fine powders (0.1 to 10 μm range) of bismuth telluride based alloys by mechanical alloying followed by hot extrusion. The hot extrusion process, as described in detail elsewhere[1-3], renders rods with a recrystallized microstructure and a specific crystalline texture. The texture results from the strong shearing of the material in the extrusion die causing the alignment of weak basal planes (perpendicular to the crystallographic *c*-axis) in a direction parallel to the extrusion axis. The texture has been characterized in the past in terms of the thermoelectric properties[4], the elastic constants of the materials[5] and the mechanical strength as well[3]. By keeping a tight control on the charge carrier concentrations, the room temperature thermoelectric figures of merit of n- and p-type alloys obtained by extrusion are 2.85×10^{-3} K^{-1} and 3.3×10^{-3} K^{-1} respectively[4]. These values are close to those measured on conventionally grown alloys. The mechanical properties of extruded materials are, however, much higher due to the strengthening imparted by a microstructure consisting of small grains. From experimental evaluation by three-point bending tests, we obtained mechanical strengths in the order of 60 and 40 MPa for n- and p-type materials respectively[3].

The higher strength of extruded bismuth telluride alloys enables the processing of shorter legs for the fabrication of TE modules. The fabrication of thinner modules allows the applications engineer to take advantage of the increased power density that can be pumped by such devices. Published results already show module legs as short as 200 μm[6]. The mechanical strength of the materials should be high enough to avoid fracture during the module fabrication processes and module operation (temperature cycling). We already presented results from numerical simulations and experimental tests[5] on the resistance of extruded polycrystalline bismuth telluride alloys exposed to thermal shocks that occur typically during metallization (Ni diffusion barrier) and soldering (Sn-Sb). It was verified that under controlled preheating conditions, it was possible to avoid the formation of cracks in the material under thermal shocks of nearly 200°C (cooling or heating). It becomes now important to evaluate the level of stress generated during the operation of the TE module, and the possible impact of the texture on the stress level and distribution in the module. The hot and cold sides of the module in cooling applications or in electric current generation impose a thermal gradient in the thermoelectric legs that leads to mechanical stress due to the differential thermal expansion of the material. Other stress components could derive from the anisotropy of the coefficient of thermal expansion (CTE) typically observed for bismuth telluride alloys, and from the expansion mismatch between thermoelectric alloys, soldering alloys, conductors and substrate materials encapsulating the whole device.

The aim of the present paper is twofold: (1) to evaluate the order of magnitude of thermal stress generated by the operation of a module under an imposed difference of temperature between the hot and cold sides and (2) to analyze the possible impact of the texture on the stress distribution in the TE alloy elements of the module. This will correspond to the operation of a thermoelectric generator (TEG). For the above purposes, we will simulate numerically the behavior of modules of a specific configuration under different conditions, varying mainly the length of TE legs and the installation conditions which may impose rigid or free-standing outer faces. The numerical simulation by finite element analysis will show the location of points of higher stresses in the module, the level of stress and the limitations imposed by the reduction of module thickness under normal conditions. These calculations will first be carried out by using average (isotropic) values of thermoelectric and mechanical properties for TE materials. In a second step, the particular anisotropic properties of the extruded materials will be considered to evaluate the influence of anisotropy on the stress level and distribution and on module behavior. The simulation results show the location of high stress points on the TE alloy legs, an estimate of its value and the important role played by the strength of the soldering alloy in intimate contact with the TE material. The localized deformation has already been revealed by other researchers who measured experimentally the amplitude of strain in the solder pads for a TE cooling micromodule[7]. The simulation results also highlight the importance of the mechanical constraints imposed on the module in determining the level and distribution of mechanical stress. We emphasize that we have already validated in part these simulations, which makes

them an ideal tool for module manufacturers, as they will be able to apply adequate corrections to device design to increase their reliability and lifetimes.

Thermoelectric Materials Characteristics and Properties

For numerical simulation purposes, we consider the properties of the TE materials resulting from the extrusion process. The specific alloys we used in this study were chosen for their optimal properties at ambient temperature. Their chemical compositions are $(Bi_{0.2}Sb_{0.8})_2Te_3$ and $(Bi_{0.95}Sb_{0.05})_2(Te_{0.95}Se_{0.05})_3$ for p- and n-type alloys respectively. The typical extruded rods have 2.5 cm diameter and are about 1 m long. Discs of different thicknesses are cut from two rods (one of each type) to produce the legs of the TE modules. The description of the coordinate system used in this paper is shown in Figure 3.1 with respect to the geometry of the extruded rods. We also show in Figure 3.1 a shaded area which is used to fabricate one module with the configuration which will be used for the simulations presented in this paper.

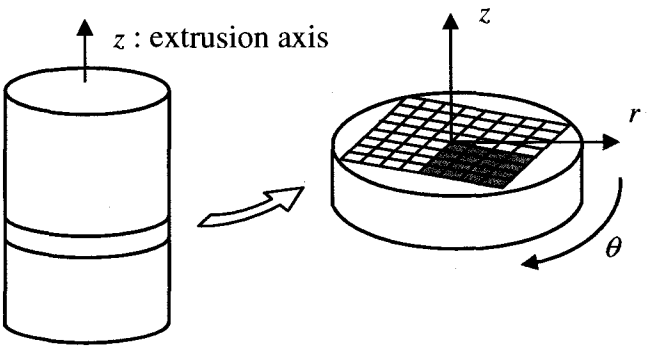


Figure 3.1: Coordinate system related to the extruded rod and cut disc. The grey portion on the disc illustrates (for one type, n or p) the quarter of the disc surface used for the fabrication of legs for a single module. The thickness of the cut disk corresponds to the length of the legs. A similar portion from the material of the opposite type is also necessary to fabricate the module.

The anisotropy of the different properties is related to the crystal structure of the bismuth telluride alloys combined with the texture obtained from the extrusion process. As mentioned before[2], the shear strain of the material tends to align the basal planes in a direction parallel to the extrusion axis. The texture of the extruded rod is then characterized by the *a*-axes of each grain oriented preferentially parallel to the axial (z) and tangential (θ) directions of the rod while the *c*-axis is oriented in radial direction (r). From our model and experimental observations, the properties measured along the axial and tangential directions are similar. To describe the thermomechanical behavior of the material illustrating the relation between the thermal gradient and the generated stresses, the dominant properties to consider are the CTE and the elastic stiffness constants. The Seebeck coefficient, thermal conductivity and electrical resistivity are also anisotropic

but here will be considered isotropic since their effects on thermal stresses should be marginal. However, these thermoelectric properties vary with temperature, and these variations are incorporated in the simulations. In the past we carried out experiments to evaluate the thermoelectric properties in the axial and radial directions[2]. Their ranges of values in a typical temperature range of 20-120°C for the operation of TE modules are given in Table 3.1. Also given in Table 3.1 are the values of CTE that were considered more appropriate when assuming isotropic n- and p-type materials in the numerical simulations.

Table 3.1: Properties of p- and n-type bismuth telluride based alloys used for numerical simulations. Ranges of values of TE properties correspond to their variation between 20 and 120°C.

		p-type	n-type
CTE (10^{-6} K^{-1})	Radial r	18.6	16.8
	Axial z	14.0	13.9
	Isotropic	16.8	16.8
Seebeck Coefficient α (μV/K)		223 to 233	-197 to -211
Thermal Conductivity λ (W/m·K)		1.22 to 1.37	1.78 to 1.98
Electrical Resistivity ρ (μΩ·m)		12.8 to 21.2	9.5 to 13.5
Density (kg/m^3)		6858.7	7858.7

Due to the radial gradient in shear strain associated with the deformation profile in the extrusion die, the texture normally increases from the center of the cut disc to its periphery. To more precisely evaluate the behavior of the disc under thermal shock when subjected to rapid heating or cooling, we obtained the variation of the elastic constants along the radius from ultrasonic measurements[5]. The results are given in Figure 3.2. The C_{ij} constants refer to the plane i and orientation j of the coordinate system respectively; the values of C_{ij} when $i \neq j$ correspond to shear components of elasticity constants. The variations of elastic stiffness constants are in good correlation with the increase of crystalline texture toward the periphery of the discs.

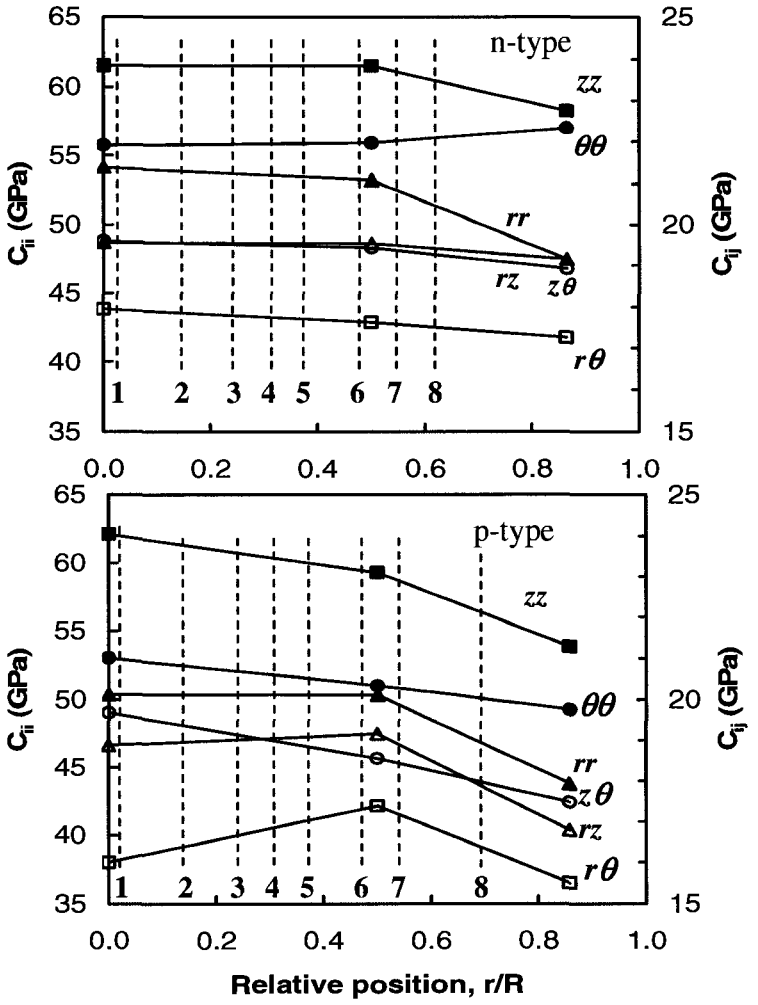


Figure 3.2: Variation of elastic stiffness constants along the radius of the extruded rod (R= 1.27 mm). The numbers refer to positions of legs in the disc (see details for the anisotropic simulation and Figure 3.5). The intersection of the vertical line associated with each number and the curve corresponding to a given property indicates the value of that property for a given position of the leg in the module.

In general, the elastic stiffness constants C_{ii} are in the order of 50 GPa. For the numerical simulations of modules with isotropic values, the chosen value of the elastic modulus was 47 GPa and for the Poisson coefficient it was 0.4. For the case of anisotropic materials, we linearly interpolate elastic constants between the experimental data obtained previously and shown in the graphs of Figure 3.2.

