



Ricerca di Sistema elettrico

Studio preliminare su dispositivi termoelettrici:
progettazione del layout di fabbricazione tramite
tecniche PVD

Gaetano Contento, Antonella Rizzo e Francesca Di Benedetto

STUDIO PRELIMINARE DEI DISPOSITIVI TERMOELETRICI: PROGETTAZIONE DEL LAYOUT DI FABBRICAZIONE
tramite tecniche PVD

Gaetano Contento, Antonella Rizzo e Francesca Di Benedetto

Dicembre 2019

Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico - ENEA

Piano Triennale di Realizzazione 2019-2021 - I annualità

Obiettivo: *Tecnologie*

Progetto: 1.3 Materiali di frontiera per usi energetici

Work package: Sviluppo delle tecniche di formatura e interconnessione di microgeneratori termoelettrici e piroelettrici

Linea di attività: 2.1 - Dispositivi termoelettrici – Progettazione dei layout di fabbricazione

Responsabile del Progetto: Daniele Mirabile Gattia, ENEA

Responsabile del Work package: Amelia Montone, ENEA

Indice

SOMMARIO.....	4
1 INTRODUZIONE.....	5
2 LAYOUT DISPOSITIVO.....	9
3 CONFIGURAZIONI TERMICHE.....	12
4 CONCLUSIONI.....	17
5 RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI.....	18

Sommario

La continua crescita del mercato dell'*Internet of Things* (IoT) e la relativa applicazione alle più svariate tipologie di oggetti (siano essi elettrodomestici, case, auto o processi industriali) richiede lo sviluppo di tecnologie capaci di fornire potenza alla consistente quantità di sensori. In questo contesto l'uso di dispositivi termoelettrici capaci di trasformare l'energia presente nell'ambiente direttamente in corrente elettrica rappresenta una soluzione alternativa alle batterie che comportano problemi di manutenzione, sostenibilità ambientale e gestione dei rifiuti.

Il presente rapporto descrive le attività svolte durante la prima annualità del progetto 1.3 –Materiali di frontiera per usi energetici nell'ambito della linea di attività LA2.1 (Dispositivi termoelettrici – Progettazione dei layout di fabbricazione) relativa allo sviluppo di microgeneratori a film sottile.

Lo studio nasce dall'esigenza di aumentare la comprensione delle problematiche per lo sviluppo di dispositivi e favorire un loro uso pervasivo. Partendo da una presentazione dello scenario internazionale di riferimento, il rapporto si sofferma sui principali modelli presenti in letteratura ed individua alcune varianti di generatori termoelettrici del tipo verticale candidabili per la realizzazione *proof-of-concept* del terzo anno di attività. Particolare attenzione è stata posta, durante l'annualità di riferimento, sia all'individuazione di una coppia di materiali adatti alla sperimentazione che allo studio delle reti termiche e delle relative routine di calcolo propedeutiche alla progettazione del sistema finale in termini di *layout* geometrico per applicazioni alle basse temperature.

1 Introduzione

L'obiettivo finale del WP2 è la realizzazione di un TEG (*Thermo-Electric Generator*) del tipo *proof-of-concept* a base di materiali attivi depositati sotto forma di film sottile tramite l'applicazione di tecniche di deposizione fisica da vapore (PVD). La scelta di implementare queste tecniche di fabbricazione allo sviluppo di dispositivi TEG è principalmente dettata dalla indiscussa capacità di controllo e riproducibilità delle caratteristiche intrinseche dei materiali depositati, e delle potenzialità connesse alla scalabilità dei processi su larga area e basso costo (deposizioni *roll-to-roll*, etc.). Tali caratteristiche le rendono oggi tra gli approcci tecnologici industrialmente più diffusi nei settori della componentistica elettronica, dei dispositivi optoelettronici, delle celle solari e, pertanto, potenzialmente coinvolgibili nell'ambito dei dispositivi termoelettrici.

Durante il primo anno di attività, l'analisi critica dello stato dell'arte sulle diverse tipologie di dispositivi e strutture potenzialmente interessanti per le applicazioni all'*energy harvesting* ha permesso di individuare un ristretto numero di varianti di TEG compatibili con le applicazioni a bassa temperatura e bassi gradienti di temperatura e con le tecniche di deposizione attualmente disponibili presso i laboratori del centro di Brindisi.

Inoltre lo studio condotto e diverse considerazioni preliminari hanno permesso di individuare nella coppia di metalli composta da argento e nichel i materiali prova con cui realizzare un dispositivo μ -TEG *proof-of-concept* come previsto dagli obiettivi del progetto nel terzo anno di attività. Tale coppia è stata individuata già nella prima annualità per consentire che le attività di sviluppo del dispositivo possano scorrere parallelamente allo sviluppo di materiali termoelettrici efficienti, a basso costo e basso impatto ambientale previsto nell'ambito del WP1 di questo progetto. Ciò in ultima analisi consente di condurre già dal secondo anno di attività le simulazioni ed i test propedeutici atti alla comprensione delle problematiche, sia generali che specifiche, dello sviluppo di un dispositivo generatore termoelettrico per applicazioni allo *energy harvesting*, e cioè: definizione delle geometrie e delle configurazioni, modalità di realizzazione pratica delle connessioni elettriche e meccaniche, tenuta meccanica delle strutture, accoppiamento alla sorgente termica, prestazioni e caratterizzazioni termoelettriche.

Si deve inoltre aggiungere, che la coppia di materiali Ag e Ni è stata in anni recenti studiata ed usata in letteratura per realizzare TEG di densità di potenza in uscita significative anche con basse differenze di temperatura applicate, per applicazioni in un intorno della temperatura ambiente. [1-5] Essi sono stati usati anche per studiare architetture innovative, per quanto concerne sia la tecnica di realizzazione [1,2] che l'accoppiamento con la sorgente di calore, [3] e sono pertanto potenzialmente interessanti per differenti motivi. In particolare, entrambi i materiali possono essere depositati su substrati di vario tipo, rigidi e flessibili, e risultano compatibili con una produzione su scala pre-industriale sia con tecniche PVD che con metodi di stampa. [3-5] Questi ultimi metodi, in particolare, sono stati anche applicati a partire da semplici paste commerciali. [4] Inoltre, tali materiali permettono di aggirare facilmente alcune difficoltà intrinseche alla realizzazione dei TEG poiché non necessitano di drogaggio e possono essere accoppiati direttamente, aggirando le problematiche inerenti la selezione del metallo di connessione, tipicamente riscontrate nel caso di materiali semiconduttori oggetto delle attività del WP2.

Nel corso dell'attività sperimentale oggetto della seconda annualità, il primo approccio alle architetture da testare verrà effettuato con film sottili, depositati per *sputtering*. La natura mono-elementare del target utilizzato garantirà la mancanza di difficoltà sul controllo composizionale e stechiometrico del film depositato e soprattutto assicurerà una resa di deposizione costante. Presso i laboratori di Brindisi è negli anni passati maturata una discreta esperienza nella deposizione per *sputtering* del Ni e dello Ag, seppur per applicazioni in ambito differente. Tutti questi aspetti permettono in questa fase di sviluppo del TEG di concentrare l'attenzione soprattutto sui dettagli costruttivi del dispositivo, sulle problematiche di tenuta meccanica e sui vari passaggi di realizzazione, in vista di future concrete applicazioni.

Riguardo la struttura del TEG le questioni principali possono essere considerate, come già parzialmente anticipato, le seguenti: definizione della architettura stessa del dispositivo ed in particolare dell'adattamento alla sorgente di energia termica in ingresso; scelta del substrato adatto; scelta dei materiali di interfaccia, incollaggio e tenuta meccanica; definizione delle dimensioni geometriche relative, ossia: lunghezza dei *leg*, area della sezione dei *leg* (spessore e larghezza degli stessi), rapporto fra l'area totale della sezione attiva dei *leg* stessi e quella di contatto termico con la sorgente (*Fill Factor*).

In termini generali, tutti i parametri geometrici ottimali del TEG possono essere definiti a valle di una opportuna modellazione-simulazione che consenta di progettare il dispositivo da testare.

In generale i modelli del comportamento termoelettrico di dispositivo TEG a film sottile possono anche essere di tipo strettamente numerico e 3D. In tali casi, in effetti, si procede ad una simulazione piuttosto precisa più adatta alla validazione che alla progettazione preliminare di un dispositivo. Ottimizzare il funzionamento di un TEG vuol dire, infatti, poter variare, per una data coppia di materiali, quanto meno

- i parametri geometrici dei materiali attivi e dei substrati,
- i parametri termici dei substrati,
- le potenze termiche in gioco, o più spesso le temperature di funzionamento (estremi freddo e caldo),
- le caratteristiche dei sistemi di dissipazione termica,

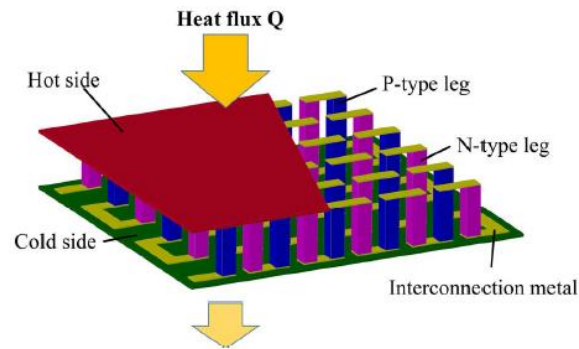
alla ricerca della combinazione ottimale che massimizzi la potenza in uscita. Una operazione di questo tipo non può essere realizzata usando sistemi a modellazione totalmente numerica, ossia software di calcolo che risolvano, eventualmente in 3D, le equazioni differenziali del trasporto di carica e calore per un assegnato sistema, poiché il sistema deve essere fissato a priori per effettuare il calcolo, nella sua totalità, ed una ottimizzazione parametrica non è possibile. Piuttosto, il problema può essere affrontato ripiegando su un approccio 1D del tipo analitico-numerico, che si rivela spesso sufficientemente preciso [6,7] per il fine perseguito. In tal modo, le densità di potenza in uscita, l'efficienza, o altri parametri più adatti, possono essere calcolati come funzioni dei parametri geometrici del layout o termo-fisici del substrato, alla ricerca della migliore combinazione possibile di tali parametri nei vari casi in modo da ottimizzare il sistema.

Per meglio chiarire quali sono state le problematiche preliminarmente affrontate durante il corso della annualità, facciamo riferimento ad un recente lavoro di *review* di Yan *et al.*, [8] che ha introdotto una comoda classificazione dei μ -TEG presenti, in letteratura e sul mercato, basandola rispettivamente sul materiale, sul processo di fabbricazione e sulla struttura. In questa sede rimandiamo alla letteratura per quanto riguarda le prime due classificazioni, e poniamo maggiormente l'attenzione sulla classificazione in termini di struttura, poiché è su questo aspetto che si concentrano maggiormente gli sforzi del WP2 del presente progetto.

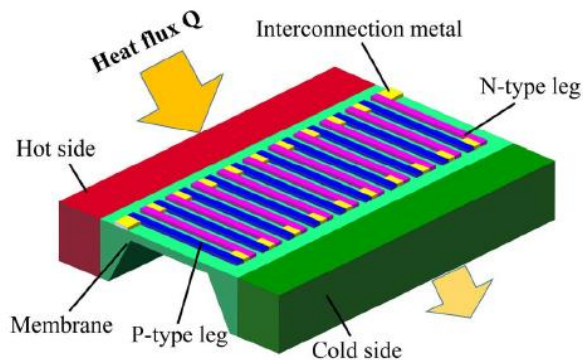
Gli autori individuano tre diverse architetture di μ -TEG: a flussi verticali, laterali ed ibridi (Figura 1 a-c). Nel primo tipo di struttura i flussi di calore e corrente sono verticali (Figura 1c), ove convenzionalmente si prenda come riferimento il piano orizzontale: in alto per la applicazione della sorgente termica ed in basso il piano di rimozione del calore via *heatsink* (o viceversa). In queste strutture il piano di accoppiamento alla sorgente di calore è ortogonale ai piani di flusso di carica e calore nei materiali attivi (strutture trasverse). Esse sono tipiche dei materiali bulk e dei μ -TEG tradizionali.