Module Geometry and Numerical Simulation Parameters

The geometrical configuration of the TE module defined for the numerical simulation is shown in Figure 3.3. It consists of a 7×7 mm^2 module containing 34 legs. The section of each leg is 0.65×0.65 mm^2 and the distance separating the legs is 0.5 mm. At the end of each leg, there is usually a 4 μm nickel metallization layer acting as a diffusion barrier. This thin layer was not considered in the simulation. The legs are soldered to150μm thick copper conductor strips with an intermediate 65μm thick soldering Sn-Sb alloy. The copper strips are sandwiched between two 0.55 mm thick alumina substrates (only the bottom one is shown in Figure 3.3). The length of the legs was a variable in the present study. Lengths of 1 mm, 500 and 250 μm were considered to evaluate the influence of this major parameter on the level of stress generated by the thermal gradient. Figure 3.3 also shows that two spots for legs are vacant for wire welding.

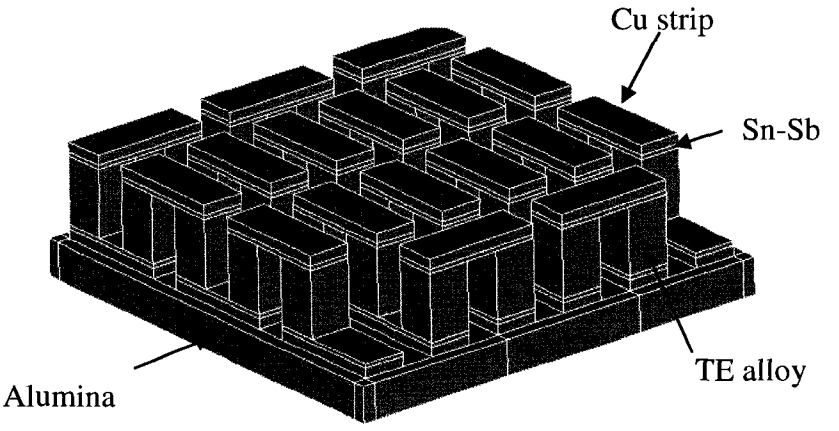


Figure 3.3: Geometry of the TE module simulated numerically (without the upper alumina substrate).

The numerical simulation of TE module behavior was carried out using the ANSYS finite element software. The basic equations for thermoelectric material simulation are given in a recent paper[8] written by the software developer. The calculations were based on the assumption of steady-state conditions obtained after imposing a given temperature interval between the cold and hot sides. Quadratic elements (Solid 226) with 5 degrees of freedom per nodes were used (3 components of displacement, temperature and voltage). The accuracy of this kind of element is higher and it takes into consideration nonlinearity of mechanical stress distribution. The meshing details of a part of the module are shown in Figure 3.4. As shown, the 1 mm legs are built with 2×2×2 elements. For 500 μm and 250 μm legs, we used 3×3×2 and 3×3×1 elements respectively. It was verified that no gain in precision would be obtained by further reducing the element size. For the first part of the simulation with average isotropic

properties, the same values of the properties (those in Table 3.1 and elastic modulus) were given to all the alternating p- and n-type legs composing the module. However, when the anisotropy of properties in the extruded rods were considered in the second part of the study, different values of elastic stiffness constants were given to each individual TE leg. As shown in Figure 3.1, it is assumed that a module would be built from the quarter of the surface of the extruded rod section (for each n- and p-type) by dicing and assembly. The texture of the rod can then be reflected in the distribution of TE legs along the radius of the rod an along the tangential direction. As mentioned before, if we consider a variation of the elastic constant along the radius of the disc cut from the rod, we obtain a map of legs with properties related to their radial position. This map and the consequent elastic properties distribution that were attributed to each leg is shown in Figure 3.5. The number on each leg refers to those given by the position of the grid lines in the graphs of Figure 3.2.

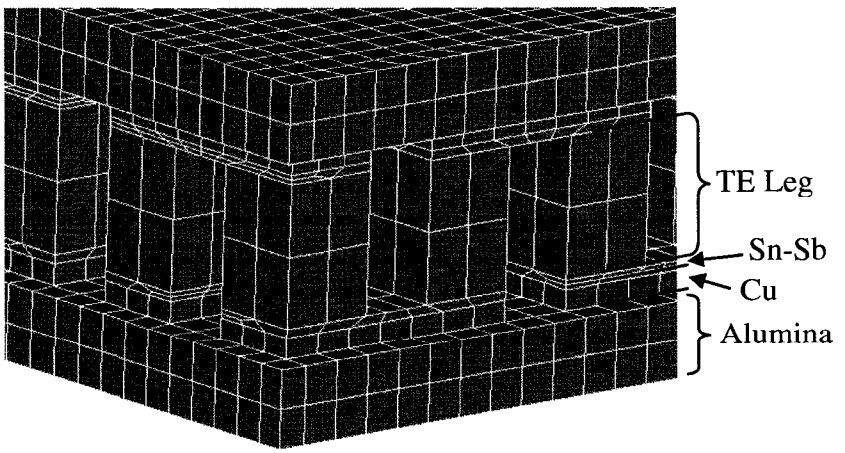


Figure 3.4: Meshing of the TE module showing the relative size of the elements for legs of 1 mm.

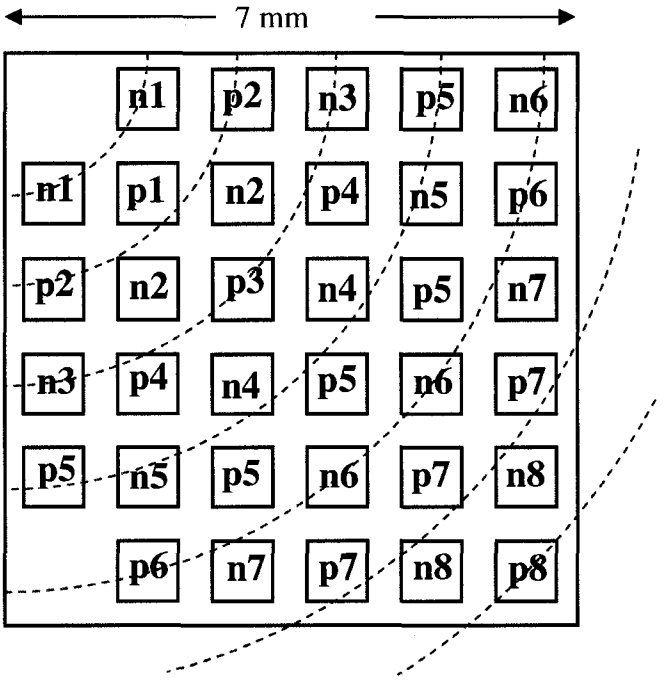


Figure 3.5: Map of p- and n-type legs showing how their properties are related to their position in the extruded rod. A given number indicates the same elastic stiffness constants, whose values can be obtained from Figure 3.2. The upper left corner corresponds to the center of the extruded rod.

Due to thermomechanical coupling between the various components of the module and the legs, it is also necessary to define their properties which are necessary for the simulations. These properties are given in Table 3.2. It is important to consider the elastoplastic behavior of both the copper conductors and the soldering alloy since a large part of the thermal stress generated in the leg could be relaxed by plastic strain of these materials. The work hardening occurring between the yield stress and the ultimate tensile stress is assumed to be linear. For copper and alumina, the CTE values depend on

temperature in the range between -50 and 190°C. It is expected that the CTE mismatch between the TE leg, the solder and the copper conductor generating shear component of stress will be transmitted to the weaker material to cause plastic deformation instead of TE leg fracture.

Table 3.2: Properties of other materials used in module assembly.

	Copper Conductor	Sn-Sb Solder	Alumina Substrate
CTE (10^{-6} K^{-1}) between -50 and 190°C	16.7 – 17.3	27.0	4.89 – 6.03
Young's Modulus (GPa)	115	44.5	380
Density (kg/m^3)	8940	7260	3970
Poisson's Coefficient	0.31	0.33	0.26
Yield Stress (MPa)	70	26	-
Ultimate Tensile Strength (MPa)	250	41	-
Plastic Elongation (%)	69	38	-

For the numerical simulations, temperature differences ΔT of 40, 70 and 100°C are imposed to outer alumina surfaces of the module. The cold face is always kept at 20°C. The electric current resulting from these conditions is calculated by assuming a load resistance of 5 ohms. To evaluate different operating conditions of the TE modules, three boundary conditions were simulated. The first one consists of free surfaces of the module; no mechanical stress is applied to the external surfaces of the alumina substrates. The other two conditions assume that the module is anchored (simulating brazing) on the cold side or on the hot side. This imposes one rigid condition with no displacement of the nodes on the brazed surface and a consequent higher level of generated stress in the module components.

Results of Numerical Simulations

The applied temperature gradient to TE modules enables the calculations of 3D stress distribution through the components of the modules. An illustration of the thermal stress distribution is shown in Figure 3.6 for a free standing module (both surfaces unconstrained; the cold side is at the bottom of the module). In this case, the temperature difference deforms the module, as depicted in the figure. The relative displacement of the center of the substrate with respect to the corners is in the order of 2 μm in the z direction perpendicular to the substrate face. The stress values will be presented in terms of the local Von Mises stress. It is computed from the second deviatoric stress invariant and gives a measure of the resolved shear stress that could cause plastic deformation if its value is greater than the yield strength of the material. It is then a scalar stress value obtained from the stress tensor by the Équation **3.1**:

$$\sigma^{vM} = \sqrt{\frac{(\sigma_{11}-\sigma_{22})^2+(\sigma_{22}-\sigma_{33})^2+(\sigma_{33}-\sigma_{11})^2+6(\sigma_{12}{}^2+\sigma_{23}{}^2+\sigma_{31}{}^2)}{2}}$$

Équation 3.1

where the σ_{ij} are the elements of the stress tensor. The Von Mises stress distribution results are color coded (blue minimum, red maximum) and are typical for all the various conditions simulated. One can observe that the stress in the thermoelectric alloy legs is concentrated mainly at the interface between the legs and the conductors. Also, it is clear that, due to the loading of the assembly which can be translated by bending of TE legs, the higher stress values are located in the top or bottom corners of the legs. These values could vary from one leg to the other as shown in Figure 3.7 by the stress distribution

pattern along a line passing through the leg corners. On this graph, each data point corresponds to the stress level at a given node of the mesh (four nodes per leg). It is clear that by increasing the ΔT between the hot and cold sides, the level of stress increases accordingly.

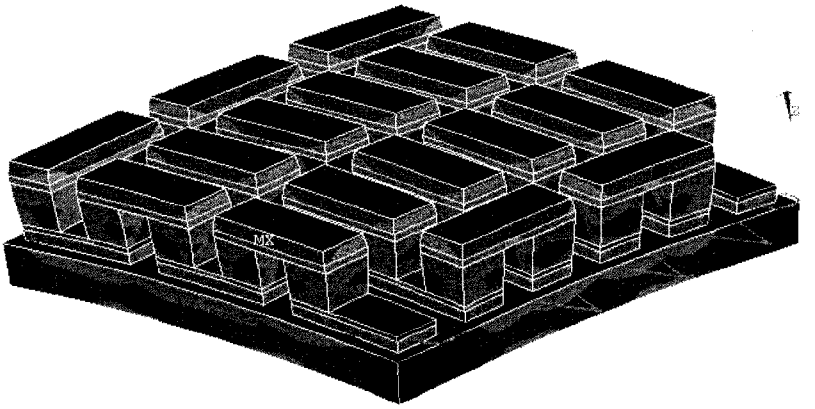
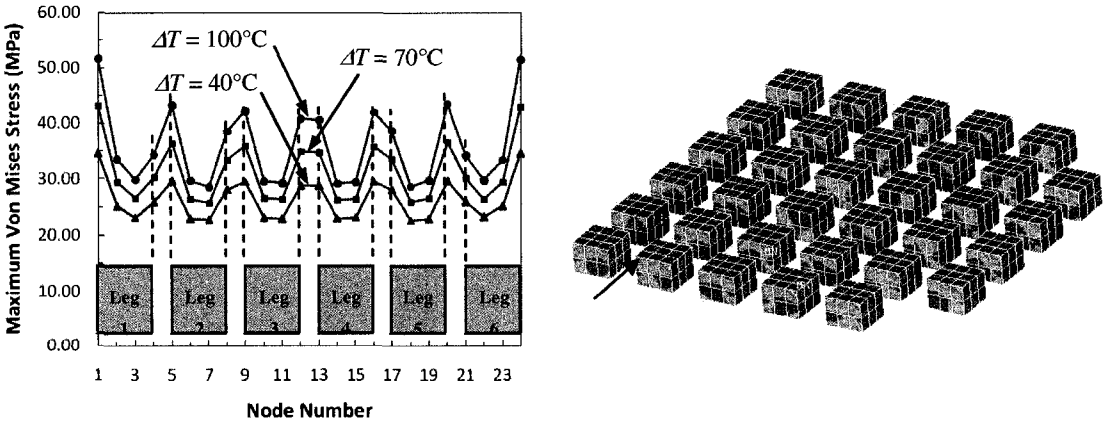


Figure 3.6: Von Mises stress distribution in a module subjected to a temperature difference of 100°C while keeping unconstrained surfaces (cold side on the bottom). The top alumina substrate is included in simulation but not shown. The red color represents higher calculated Von Mises stress values.



a) b)

Figure 3.7: a) Stress distribution along a line passing through the corners of the legs located in the direction of the arrow, as shown in the module representation (b). Stress values are given at each node of the mesh for the hot side of the legs in a free standing module, for the three ΔT values simulated.