Nei sistemi laterali, il flusso di calore e corrente avviene sul piano orizzontale (Figura 1b), e parallelamente al substrato, ma l'accoppiamento alla sorgente di calore è laterale: in genere, cioè, il calore raccolto deve essere convogliato dal piano di iniezione laterale sull'unico piano di deposizione della struttura attiva costituito dalla usuale catena di coppie *n* e *p* in serie (configurazione π).

a)



b)



c)

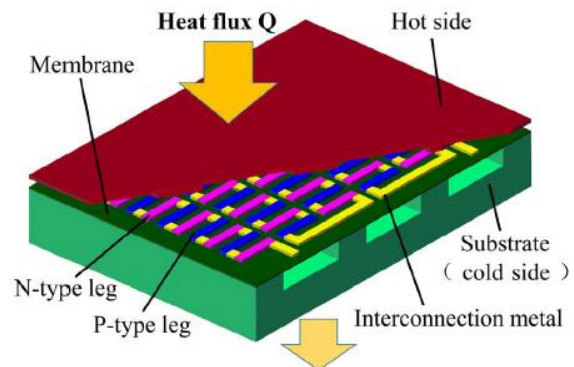


Figura. 1. Tipologie di strutture μ -TEG tratte da [8]. a) μ -TEG a struttura verticale: i materiali usati sono del tipo bulk. b) μ -TEG a struttura laterale capace di sfruttare al meglio le tecnologie IC e MEMS ma non ideale dal punto di vista della produzione energetica. c) Struttura ibrida laterale-verticale: presenta alcuni dei vantaggi tipici di entrambe le strutture.

Infine la struttura ibrida è caratterizzata da un flusso di calore in ingresso verticale ed un passaggio di corrente e calore nel piano orizzontale di deposizione della struttura attiva. In tutti e tre i casi il flusso di corrente e calore nei materiali attivi avviene in piano, ed a differenziare le strutture è principalmente la disposizione delle sorgenti termiche rispetto al sistema termoelettrico.

Il principale vantaggio della prima e della terza struttura, detta a *sandwich*, consiste nella capacità di catturare meglio il flusso di calore in ingresso ed eliminarlo più efficacemente in uscita attraverso il dissipatore, ottenendo così maggior potenza in uscita. Allo stato attuale questa struttura è la più usata a livello commerciale nonostante presenti difficoltà costruttive. Al contrario le strutture laterali sono altamente compatibili con le tecnologie MEMS ed hanno il vantaggio di richiedere ridotti volumi di materiali attivi e bassi costi di produzione. [8] Ciò nondimeno è chiaro che il flusso di calore in questo caso è immesso attraverso il substrato e deve attraversarlo in parte per poter poi raggiungere eventualmente la parte attiva costituita, peraltro da termocoppie in serie in forme di strisciole a film sottile con esiguo *Fill Factor*. In tal caso quindi le potenze in uscita sono piuttosto basse, e simili configurazioni risultano in realtà più adatte per la realizzazione di sensori. La struttura ibrida invece è una struttura di compromesso fra le due già descritte. È importante sottolineare come indipendentemente dalla tipologia di struttura, l'ottimizzazione di un μ -TEG è possibile solo con un accoppiamento termico ed un flusso di calore ottimali.

Osserviamo che la struttura classificata da Yan *et al.* come verticale è immaginata essere sostanzialmente costituita da *leg* attivi realizzati a partire da materiali bulk. In realtà, esistono strutture che possono essere considerate varianti a film sottile della suddetta struttura verticale e che abbiamo preso in considerazione in varie alternative. Per comodità indichiamo questo genere di strutture *compatte a film sottile* o semplicemente *compatte*.

Un esempio di una simile struttura è riportato in Figura 2 estratta dalla letteratura. [9] Si tratta sostanzialmente di un multistrato ottenuto sovrapponendo più substrati isolanti su cui sono depositati i materiali attivi, n e p, che si alternano e sono collegati in serie. Più in avanti ritorneremo sui *layout* identificati nel corso del primo anno e da testare nel corso del secondo anno del WP2. Per ora basti osservare che tale struttura compattata riproduce meccanicamente una variante di un sistema verticale, come inteso da Yan *et al.*, pur essendo in ogni caso il flusso di calore parallelo al piano di deposizione dei film sottili. Se il substrato ha una conducibilità termica più bassa del materiale attivo, il flusso di calore dalla sorgente a temperatura superiore fluirà principalmente attraverso i film attivi e non nei substrati. Tale sorgente sarà fissata ad una estremità su di un piano trasversale ai piani dei substrati in buon contatto termico. Se il contatto fra sorgente vera e propria e dispositivo attivo è ottenuto con una interfaccia costituita di un buon conduttore di calore e isolante elettrico ci si attende un benefico effetto di *heat spreading/constriction*, [10] rispettivamente sulla estremità fredda/calda di cui il sistema dovrebbe beneficiare dal punto di vista dei flussi di calore. [7]

Un simile struttura dovrebbe avere diversi vantaggi rispetto a quelle laterali o ibride, poiché potenzialmente il rapporto fra l'area totale della sezione attiva e quella della sorgente, detto *Fill Factor*, è sensibilmente più alto che nelle altre due e pur trattandosi di una struttura a film sottile essa funziona come una struttura verticale, che è solitamente realizzata con materiali bulk (vedi Figura 1a). [8]

Il vantaggio del film è quello di poter essere depositato con tecniche poco costose e facilmente scalabili; anzi, in realtà, la struttura si presta anche ad essere usata anche per film spessi, con processi roll-to-roll, che avvantaggiandosi di un miglior *Fill Factor* producono rispetto ai film più sottili maggiori potenze in uscita.

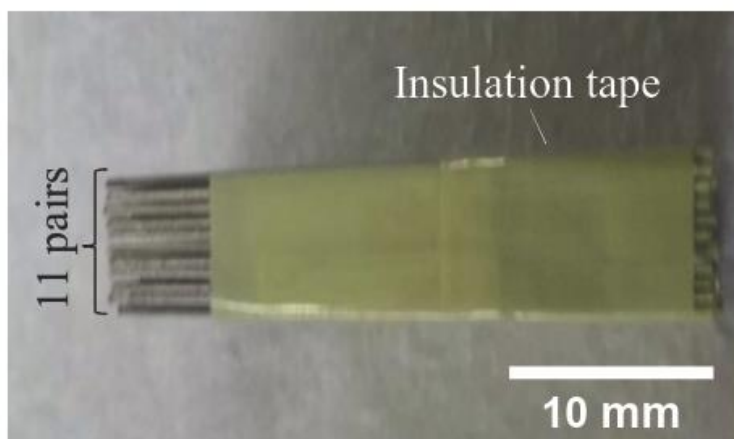


Figura 2. Esempio di struttura verticale multilayer a film sottili tratta da [9] e del tipo proposto in questa relazione. L'immagine mostra la sezione del TEG. Sorgente calda e fredda devono essere posizionate rispettivamente a dx e sx..

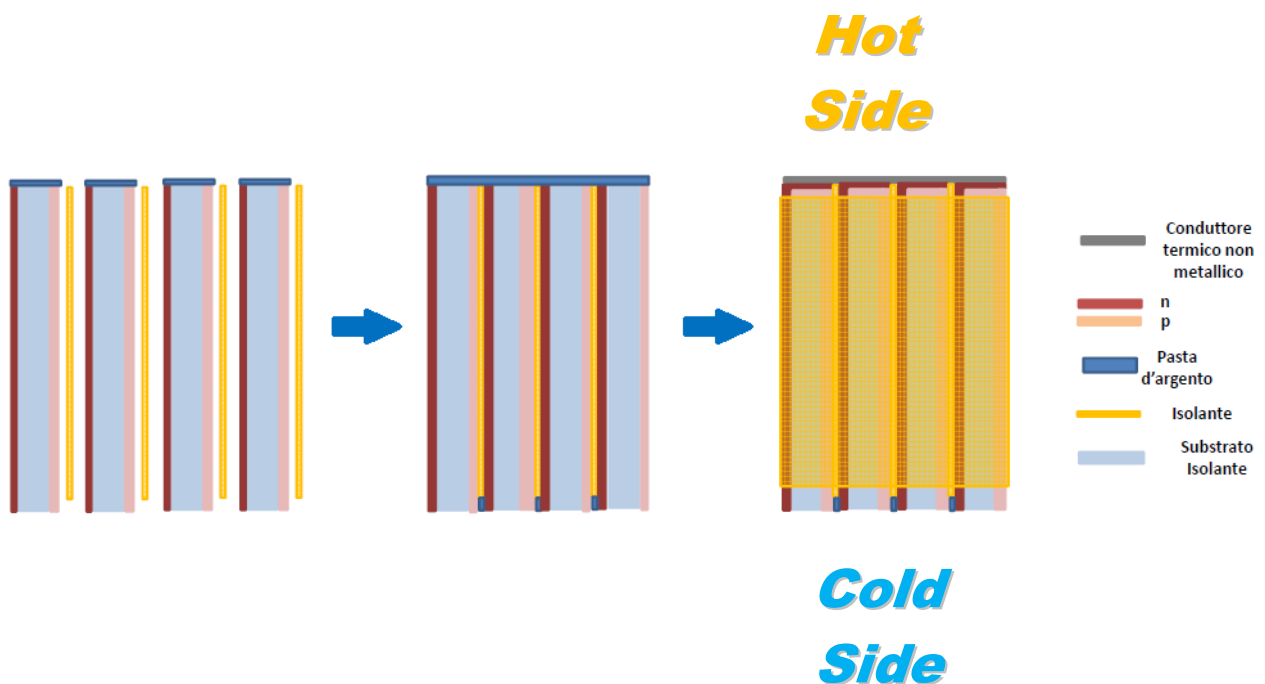


Figura 3. Schema di una plausibile struttura verticale-compatta a multistrato –variante alternata. In questo caso i film attivi sono depositati su entrambi i lati del substrato ed un materiale isolante tipo *kapton* è ipotizzato per l'isolamento elettrico, la protezione e la tenuta meccanica.

2 Layout Dispositivo

Per la realizzazione del previsto *proof-of-concept* verranno valutate e sottoposte a test preliminari alcune varianti di un sistema compatto a film sottile, quindi del tipo verticale, in grado di accoppiare efficacemente il modulo termoelettrico alla sorgente calda ed allo scambiatore dal lato freddo, ed ovviamente compatibili per difficoltà di realizzazione con le apparecchiature presenti nei laboratori del centro ENEA di Brindisi.

Come già anticipato, l'accoppiamento termico è un aspetto particolarmente importante nel caso delle applicazioni di interesse per il presente progetto, poiché le efficienze attese dei dispositivi realizzabili sono piuttosto basse a causa delle basse differenze di temperatura coinvolte (variabili dai pochi gradi centigradi alle poche decine di gradi), e per poter garantire la produzione di sufficienti densità di potenza è necessario che una grande quantità di calore (la più alta possibile) attraversi i materiali attivi del dispositivo.

Di seguito, in Figura 3 si riporta un primo esempio di struttura compatta ipotizzabile per i già menzionati scopi.

In linea di massima, è possibile depositare film sottili su substrati flessibili o rigidi. I substrati avranno area dell'ordine di pochi centimetri quadri, e potranno essere ricoperti da un solo lato (*unilayer*) o da entrambi i lati (*bilayer*). Il dispositivo finale sarebbe quindi costituito da un *multistack* di un certo numero di substrati collegati elettricamente in serie secondo l'usuale schema π (se visti in sezione). In Figura 3 una vista in sezione di una struttura tipo nel caso *bilayer*. Il flusso di calore è per ciascun *leg* in piano (quello dei materiali *p* ed *n* sul substrato) ed in parallelo al flusso di corrente.