In the following results, maximum values of the calculated Von Mises stress will be given for a ΔT of 100°C. By taking all the stress values along a line, it is possible to represent only the maximum value for a given case. This maximum is not always located in the same leg but is always located at the corner of a leg, at the interface with the solder. These results are presented in Table 3.3 for the various module configurations (boundary conditions and leg lengths) and materials properties (isotropic and anisotropic).

Table 3.3: Maximum Von Mises stress (MPa) in different module configurations for a temperature difference of 100°C between the hot and cold sides.

		Legs Length					
		1 mm		500 μm		250 μm	
		Isotropic	Non-Iso	Isotropic	Non-Iso	Isotropic	Non-Iso
Unconstrained surfaces	Cold side	27.9	28.3	38.2	37.6	43.0	41.3
	Hot side	45.1	43.5	55.9	54.8	53.1	52.0
Cold side anchored	Cold side	54.0	53.4	56.5	53.3	50.3	48.1
	Hot side	50.2	48.3	54.1	53.6	51.7	49.3
Hot side anchored	Cold side	24.8	24.1	37.0	38.5	42.3	41.2
	Hot side	36.0	35.0	51.5	50.3	56.0	54.9

For the case of a free-standing module with unconstrained surfaces, the development of stress is related mainly to the mismatch of the thermal expansion coefficient between the different materials constituting the module. We notice that the stress level increases when the length of the legs decreases from 1mm to 500 μm. This behavior is however different when passing from 500 to 250 μm. We also observe that the stress level is significantly higher on the hot side of the module. This is what should be expected since the equilibrium state of the module is taken at 20°C. By imposing a high temperature on

the hot side, the legs and the substrate tend to expand while the cold side impedes this expansion.

By anchoring one face of the module, we impose a null deformation in the plane of the substrate. This brings supplementary stress on the legs and modifies the stress distribution. Results in Table 3.3 reveal that for a cold side anchored module, the expansion of the cold side is limited, thus increasing its level of stress. Because the hot side sees a cold side with no deformation, as it is almost the case in the free-standing module, the stress level on the hot side is consequently similar and shows the same tendencies as for the free standing case (unconstrained surfaces). On the contrary, the stress level on the cold side increases to the same level as that on the hot side, due to its inability to expand, as already remarked. Again, but appearing more clearly in this case, the stress level reduces when passing from 500 to 250 μm legs length. This somewhat surprising result can be understood by noticing that the soldering alloy has been plastically deformed in these cases. By considering a rigid behavior of the soldering alloy, preliminary calculations revealed that stress values could be two to three times higher.

If now we consider the case of hot side anchored modules, the trend is different. By limiting the expansion of the hot side, strong stresses are generated on this side. However, the stress can be relaxed along the legs towards the cold side resulting in slightly lower values on this latter side when compared with the unconstrained case. The

cold side undergoes lower stress level because the anchoring of the hot side eliminates the impact to the stress component resulting from its expansion. The temperature gradient along the legs produces, however, a level of stress of the same order than for the other cases. The effects of the three cases of boundary conditions are illustrated in Figure 3.8 where the deformation of the modules is shown amplified by a factor of 75 to render it visually clear. The limitation of the deformation by anchoring clearly brings a complex stress distribution with higher stress at the corners of the legs.

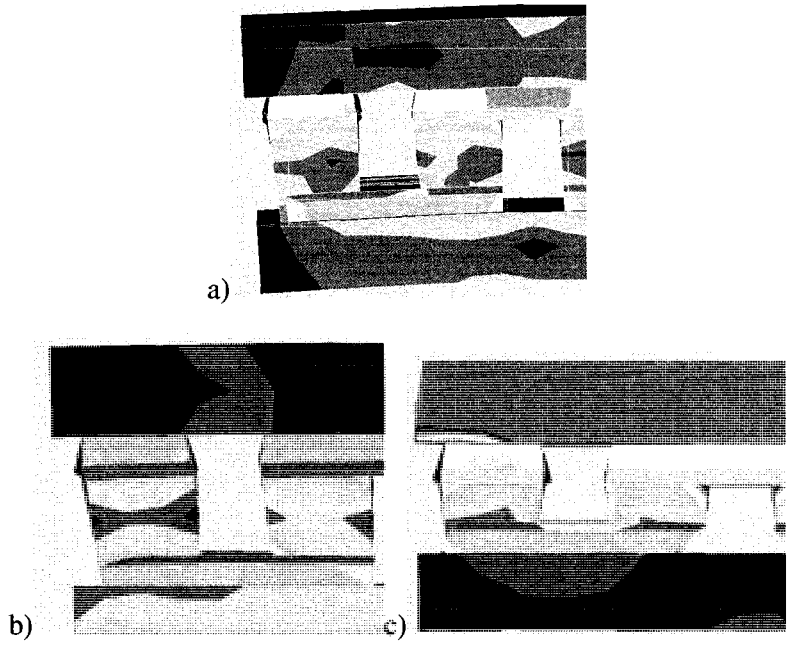


Figure 3.8: Magnified deformation of modules (one p-n couple shown) under boundary conditions a) free-standing (legs of 500 μm), b) cold side ceramic surface anchored (legs of 500 μm) and c) hot side anchored (legs of 250 μm). Deformation amplification factor: 75. The color code indicates the Von Mises stress levels (red: higher value, blue: lower value).

In all cases, the maximum stress level is on the order of 50 MPa for a ΔT of 100°C. By reducing the temperature interval, the maximum stress level will also be reduced. It is also remarkable that the maximum stress level attains a certain limit by reducing the legs length. This module behavior is caused by the ductile soldering alloy which undergoes plastic deformation when the stress level exceeds the yield strength. This deformation has the effect of relaxing the stress level in the legs. For example, by using Pb-Sn alloys instead of the more mechanically resistant Sn-Sb soldering alloy, its yield strength would be smaller and the maximum stress level in the TE alloy legs would be further reduced. Since the Von Mises stress corresponds to an average stress value of all the stress components, it is not easy to correlate this value with that of materials strength evaluated by three-point bending experiments. However, the present work illustrates that the polycrystalline bismuth telluride alloys elaborated by hot extrusion have mechanical strengths of the same order of the stress generated by different operation modes of a TEG module under a 100°C temperature difference, which may not be the case for the directionally grown conventional material.

It is also interesting to note that the anisotropy of mechanical properties resulting from the texture of the extruded rods does not modify significantly the maximum stress level in the legs. The fabrication of modules by cutting and dicing directly from the extruded rods enables microfabrication technologies for the deposition of diffusion barrier and soldering layers. Our simulation results imply that the measured radial variation of

properties is not an important factor whose impact needs to be taken into account in the evaluation of module performance and long term reliability.

Since the above analyses has been carried out considering only the maximum value of the stress present in the whole module, we have not quoted uncertainties for the values shown on Table 3.3, as they would not be representative of the uncertainty in the values obtained by the simulation which are within 2%. Variations of materials properties less than 5% will not produce significant variation in the simulated stress levels which are mainly influenced by the boundary conditions and the temperature gradient. One of the main results to be retained from the simulations is the sufficient mechanical strength of the extruded bismuth telluride based alloys to withstand a temperature difference of 100°C imposed to a TEG module.

Conclusions

The present work exploits finite element analysis of the TE module behavior under thermal stress, using an approach which incorporates the measured mechanical and thermoelectric properties of the thermoelectric materials involved. This approach has been validated in part by looking at the temperature evolution with time in quenching experiments characterized by different thermal shock amplitudes ΔT (during cooling and heating), which were carried out on n-type and p-type materials. It was shown in ref. 5 that the simulation results are almost perfectly superimposed to those obtained from experiments. By considering different mechanical boundary conditions and by taking into account the real texture of the extruded materials, the following conclusions can be pointed out from the simulations:

- The stress level generated in the TE legs by the imposed temperature difference depends mainly on the boundary conditions characterizing the module operation and on the CTE mismatch between the various materials constituting the module.
- For all the cases simulated with a ΔT of 100°C, we obtained a maximum Von Mises stress value in the order of 50 MPa. The maximum stress is always located at the corners of the legs. Depending on the limits in deformation imposed on the hot or cold sides of the module, the stress level on the hot side could be equal or higher than the stress on the cold side.
- The yielding of the soldering alloy may happen as the temperature gradients increase in shorter modules (e.g. 250 μm for a ΔT of 100°C). This yielding acts

as a major factor limiting the stress level in the legs. The plastic deformation of the soldering alloy relaxes the buildup of stress at the corner of the legs.

- The radial variations of the elastic properties of the extruded rods originating from the texture do not modify significantly the stress level or its distribution in the modules when compared to modules built from materials with isotropic properties.

These conclusions are based on simulations carried out on a geometrical configuration which is typical of manufactured modules, and there are no reasons to think that they will not stand for TEG configurations used in most applications.

Acknowledgment

The financial support of the National Science and Engineering Research Council of Canada under the strategic project program is gratefully acknowledged.

References

1- Simard J.-M., Vasilevskiy D., Bélanger F., L'Ecuyer J. and Turenne S., « Production of Thermoelectric Materials by Mechanical Alloying – Extrusion Process », *Proc. 20th International Conference on Thermoelectrics*, Beijing, China, June 2001, pp. 132-135.

2- Bélanger F., Simard J.-M., Vasilevskiy D., Turenne S. and L'Espérance G., « Improvement of Thermoelectric Properties of Bismuth Telluride Alloys by Controlling the Microstructure through Mechanical Alloying and Extrusion », *Proc. Advances in Powder Metallurgy and Particulate Materials*, New Orleans, Louisiana, May 2001, Part 9, pp. 88-98.

3- Vasilevskiy D., Simard J.-M., Bélanger F., Bernier F., Turenne S. and L'Ecuyer J., « Texture Formation in Extruded Rods of $(Bi,Sb)_2$ $(Te,Se)_3$ Thermoelectric Alloys », *Proc. 21st International Conference on Thermoelectrics*, Long Beach, California, August 2002, pp. 24-27.