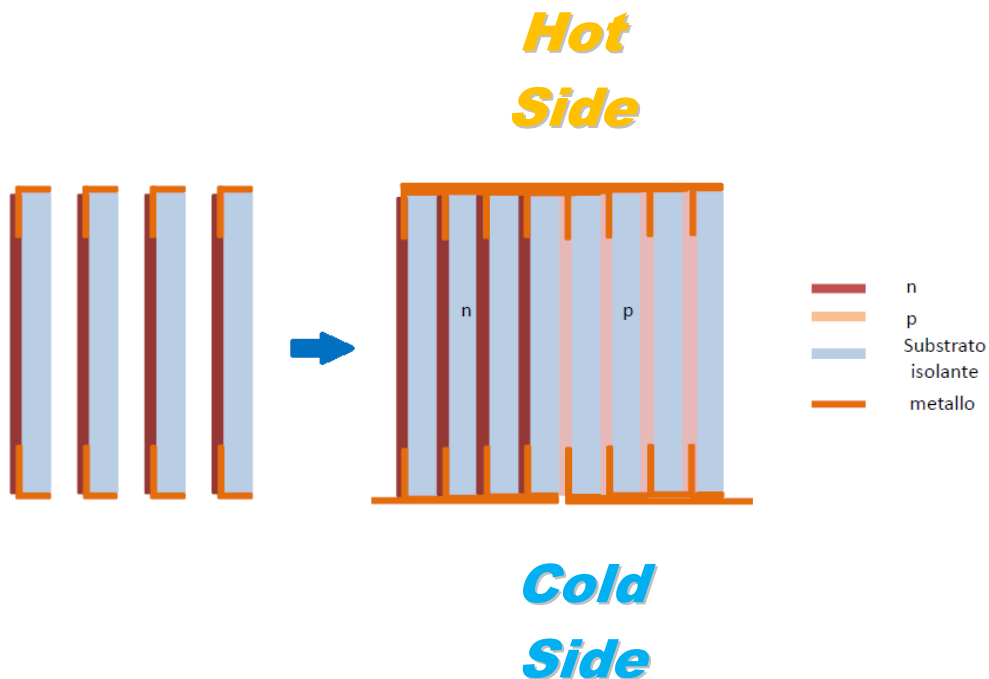


Figura 4. Schema di una struttura verticale-compatta a multistrato – variante a blocchi. In questo caso i film attivi sono depositati su un solo lato del substrato ed i multistrati sono sovrapposti in un due gruppi, uno di tipo n e l'altro di tipo p.

I contatti metallici di questa struttura sono costituiti da semplice pasta d'argento, e la tenuta meccanica dovrebbe essere assicurata da un opportuno involucro isolante, ad esempio *Kapton*. La struttura si ispira chiaramente a quella della Figura 2. Nello schema si riporta anche un substrato che svolge la funzione di interfaccia fra sorgente termica strettamente detta e il TEG e che funziona anche da *heat spreader/constriction*. [10]

Nella versione riportata in Figura 4, i substrati non sono alternati, ma sovrapposti e connessi in blocchi n e p, ed infine collettivamente collegati fra loro. Il vantaggio di una simile struttura dovrebbe essere quella di estrarre una maggior corrente; ovviamente a scapito della tensione, che invece è maggiore in un schema del tipo della Figura 3. Naturalmente, si tratta di una variante *unilayer*, ed è ipotizzata una pre-deposizione del metallo di connessione, sebbene ovviamente la connessione finale non escluda la possibilità di utilizzare pasta d'argento. Altre varianti di connessione sono infine riportate nelle Figura 5 e Figura 6.

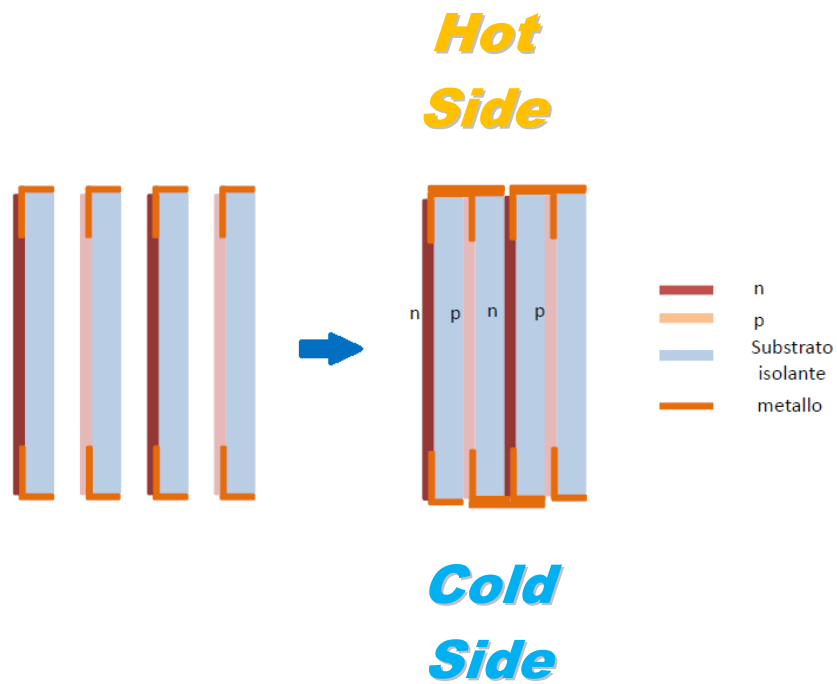


Figura 5. Variante di contattatura metallica depositata su struttura verticale-compatta a multistrato con n e p alternati.

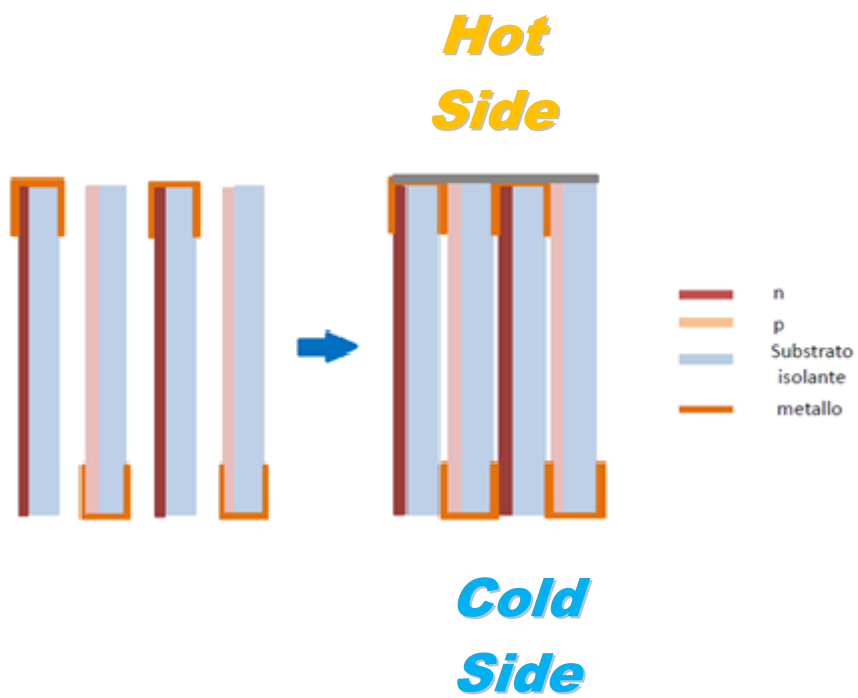


Figura 6. Variante di contattatura metallica da realizzare a ponte con materiale flessibile sovrapposto.

Verranno infatti considerate applicazioni che lavorino con differenze di temperatura di poche decine di gradi centigradi, ossia con valori compresi fra i 5 °C e i 50 °C, e valori medi non lontani dalla temperatura ambiente. Verranno vagliati diverse tipologie di substrati sia di tipo rigido che flessibile. Le dimensioni, da determinare con precisione a valle del processo di ottimizzazione teorica, saranno comunque dell'ordine di qualche centimetro quadrato. Lo spessore dei substrati di deposizione dovrà invece essere ottimizzato tenendo delle caratteristiche termoelettriche dei materiali attivi usati, Ag e Ni, al variare della temperatura negli intervalli termici summenzionati.

Come primo passo, infatti, tali caratteristiche verranno misurate in funzione della temperatura nell'intervallo compreso fra i 20 °C e 70° per entrambi i materiali caratterizzando i film ottenuti per *sputtering*, e le equazioni di bilancio energetico verranno risolte facendo uso di routine di calcolo appositamente realizzate con il software Mathematica. Queste ultime in particolare, da ottenere come evoluzioni di quelle già applicate, in prima battuta, nel corso di questa annualità per le valutazioni preliminari ed il confronto con la letteratura di un ampio ventaglio di strutture TEG.

Durante l'attività sperimentale lo scopo sarà la ottimizzazione: geometrica e meccanica dei materiali termoelettrici (spessori, larghezze, lunghezze dei *leg* e dei substrati, *Fill Factor*, rapporti fra gli spessori n e p); termica del dissipatore; termo-fisica dei parametri variabili (caratteristiche dei substrati).

3 Configurazioni termiche

Nel corso di questo primo anno di attività, una particolare attenzione è stata posta nell'individuare le problematiche di carattere generale dei sistemi μ -TEG di qualsiasi tipo. A tale scopo particolarmente utile risulta essere i modelli teorici di tali dispositivi che è possibile trovare in letteratura. I vari modelli studiati nel corso del primo anno di attività ci hanno aiutato, in prima battuta, ad individuare più chiaramente i fattori principali che intervengono nel funzionamento del dispositivo. La difficoltà maggiore è di solito modellare opportunamente la parte più strettamente attiva del dispositivo, che possiamo individuare nella singola termocoppia (generalmente due semiconduttori p e n in contatto elettrico), ai cui capi esiste una differenza di temperatura e , che nei termini più generali, deve essere modellata tenendo conto dell'effetto Fourier, dell'effetto Joule, dell'effetto Peltier e dell'effetto Thomson, in tutti i casi lungo ciascuno dei *leg* della coppia attiva considerata. Di più, tenendo conto della variazione delle caratteristiche termo-elettriche con la temperatura, tali effetti devono essere considerati in qualche maniera tenendo in conto della variazione della stessa lungo i *leg* e, quindi, anche della variazione spaziale dei parametri termo-fisici lungo di essi. Da questo punto di vista un approccio sistematico allo studio della letteratura concernente questo tipo di modellazione è risultato e risulta essere utile allo scopo, invocando tra gli altri in specie: il metodo del fattore di compatibilità [11] e quello cumulativo [12]. Entrambi sono stati, infatti, usati per un primo approccio alla realizzazione di routine di calcolo utili alla modellazione degli elementi attivi ed in prospettiva di quella dei generatori di interesse. Ciò nondimeno, per le applicazioni pratiche altrettanto importante, se non più importante, è determinare il modello di rete termica a costanti concentrate (equivalente elettrico) che tenga conto di tutti gli elementi costitutivi del TEG: l'insieme delle termocoppie variamente collegate fra loro; i substrati di deposizione; i substrati di interfaccia termici (*hot-plate* e *cold-plate*); gli eventuali elementi parassiti (contatti); il sistema di dissipazione; le varie tipologie di sorgenti. E ciò in modo che tali schemi possano servire da guida per impostare bilanci termici realistici e plausibili di configurazioni del sistema complessivo, sì da poterne prevedere il comportamento in funzione dei parametri geometrici e termo-fisici controllabili. Il lavoro preliminare di questo anno ha così consentito di studiare diverse reti termiche selezionandone alcune che costituiranno la base di partenza per i modelli di ottimizzazione e simulazione da realizzare ed usare nei prossimi due anni: a monte dei test delle strutture

ottime in condizioni realistiche di funzionamento, od a valle delle caratterizzazioni termoelettriche in laboratorio ed in condizioni controllate.

Di seguito esaminiamo in maggior dettaglio le principali reti emerse come maggiormente adatte al nostro contesto. Si tratta di tre possibili configurazioni schematicamente illustrate nelle figure seguenti, ove in tutti i casi i materiali termoelettrici risultano depositati su substrati isolanti e poco conduttivi termicamente. Tale parte attiva del dispositivo è immaginata, inoltre, chiusa a *sandwich* fra due substrati, presumibilmente ceramici, identici ed in contatto termico con i lati caldo e freddo (*hot-plate* e *cold-plate* in tutte le figure).

La Figura 7 riporta lo schema equivalente elettrico di un dispositivo del tipo μ -TEG in cui ad essere fissati, oltre ai parametri termo-fisici ed elettrici del dispositivo, sono il flusso di calore in ingresso Q_{in} e le caratteristiche di un dissipatore posto sul lato freddo del sistema, a sua volta interfacciato al TEG attraverso un substrato ceramico di buona conducibilità termica ma isolante elettricamente (*cold-plate*). Sulla parte destra della figura è schematizzato in particolare la parte attiva del TEG, costituita appunto, in generale, da una o più coppie p-n di semiconduttori (fra loro variamente interconnessi) in grado di convertire parte del calore in ingresso nel materiale attivo, Q_h , in energia elettrica. Nello schema tanto le perdite per effetto Joule, quanto i flussi di Peltier sono rappresentati da generatori di corrente. Per semplicità il primo è assunto a coefficiente costante e pari ad $1/2$, mentre il contributo dell'effetto Thomson è stato trascurato. Questa configurazione è probabilmente la più realistica in molte situazioni pratiche, in cui di fatto è la quantità di calore in ingresso ad essere fissata, mentre le temperature superiore ed inferiore risultano dalle condizioni generali di equilibrio e sono da determinare con la soluzione del set di equazioni di bilancio della rete. In circostanze di questo genere, ovviamente, le perdite di calore attraverso il substrato determinano una diminuzione della efficienza di conversione del dispositivo. Un contributo fondamentale deriva dal dissipatore posto dal lato freddo: in generale, più è efficiente maggiore sarà la differenza di temperatura ai capi della parte attiva del TEG (T_h-T_c) rispetto alla caduta termica sul dissipatore stesso; ciò nondimeno, in tale circostanza diminuirà comunque anche la differenza di temperatura complessiva (T_s-T_a), a parità di calore in ingresso. La procedura di ottimizzazione dovrà ovviamente tendere in questo caso alla massimizzazione della efficienza di conversione poiché in tal modo si massimizzerà la potenza in uscita.