4- Simard J.-M., Vasilevskiy D. and Turenne S., « Influence of Composition and Texture on the Thermoelectric and Mechanical Properties of Extruded $(Bi_{1-x}\ Sb_x)_2$ $(Te_{1-y}\ Se_y)_3$ Alloys », *Proc. 22nd International Conference on Thermoelectrics*, La Grande Motte, France, August 2003, pp. 13-18.

5- Pelletier R., Turenne S., Moreau A., Vasilevskiy D. and Masut R.A., « Evolution of Mechanical Stresses in Extruded $(Bi_{1-x}Sb_x)_2(Te_{1-y}Se_y)_3$ Thermoelectric Alloys subjected to Thermal Shocks present in Module Fabrication Processes», *Proc. 26th*

International Conference on Thermoelectrics, Jeju, South Korea, June 2007, pp. 49-54.

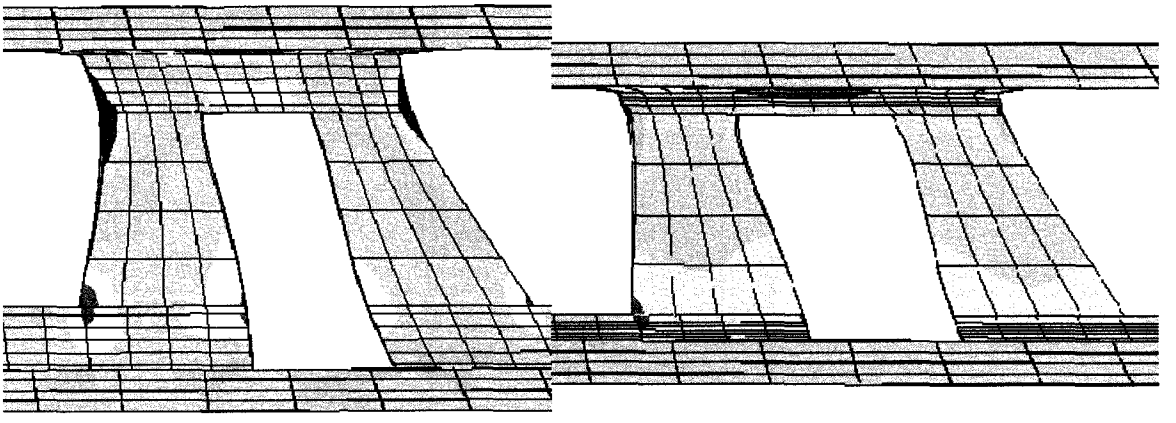
6- Bierschenk J. and Gilley M., « Assessment of TEC Thermal and Reliability Requirements for Thermoelectrically Enhanced Heat Sinks for CPU Cooling Applications », *Proc. 25th International Conference on Thermoelectrics*, Vienna, Austria, August 2006, pp. 254-259.

7- Sun Y., Pang J.H.L. and Fan W., « Nanoscale Deformation Measurement of Microscale Interconnection Assemblies by a Digital Image Correlation Technique », Nanotechnology, vol. 18, 2007, pp. 1-8.

8- Antonova E.E. and Looman D.C., « Finite Elements for Thermoelectric Device Analysis in ANSYS », *Proc. 24th International Conference on Thermoelectrics*, Clemson University, North Carolina, USA, June 2005, pp. 200-203.

Chapitre 4 Résultats complémentaires

Des résultats supplémentaires peuvent être ajoutés à la suite de cet article. Un autre design de module a été mis en place afin d'étudier le comportement thermomécanique en fonctionnement Peltier. L'étude d'un thermocouple permet aussi de paramétrer géométriquement le modèle plus facilement et d'effectuer de l'optimisation, tant sur les performances thermoélectriques que mécaniques. L'influence de l'épaisseur des différents matériaux peut ainsi être étudiée. Par exemple, l'épaisseur de la couche de cuivre influence le comportement des pattes de Bi_2Te_3. Comme on le voit sur la Figure 4.1 (simulations via ABAQUS), où la température de la céramique supérieure est de -50°C et la céramique inférieure est à 20°C. Il se produit alors un rapprochement des pattes lorsque l'épaisseur de cuivre augmente.



a) b)

Figure 4.1 : Influence de l'épaisseur de cuivre : a) 400 μm b) 100 μm.

La couche de l'alliage d'étain est très fine puisqu'elle a une épaisseur de 30 à 70 micromètres alors que le cuivre a une épaisseur allant de 100 à 400 micromètres. En pratique, un choix d'épaisseur est à faire. Les méthodes de fabrication des modules influencent aussi ce choix d'épaisseur. De plus, il s'effectue aussi par rapport aux propriétés plastiques. On peut diminuer l'épaisseur de la couche de cuivre et augmenter celle de la couche d'étain car cette dernière est en contact avec les éléments thermoélectriques. Le relâchement de contrainte résultant de son comportement plastique est par ailleurs plus important que celui provenant du cuivre et donc améliorera la fiabilité du module. De plus, comme la résistivité électrique de ces matériaux est faible, les performances thermoélectriques ne seront pas trop affectées. L'autre épaisseur importante est celle de l'alumine puisque cette partie du module sert de fondation. Sa diminution d'épaisseur va entraîner une augmentation de performance car un gradient de température plus élevé sera appliqué aux bornes des éléments thermoélectriques. Du point de vue comportement thermomécanique, la déflexion occasionnée par la dilatation des autres composants et la rigidité du tellurure de bismuth va s'accroître et entraîner de plus grandes contraintes dans les pattes proches des coins du module.

On a mentionné la procédure d'optimisation qui permet de modéliser tous les designs possibles d'un thermocouple. Toutes les dimensions sont paramétrées :

- Hauteur des pattes
- Épaisseur du cuivre
- Épaisseur de l'alliage de brasage
- Épaisseur de l'alumine
- Section des pattes
- Espacement entre les pattes

Les autres dimensions sont fonctions de ces dernières. Ce procédé d'optimisation nous permet d'étudier les performances thermoélectriques des matériaux de types n et p fabriqués en laboratoire après leur évaluation par le test Harman. La position des pattes

dans un module définit des contraintes dites globales car la déflexion de l'alumine ajoute des contraintes supplémentaires. Dans le cas d'un thermocouple, seul la variation des contraintes dites locales est à étudier.

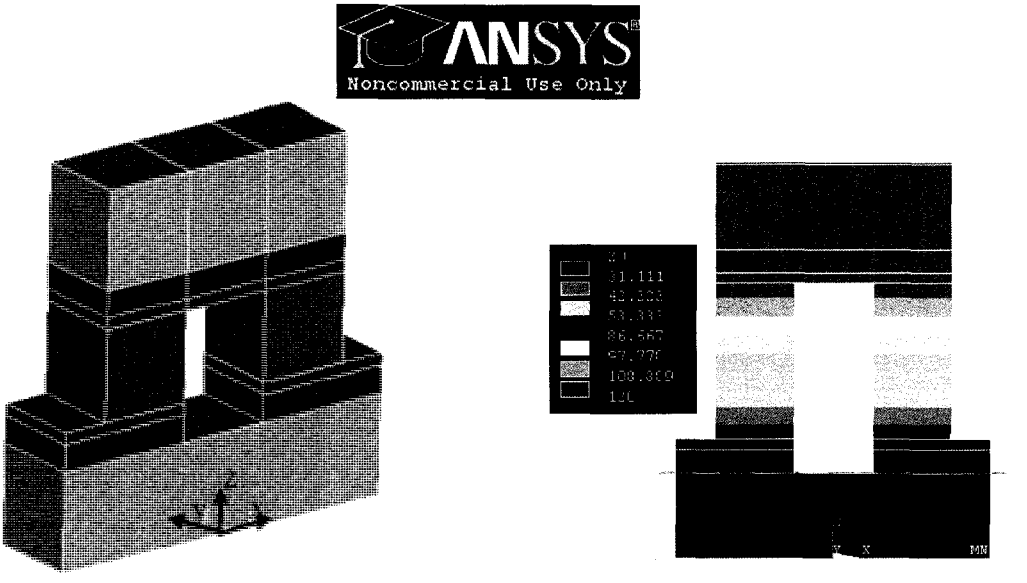


Figure 4.2 : Design d'un thermocouple et distribution de température.

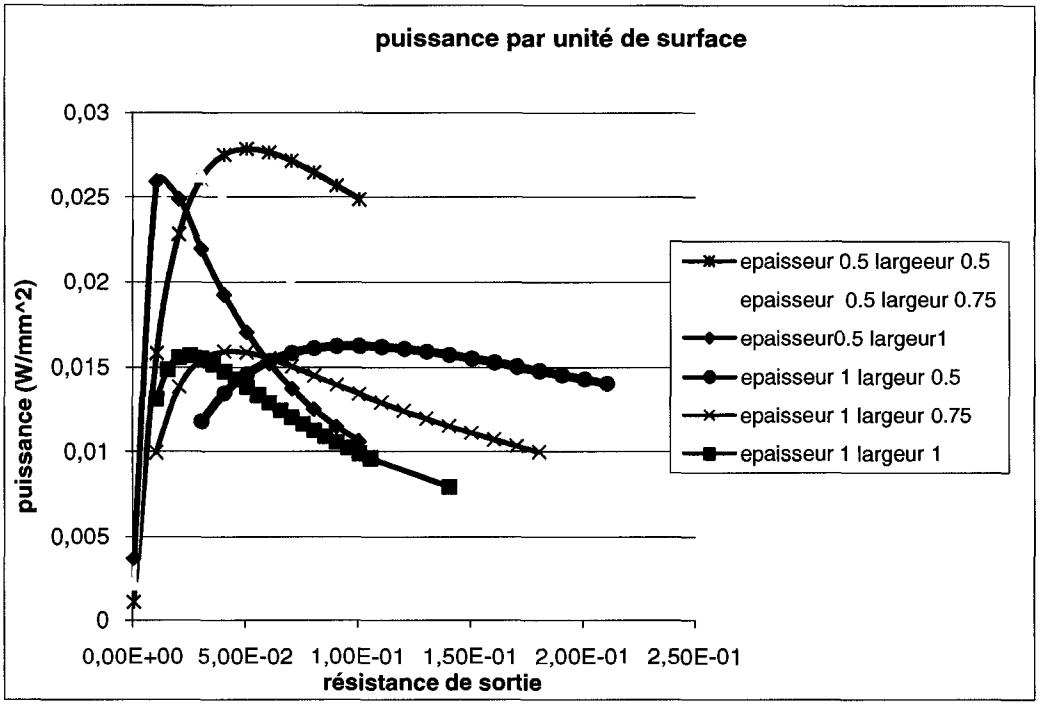
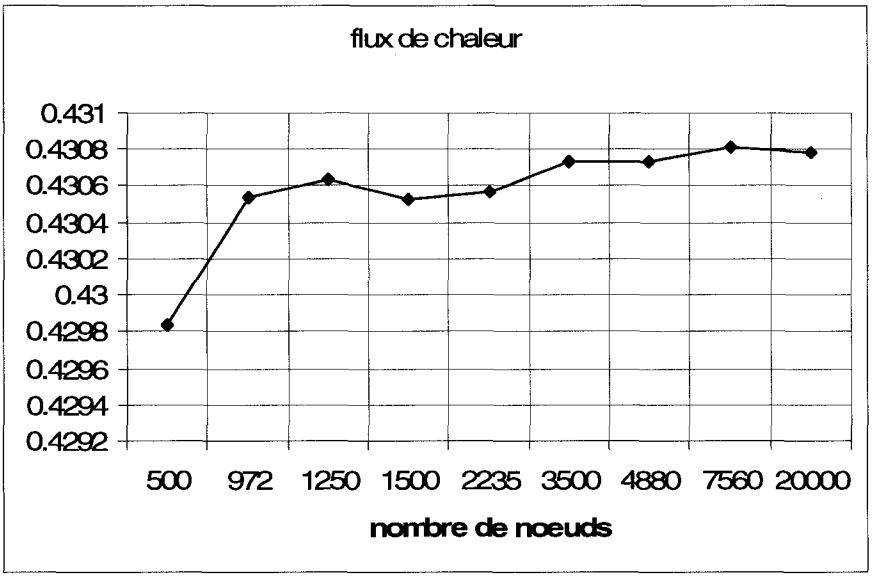


Figure 4.3 : Influence de la de section et de la hauteur des pattes (ΔT=130°C).