Lo schema di Figura 8 presenta, invece, un caso piuttosto comune di configurazione di un sistema sottoposto a misura in laboratorio in condizioni controllate. Ad essere fissate in questo caso sono, infatti, le due temperature estreme T_s e T_a rispettivamente della sorgente di calore e del lato freddo del dissipatore. L'efficienza di quest'ultimo determinerà una diminuzione della resistenza complessiva della rete e, per intervallo fissato di temperatura, diminuirà di conseguenza il flusso di calore richiesto in condizioni di equilibrio, ma aumenterà il salto termico ai capi della parte attiva (T_h-T_c): da questo punto di vista i due effetti comporteranno un aumento dell'efficienza ma anche una diminuzione dell'energia in ingresso. Questa situazione è tipica dei casi in cui si hanno a disposizione due riserve termiche a temperature fissate e deve essere studiata attentamente perché riproduce di fatto una situazione tipica di laboratorio, o un caso reale in cui sia presente una sorgente di calore superiore oltre alla inferiore naturalmente costituita dall'ambiente esterno.

L'ultimo caso, riportato in Figura 9, riguarda la situazione in cui una cella Peltier sia fissata al lato freddo del μ -TEG con il suo lato freddo. Sull'altro lato della cella Peltier, quello caldo, si dovrebbe disporre di un efficiente dissipatore in modo che di fatto la cella funzioni come una sorgente di calore alla temperatura fissa $T_{cold, Peltier}$, inferiore a quella ambiente T_a . Il sistema opera cioè fra le due temperature fisse T_s e $T_{cold, Peltier}$, ad efficienza e produzione energetica invariabili. Il caso in questione simula di fatto una situazione riproducibile, e riprodotta talvolta, in laboratorio, ma irrealistica.

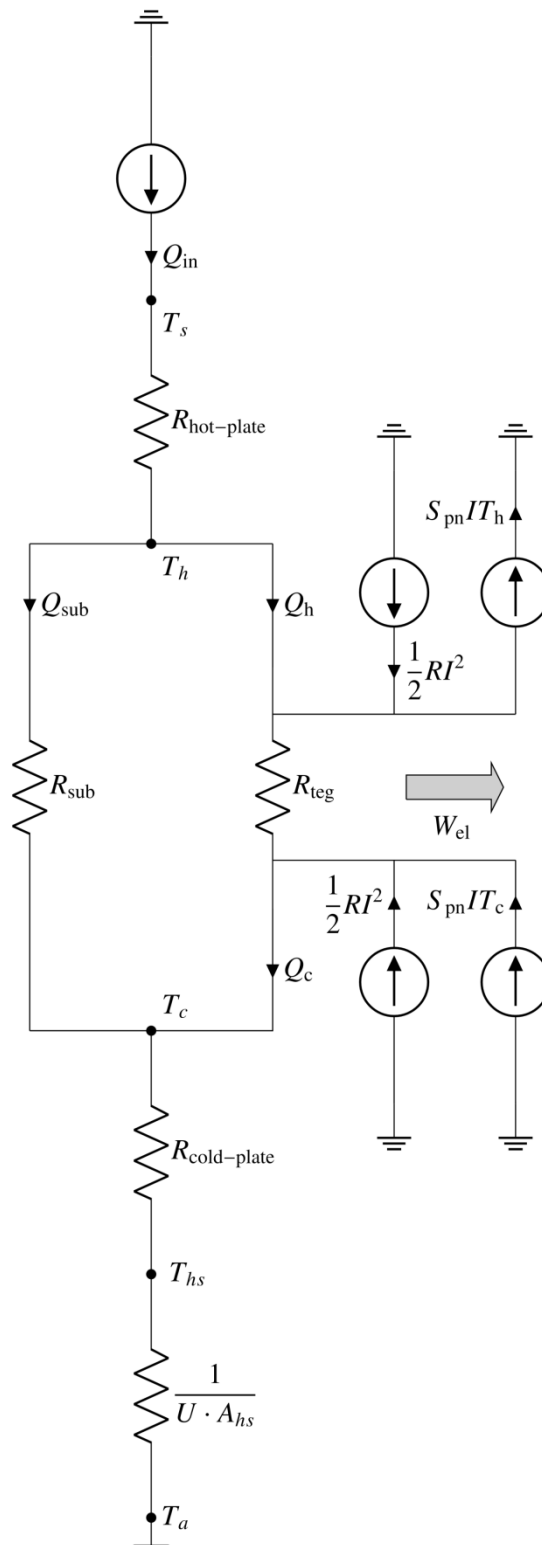


Figura 7. Schema elettrico equivalente di un TEG a potenza termica di ingresso fissata assieme alla temperatura inferiore (Temperatura ambiente). L'effetto Thomson è stato trascurato nello schema ma verrà considerato nelle simulazioni. A destra i generatori di corrente rappresentano i contributi Joule e Peltier. Nella parte bassa risulta presente un dissipatore di calore da dimensionare opportunamente per il funzionamento ottimale del tutto.