On remarque sur la Figure 4.3 l'influence de l'épaisseur des pattes ainsi que de leur section. La diminution d'épaisseur permet d'augmenter la puissance générée par unité de surface. La légère augmentation de puissance aperçue pour le cas des pattes de 0.5mm, avec la diminution de section des pattes, est en réalité due à la diminution de la longueur du cuivre. On utilise une étude de convergence a posteriori pour connaître l'influence du maillage sur les critères de convergence. Les trois valeurs utilisées sont le flux de chaleur, l'intensité du courant et les forces internes. Les propriétés thermoélectriques suivent des lois non linéaires en fonction de la température. L'utilisation d'un modèle réduit permet de mailler très finement. Le maillage par éléments quadratiques permet d'obtenir une meilleure précision sur les résultats. L'augmentation du nombre de nœuds agit très rapidement sur la convergence des résultats comme la montre la Figure 4.4 illustrant l'étude de convergence pour le flux de chaleur et le voltage aux bornes du thermocouple.

a)



b)

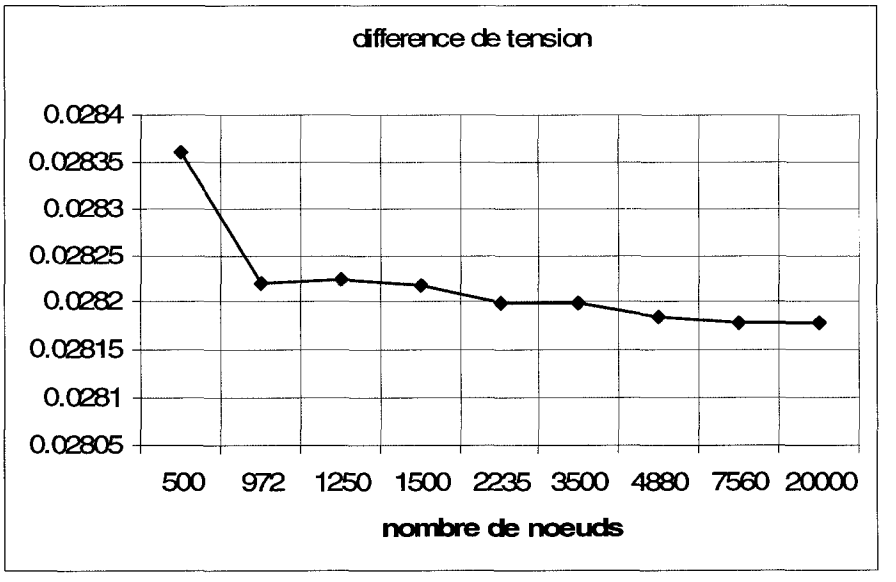
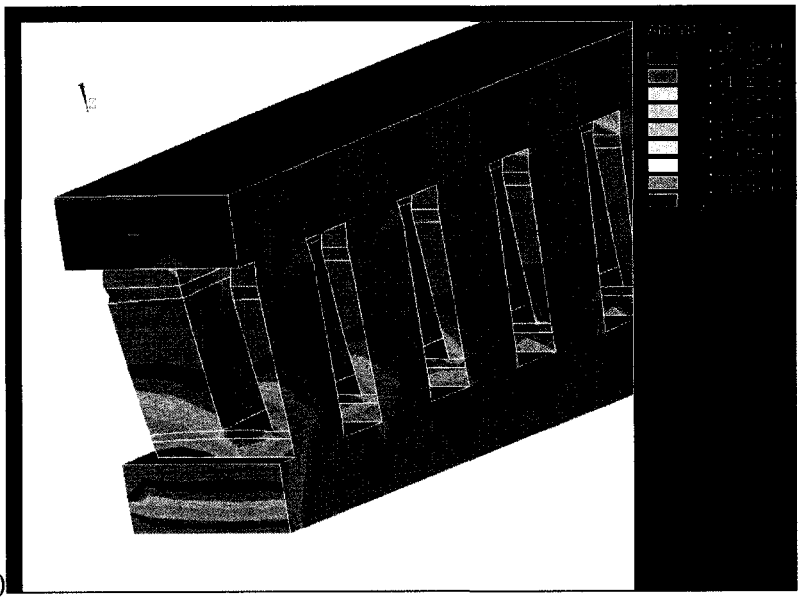


Figure 4.4 : Étude de convergence.

Chapitre 5 Discussion générale

Outre ces méthodes de travail sur l'épaisseur des matériaux, une analyse complémentaire du module présenté dans l'article est utile. On sait que les contraintes de Von Mises sont toujours supérieures dans les coins des pattes du côté chaud du module. On remarque grâce à la Figure 5.1 que les pattes subissent des contraintes de compression du côté froid.

a)



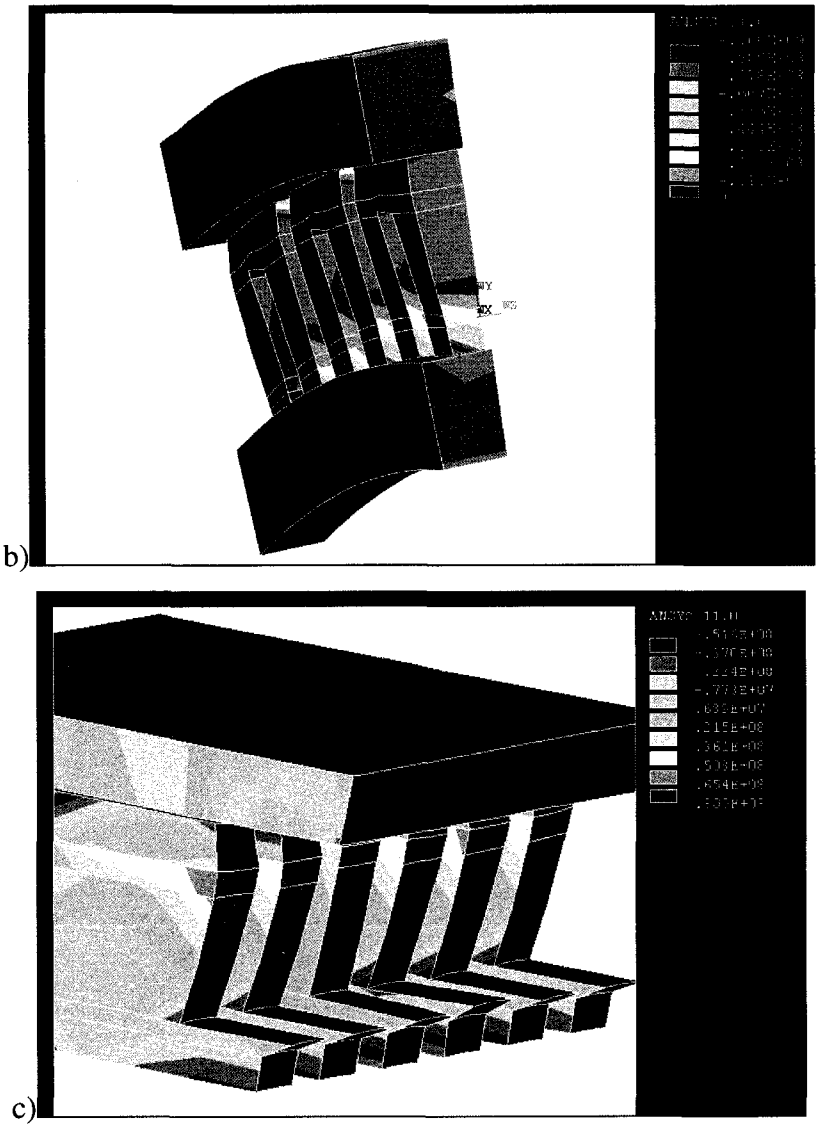


Figure 5.1 : Contraintes de compression σ_{zz} (échelle en Pascal), axe z parallèle aux pattes : (a) face inférieure froide brasée et pattes de 1mm, (b) faces libres et pattes de 1mm, (c) face chaude brasée et pattes de 0.5mm.

L'ordre de grandeur de ces contraintes varie selon la taille des pattes et les conditions frontières. La position des pattes (bords ou au milieu du module) dans le module est aussi un facteur influant sur son comportement. Lorsque le module fonctionne avec sa face froide brasée, les contraintes de compression sont les plus élevées. L'influence de l'épaisseur sur σ_{zz} est très variable suivant la position de la patte dans le module. Toutefois, ces contraintes ne seront pas la cause d'apparition de fissures. On remarque une diminution de la contrainte équivalente maximale de Von Mises pour les cas où le module a des plaques céramiques libres et où la céramique froide est brasée. Par contre, la contrainte moyenne sur une ligne augmente, comme le montre les graphiques de la Figure 5.3 pour le cas de l'appui simple.

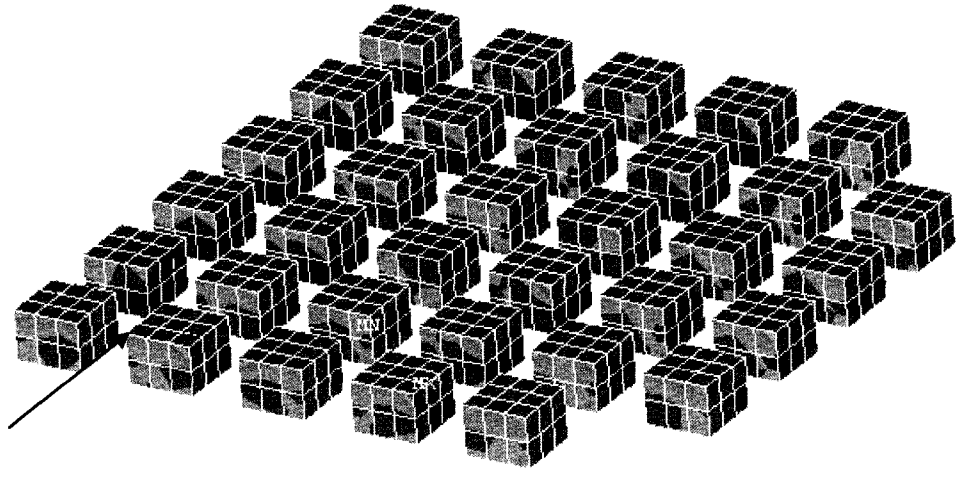
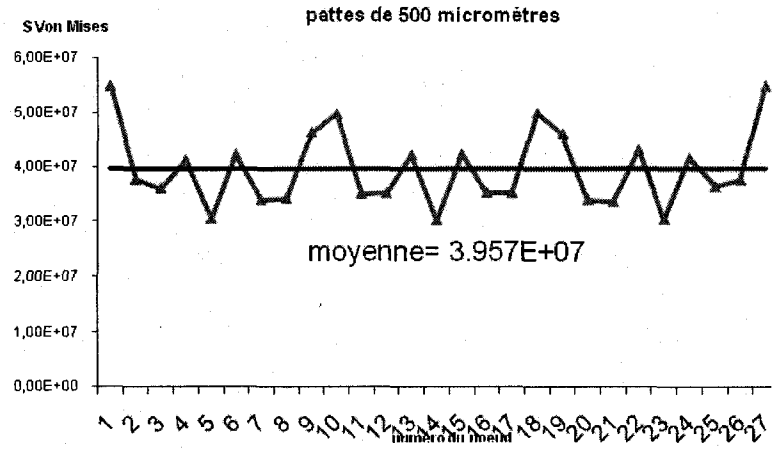
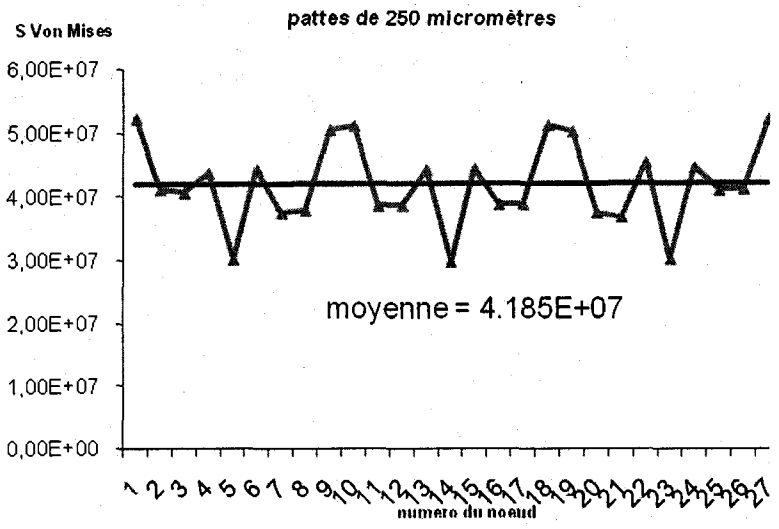


Figure 5.2 : Sens de numérotation des nœuds indiqués par la flèche.



a)



b)

Figure 5.3 : Variation de la contrainte de Von Mises : a) pattes de 0.5mm ; b) pattes de 0.25mm.

La moyenne passe de 39.6 MPa à 41.8 MPa. On observe une diminution des écarts de contraintes entre les pattes avec la diminution de la hauteur des pattes que ce soit pour l'étude de matériaux isotropes ou anisotropes.

Concernant les déformations, la déformation totale se décompose en différentes parties. Dans notre cas, les éléments thermoélectriques subissent une déformation thermique et une déformation élastique : $\varepsilon_{tot} = \varepsilon_{el} + \varepsilon_{the}$. On peut rajouter une composante plastique, ε_{plas}, pour le cuivre et l'étain.

L'anisotropie du coefficient de dilatation donne une distribution des déformations thermiques spécifiques comme le montre la Figure 5.4. On rappelle que les constantes élastiques du Bi_2Te_3 sont liées à un repère cylindrique.

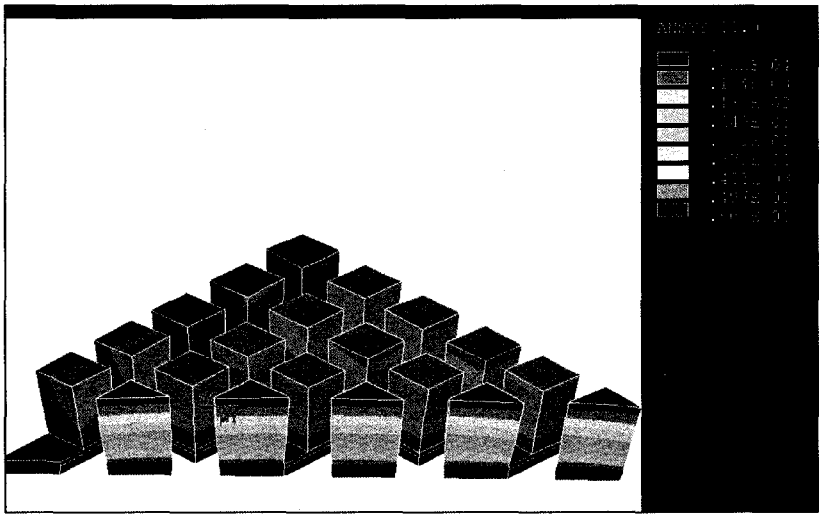


Figure 5.4 : Déformation thermique de cisaillement ε_{xy} (déformation dans la direction y sur un plan de normale x) dans le repère global.

Ces valeurs de déformations sont faibles. Le coefficient de dilatation thermique est plus élevé dans le sens radial que dans les directions axiales et tangentielles. Les pattes sur la grande diagonale sont de type p. L'expansion thermique de ce matériau est supérieure à celle du type n. C'est pour cela que les pattes se situant sur la plus grande diagonale du module subissent les plus grandes déformations thermiques, déformations reliées directement aux coefficients de dilatation thermique. On remarque aussi la symétrie par rapport à la diagonale d'où le plan coupé de laFigure 5.4. Les déformations de cisaillement varient évidemment avec la température. On n'observe pas ce phénomène pour le modèle isotrope. Par contre, l'influence du brasage sur les déformations de cisaillement au niveau de l'interface avec les éléments thermoélectriques est importante comme le montre les Figure 5.5, 5.6, 5.7.

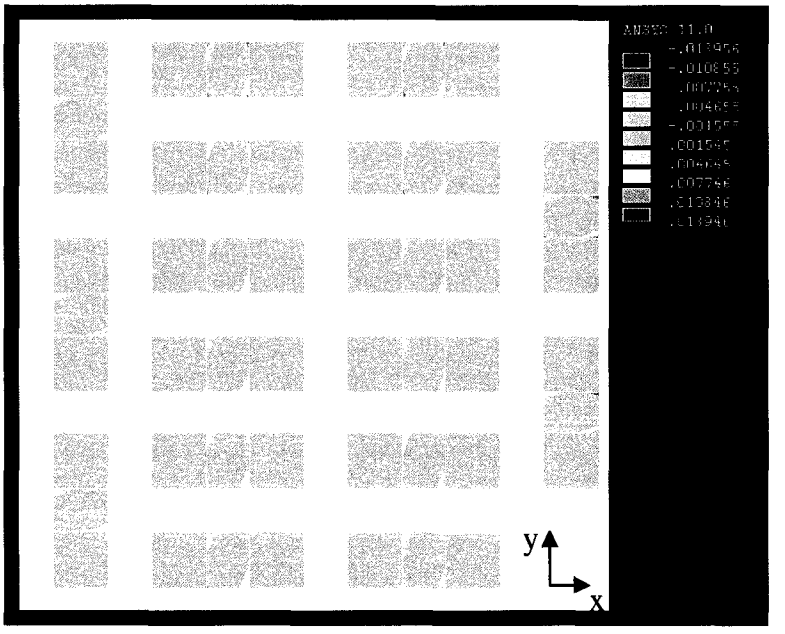


Figure 5.5 : Déformation ε_{xy} totale au niveau des connecteurs d'étain, pattes de 1mm, face chaude brasée.

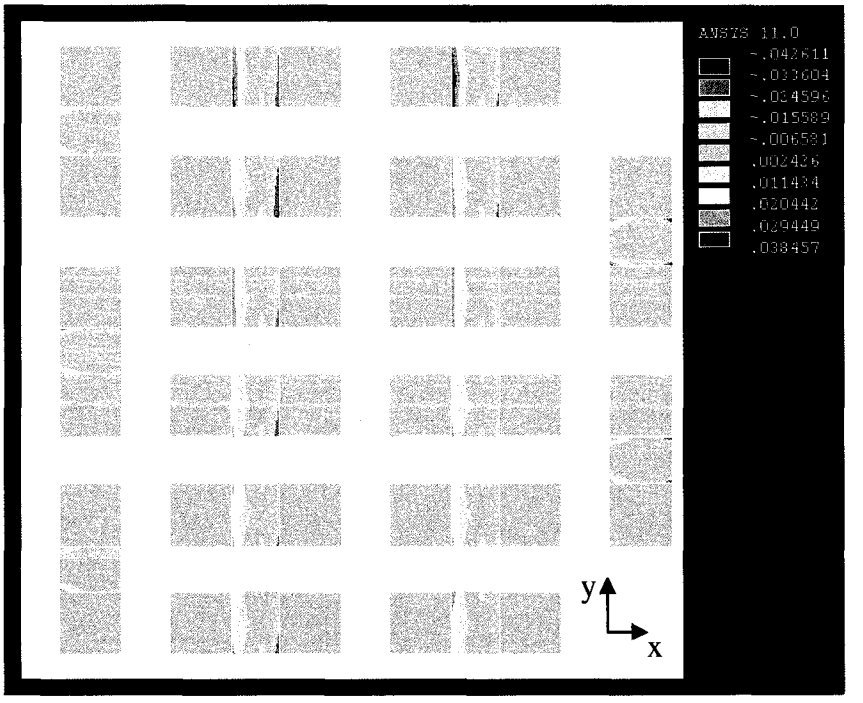


Figure 5.6 : Déformation ε_{xz} totale au niveau des connecteurs d'étain, pattes de 1mm, face chaude brasée.

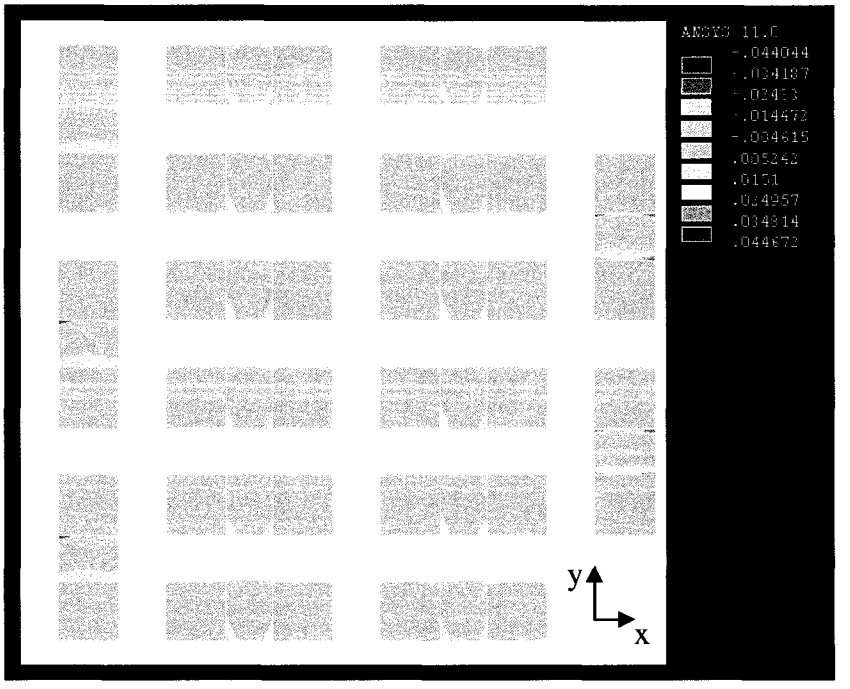


Figure 5.7 : Déformation ε_{yz} totale au niveau des connecteurs d'étain, pattes de 1mm, face chaude brasée.

Les figures précédentes montrent des déformations de cisaillement au coin des pattes de l'ordre de 4% pour ε_{xz} et ε_{yz}, ainsi que de 1.4% pour ε_{xy}. La différence de coefficient de dilatation en plus de la condition frontière fixant la céramique chaude, est la cause de ces valeurs élevées. À ces valeurs de déformation, l'étain et le cuivre entrent dans leur domaine plastique de façon à relâcher les contraintes. Par contre, si le module revient au repos (différence de température nulle), des contraintes résiduelles vont apparaître aux coins des pattes et vont fragiliser le module lors d'une nouvelle utilisation.

On peut vérifier l'ordre de grandeur des déformations thermiques dans la direction radiale sur la Figure 5.8.

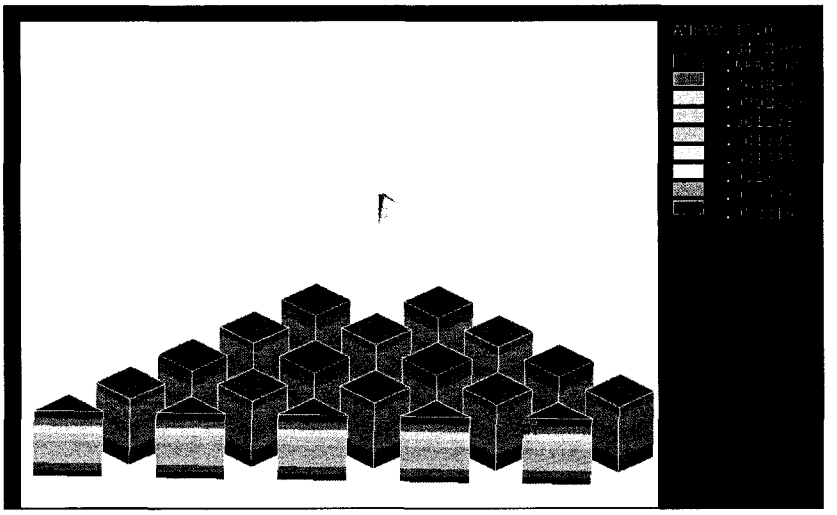
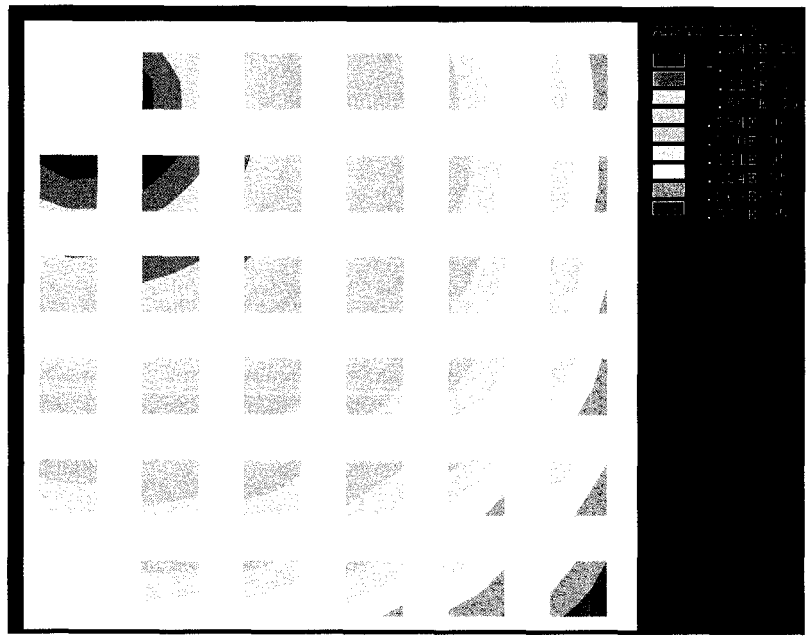


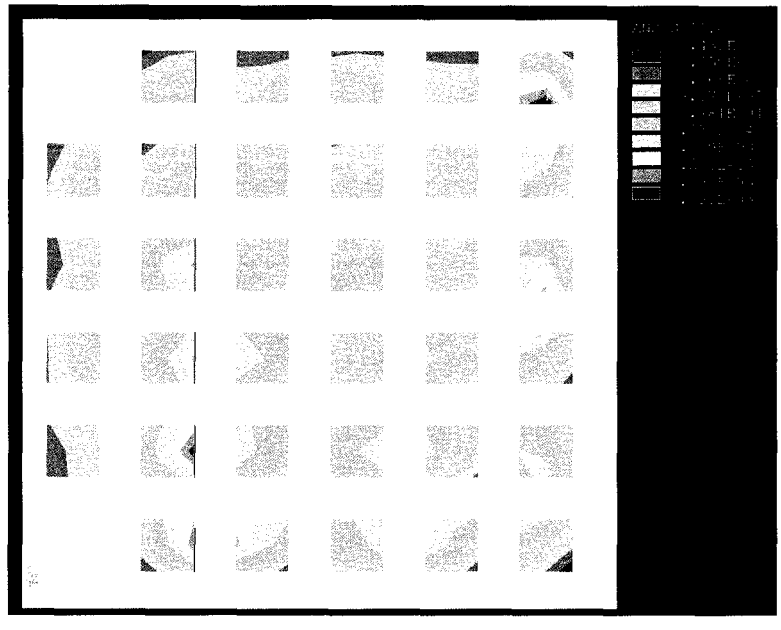
Figure 5.8 : Déformation thermique ε_{rr}.

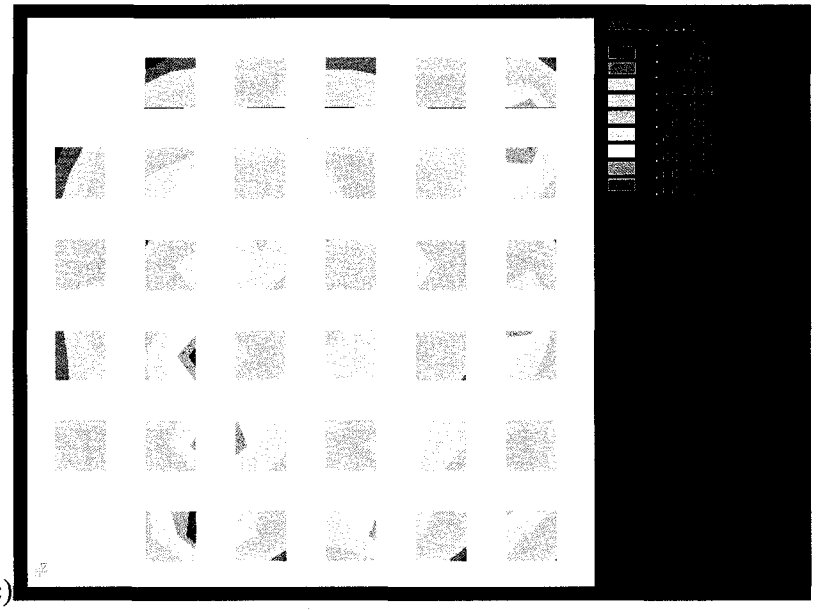
Les déformations thermiques pour les pattes de type p atteignent plus de 0.2%, correspondant donc bien au $\alpha \Delta T$, α valant 18 $\times 10^{-6} K^{-1}$ et la différence de température inférieure à 100°C. Le coefficient de dilatation de l'alliage de brasage vaut 27 $\times 10^{-6} K^{-1}$. Ceci explique l'augmentation des déformations thermiques au niveau du contact avec la couche d'alliage d'étain. En plus de ces déformations, on peut ajouter les déformations mécaniques, causées par la déformation globale du module, qui sont plus faibles que les déformations thermiques dans le sens radial. La carte des déformations est donnée à la Figure 5.9.

a)



b)





c)

Figure 5.9 : a) déplacements u_r ; b) ε_{rr} élastique du côté chaud pour une configuration module libre possédant de pattes de 1mm ; c) ε_{rr} totale pour la même configuration.

Les deux cartes des déformations radiales sont de même forme complexe. L'échelle de la Figure 5.9 c) donne un maximum est de 0.24% pour les déformations totales. Les déformations mécaniques, où élastiques, atteignent un minimum de -0.045% et un maximum de 0.039%. Celles-ci sont dues à la déformation globale du module qui génère des forces au niveau locale. La diminution de la hauteur des pattes induit une augmentation de la déformation radiale mécanique : les pattes de 0.5mm sont déformées d'un maximum de 0.045% et d'un minimum de -0.12% tandis que les pattes de 0.25mm sont déformées de 0.055% et de -0.13%. Une nette augmentation est observée par rapport aux pattes de 1mm.

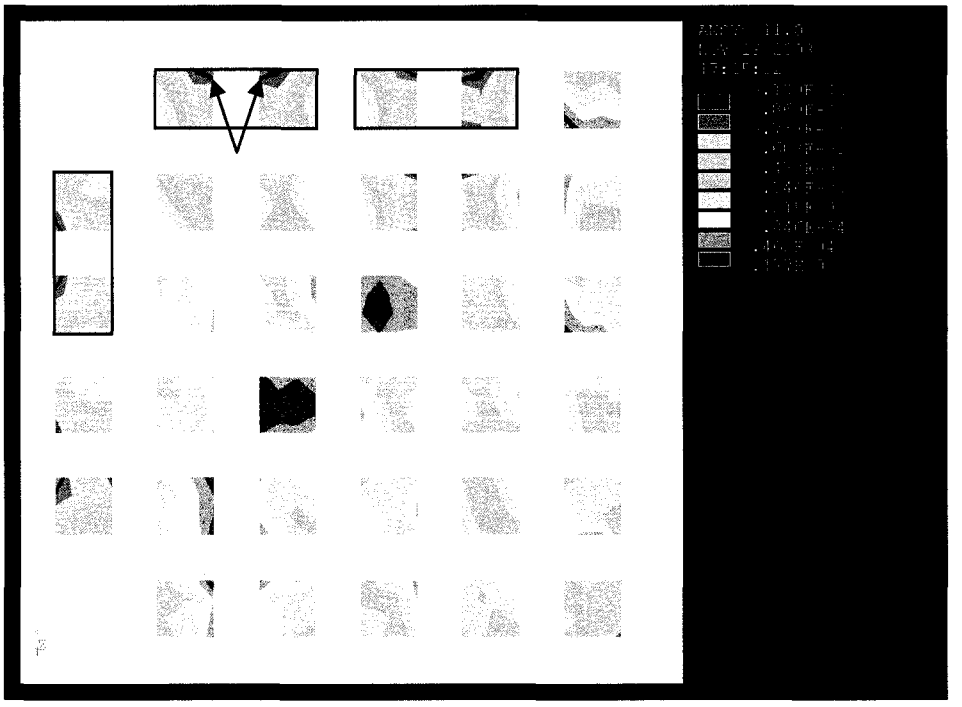


Figure 5.10 : ε_{rr} élastique pour un module libre possédant des pattes de 0.25mm.

Les déformations négatives plus grandes en valeurs absolues se situent à l'intérieur des jonctions avec le cuivre et l'alliage d'étain. Prés du centre du repère (défini sur la tige extrudée), se situant en haut à gauche sur la Figure 5.10, une patte est omise afin d'installer les connexions électriques. En s'éloignant du centre du repère, les déformations sont moins importantes.

Concernant la déformation totale axiale ε_{zz}, elle passe de 0.27% pour les pattes de 1mm à 0.3% pour les pattes de 0.25mm. L'influence des déformations mécaniques varie pour les cas des faces chaudes ou froides brasées comme le montre le Tableau 5.1 qui donne le récapitulatif des déformations suivant z pour les simulations des modules à propriétés mécaniques orthotropes.

Tableau 5.1 : Déformations mécaniques et totales.

ε_{zz} total max (%)	1mm	0.5mm	0.25mm
faces libres	0.2779	0.3229	0.3031
face froide brasée	0.2961	0.3285	0.3193
face chaude brasée	0.2533	0.3092	0.3196

ε_{zz} élastique max (%)	1mm	0.5mm	0.25mm
faces libres	0.1114	0.1582	0.14
face froide brasée	0.1316	0.1633	0.1601
face chaude brasée	0.0868	0.1444	0.1579

Les déformations thermiques sont constantes, quelque soit la configuration du module en fonctionnement et valent 0.165% en moyenne. On voit que dans le cas de la face froide brasée, les déformations mécaniques jouent un rôle plus important dans l'augmentation des contraintes. Le cas le plus souple est évidemment celui des faces libres.

Une marge d'erreur est à prendre en considération sur les valeurs des contraintes calculées. Plusieurs données ont une influence sur le déroulement des simulations : la taille du maillage est le premier paramètre à prendre en compte sur l'incertitude des résultats. Les éléments utilisés sont quadratiques et le modèle utilise 32 000 nœuds. Une erreur proche de 5% entre le modèle à propriétés isotropes et le modèle plus réel est calculée. Cela signifie qu'une faible variation des propriétés mécaniques du matériau thermoélectrique influence peu les résultats de simulation. La plus grande influence est celle de l'alliage de brasage et du cuivre. Un modèle à propriétés constantes pour chaque patte sera plus utile pour les simulations car on pourra modéliser un quart de module. Le maillage sera donc plus fin. Une autre source influençant les simulations est le pas de chargement. Dans cette étude, 3 pas de chargement (3 températures) ont été imposés. Le phénomène de plasticité étant non linéaire, de nombreux pas sont à appliquer aux

simulations (par exemple tous les 10°C). Le temps de calcul en sera d'autant plus long mais la précision des résultats améliorée. Les critères de convergence utilisés pour les forces nodales et flux de chaleur élémentaires dans le modèle est la dernière source d'incertitude concernant les simulations. Ceux-ci sont prédéfinis par l'utilisateur mais sont calculés préalablement par le logiciel ANSYS. Les critères ont été imposés à 1% mais cela ne signifie pas que l'erreur par rapport à la réalité est inférieure à 1%. Seule une mesure expérimentale de déplacements ou déformations nous donnera un ordre de grandeur de l'incertitude.

CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

La modélisation de module thermoélectrique par éléments finis est très utile car elle permet d'étudier à la fois la fiabilité mécanique et ses performances thermoélectriques dans le cas d'un haut gradient de température.

Un design particulier a été mis en place afin de pouvoir modifier la hauteur des pattes, paramètre principal influençant le comportement du module. Le module est de petite taille puisqu'il a une dimension carrée de 6 mm en largeur. Cette étude a permis de mettre en lumière la résistance du matériau semi-conducteur, tellurure de bismuth, fabriqué par extrusion à chaud.

La complexité du modèle réside dans les nombreuses propriétés électriques, thermiques et mécaniques utilisées dans une plage de température allant de -50°C à 150°C. Les méthodes de mesure de ces données doivent être fiables au risque de fausser les résultats. Les propriétés des autres matériaux utilisés dans la fabrication du module sont généralement connues. La propriété importante dans la diminution des contraintes générées dans les éléments thermoélectriques, qui sont les éléments les plus fragiles dans le module, est la plasticité de l'alliage d'étain et du cuivre effectuant les liaisons électriques entre les pattes.

La complexité de la texture cristalline du Bi_2Te_3 ajoute un comportement anisotropique au niveau de la dilatation thermique et de la rigidité du matériau, générant ainsi des contraintes thermiques supplémentaires lorsque la différence de température entre les deux côtés du module devient élevée (au dessus de 100°C). Bien que la majorité des propriétés soient dépendantes de la température, cette variation n'a pas été prise en compte du fait que cette influence soit plus faible. De ce biais, les résultats de simulations peuvent être considérés comme prédictions aggravantes. En effet, l'alliage

d'étain et le cuivre deviennent plus ductiles avec l'augmentation de température tout comme pour le tellurure de bismuth.

Les prédictions des simulations indiquent des contraintes équivalentes de Von Mises proches de la valeur de rupture du matériau semi-conducteur valant respectivement 60 MPa et 40 MPa pour le type n et type p. Elles valent au maximum 55 MPa au coin d'une patte de 250 µm proche du bord du module généralement et lorsque la céramique chaude est fixe. Les contraintes du côté froid du module atteignent un maximum de 50 MPa pour des pattes de 500 µm avec la céramique froide brasée. Il est donc important de valider ces résultats expérimentalement en utilisant le module avec ses faces libres car le maximum pour un module dans une telle configuration vaut aussi 55 MPa du côté chaud mais pour des pattes de 500 µm. Les simulations donnent des résultats pour trois différences de température, la plus grande étant de 100°C. La visualisation du profil de la céramique à température ambiante et chaude ne permet pas de valider l'amplitude de la forme convexe, caractéristique de l'imposition d'une température chaude. En effet seuls des différences de température de 40°C et 60°C ont pu être soumises au module.

L'analyse des déformations a permis de quantifier l'influence de chaque composante, thermique, élastique et plastique, sur les contraintes agissant dans un module soumis à un gradient de température de 100°C. Il reste à confirmer ces valeurs prédites grâce à une mesure expérimentale des déplacements de la plaque de céramique.

Un travail d'optimisation sur les dimensions du module est envisageable. La section des pattes, la hauteur des pattes, mais aussi les épaisseurs des autres éléments, peuvent sensiblement améliorer le comportement mécanique du module, tout en prenant en compte les performances thermoélectriques. L'optimisation se fera aussi sur le choix des matériaux composant le module. L'influence du temps sur la déformation du module serait aussi à prendre en compte puisque l'alliage d'étain ou le cuivre ont un

comportement de fluage, défini comme une évolution de la déformation avec le temps sous contrainte constante. La fragilité du module peut ainsi être évaluée du point de vue de la fatigue cyclique.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. D.M.Rowe, ed. *CRC Handbook of Thermoelectrics*. 1995.
2. Taylor, P.J., et al., *Model for the non-steady-state temperature behaviour of thermoelectric cooling semiconductor devices.* Semiconductor Science and Technology, 1997. **12**(4): p. 443-447.
3. Min, G. and D.M. Rowe, *Improved model for calculating the coefficient of performance of a Peltier module.* Energy Conversion and Management, 2000. **41**(2): p. 163-171.
4. Chavez, J.A., et al. *SPICE model of thermoelectric elements including thermal effects*. 2000. Baltimore, MD, USA: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., Piscataway, NJ, USA.
5. Lineykin, S. and S. Ben-Yaakov, *Modeling and analysis of thermoelectric modules.* IEEE Transactions on Industry Applications, 2007. **43**(2): p. 505-512.
6. Bunge, H.J., et al., *Elastic properties of polycrystals - influence of texture and stereology.* Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2000. **48**(1): p. 29-66.
7. Pelletier, R., et al. *Evolution of mechanical stresses in extruded (Bi1-xSb x)2(Te1-ySey)3 thermoelectric alloys subjected to thermal shocks present in module fabrication processes*. 2007. Jeju, South Korea: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., Piscataway, NJ 08855-1331, United States.
8. Simard, J.M., D. Vasilevskiy, and S. Turenne. *Influence of composition and texture on the thermoelectric and mechanical properties of extruded* $(Bi_{1-x}Sb_x)2(Te_{1-y}Se_y)3$ *alloys*. 2003. La Grande Motte, France: IEEE.
9. Mitrani, D., et al., *Methodology for extracting thermoelectric module parameters.* IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement, 2005. **54**(4): p. 1548-1552.

10. Horio, Y., et al. *Application of thermoelectric modules fabricated with $(Bi,Sb)_2$ $(Te,Se)_3$ using rapid solidification technique for the projector system.* 2006. Vienna, Austria: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., Piscataway, NJ 08855-1331, United States.

11. Yang, J. *Potential applications of thermoelectric waste heat recovery in the automotive industry.* 2005. Clemson, SC, United States: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., Piscataway, NJ 08855-1331, United States.

12. Bottner, H. *Thermoelectric micro devices: current state, recent developments and future aspects for technological progress and applications.* 2002. Long Beach, CA, USA: IEEE.

13. Kajikawa, T., et al. *Progress of development for advanced thermoelectric conversion systems.* 2005. Clemson, SC, United States: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., Piscataway, NJ 08855-1331, United States.

14. Liu, W., et al. *Thermo-mechanical analysis of a wafer level packaging by induction heating.* 2008. Pudong, Shanghai, China: Institute of Electrical and Electronics Engineers Computer Society, Piscataway, NJ 08855-1331, United States.

15. Soto, M.A. and R. Venkatasubramanian. *ANSYS-based detailed thermo-mechanical modeling of complex thermoelectric power designs.* 2005. Clemson, SC, United States: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., Piscataway, NJ 08855-1331, United States.

16. Kaibe, H.T.R., L., Fujimoto, S., Kurosawa, T., Kanda, T., Mukoujima, M., Aoyama, I., Ishimabushi, H., Ishida, K., Sano. *Developement of thermoelectric generating cascade modules using silicide and Bi-Te.* in *Proc 23rd International Conference on Thermoelectrics (ICT), Adelaid, Australia, June. 2994, in press.* 2004.

17. Kaibe, H., et al. *Development of thermoelectric generating stacked modules aiming for 15% of conversion efficiency.* 2005. Clemson, SC, United States:

Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., Piscataway, NJ 08855-1331, United States.

18. Yaofeng, S., J.H.L. Pang, and F. Wei, *Nanoscale deformation measurement of microscale interconnection assemblies by a digital image correlation technique.* Nanotechnology, 2007. **18**(39): p. 395504 (8 pp.).
19. Sun, Y. and J.H.L. Pang, *AFM image reconstruction for deformation measurements by digital image correlation.* Nanotechnology, 2006. **17**(4): p. 933-939.
20. Popelar, S.F. *Parametric study of flip chip reliability based on solder fatigue modelling*. 1997. Austin, TX, USA: IEEE, Piscataway, NJ, USA.
21. Popelar, S.F. *Parametric study of flip chip reliability based on solder fatigue modelling: Part II - flip chip on organic*. 1998. San Diego, CA, USA: SPIE, Bellingham, WA, USA.
22. Syed, A. *Accumulated creep strain and energy density based thermal fatigue life prediction models for SnAgCu solder joints*. 2004. Las Vegas, NV, United States: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., Piscataway, NJ 08855-1331, United States.
23. Miura, S., et al., *Texture and thermoelectric properties of hot-extruded Bi_2Te_3 compound.* Materials Science and Engineering A: Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing, 2000. **277**(1-2): p. 244-249.
24. Fan, X.A., et al., *Preferential orientation and thermoelectric properties of p-type $Bi_{0.4}Sb_{1.6}Te_3$ system alloys by mechanical alloying and equal channel angular extrusion.* Journal of Alloys and Compounds, 2008. **461**(1-2): p. 9-13.
25. Ren, F., et al., *Young's modulus as a function of composition for an n-type lead-antimony-silver-telluride (LAST) thermoelectric material.* Philosophical Magazine, 2007. **87**(31): p. 4907-4934.
26. L.I Anatychuk, V.N.B., O.J.Luste, V.V.Malyshko. *Studying Stresses in Thermoelectric Cooling Modules for Increasing their Cyclic Stability*. in *ICT*. 2003.

27. Vasilevskiy, D., et al. *Mechanical properties of the interface between nickel contact and extruded* $(Bi_{1-x}Sb_x)_2(Te_{1-y}Se_y)_3$ *thermoelectric materials.* 2006. Vienna, Austria: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., Piscataway, NJ 08855-1331, United States.

28. Auerkari, P., *Mechanical and physical properties of engineering alumina ceramics.* VTT Tiedotteita - Valtion Teknillinen Tutkimuskeskus, 1996(1792): p. -26.

29. Mahidhara, R.K., et al., *Room temperature tensile properties of Sn-5%Sb solder.* Journal of Materials Science Letters, 1994. **13**(19): p. 1387-1389.

30. Dr. Thomas Siewert, D.S.L., Dr. David R. Smith, Mr. Juan Carlos Madeni, *Properties of Lead-Free Solders.* 2002.