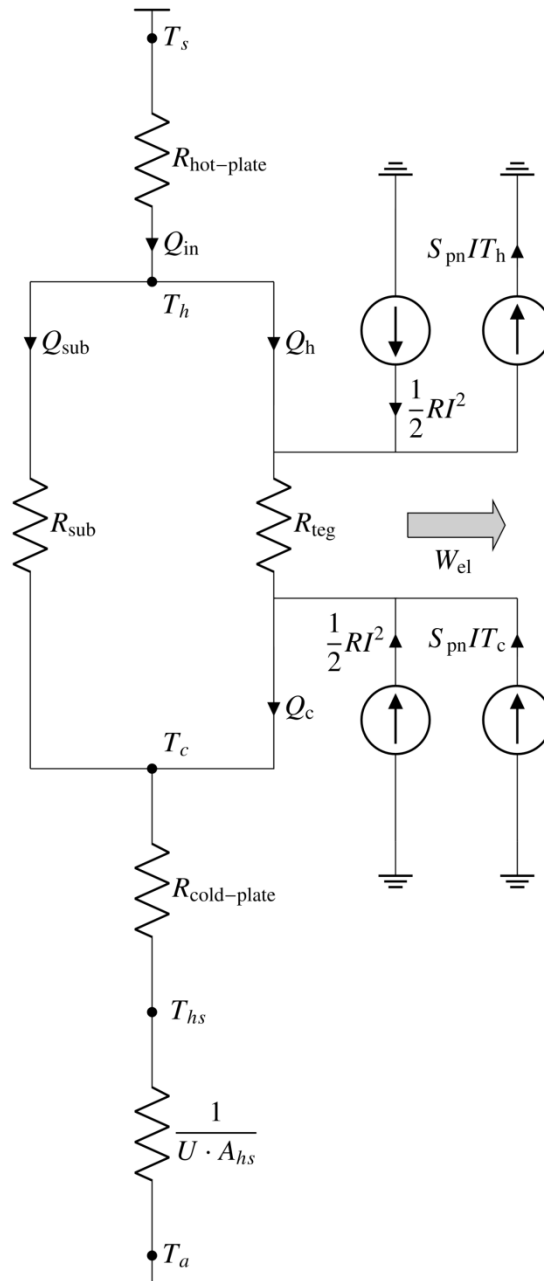


Figura 8. Schema elettrico equivalente di un sistema TEG posto fra due sorgenti di calore: una a temperatura superiore fissata T_s e l'ambiente. L'effetto Thomson è stato trascurato nello schema ma verrà considerato nelle simulazioni. A destra i generatori di corrente rappresentano i contributi Joule e Peltier. Nella parte bassa risulta presente un dissipatore di calore da dimensionare opportunamente per il funzionamento ottimale del tutto.

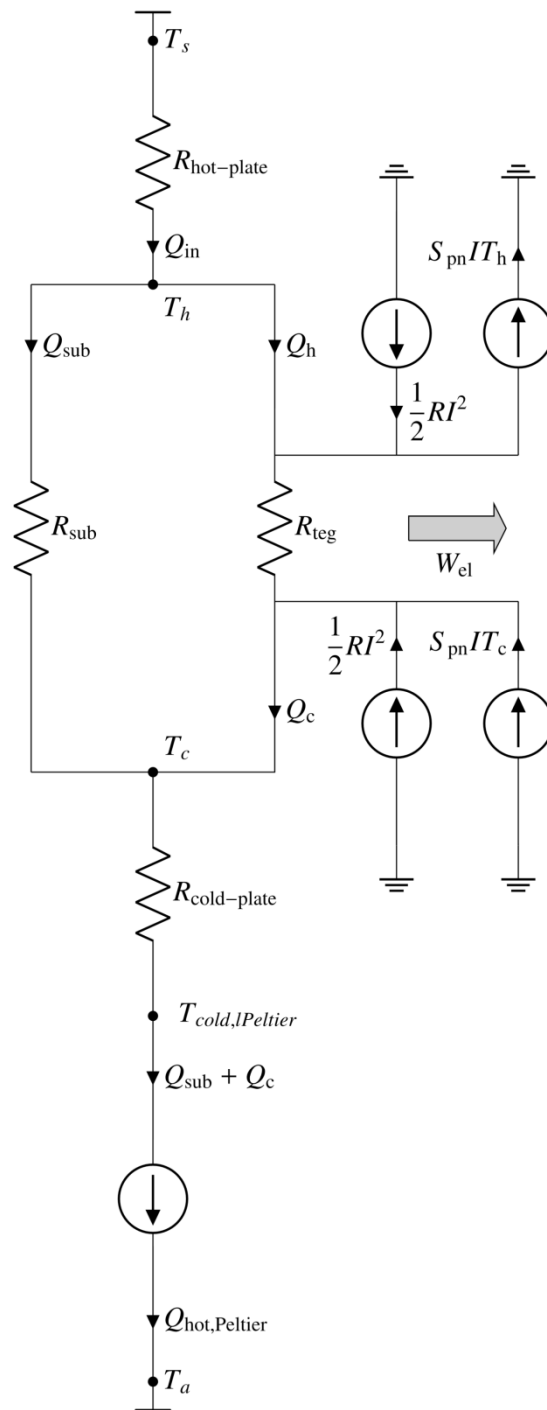


Figura 9. Schema elettrico equivalente di un TEG posto fra due sorgenti termiche a temperatura fissata: T_s e $T_{cold, Peltier}$. Quest'ultima temperatura è garantita dall'uso di un cella Peltier commerciale che operi con l'ambiente come sorgente superiore. L'effetto Thomson è stato trascurato nello schema ma verrà considerato nelle simulazioni. A destra i generatori di corrente rappresentano i contributi Joule e Peltier. Nella parte bassa il dissipatore di calore consente il funzionamento ottimale della cella Peltier.

I tre schemi riportati permettono di evidenziare facilmente i punti deboli già descritti delle strutture di tipo laterale. In pratica in tali configurazioni i valori di $R_{\text{cold-plate}}$ ed $R_{\text{hot-plate}}$ tendono ad essere elevati ma, soprattutto, a causa delle difficoltà di indirizzare appropriatamente i flussi di calore in ingresso ed uscita, si hanno valori del rapporto $R_{\text{sub}}/R_{\text{teg}}$ tendenzialmente piccoli anche per substrati appropriati; e ciò in ragione del fatto che il layout del dispositivo fa sì che il *Fill Factor* sia piuttosto basso: infatti, la configurazione della serpentina a pi-greco riduce le aree delle sezioni attive, peraltro sovrapposte al substrato e non direttamente in contatto con le sorgenti di calore.

Questi primi approcci allo studio dei sistemi μ -TEG in varie possibili condizioni ha permesso sostanzialmente di catturare gli aspetti essenziali di tali sistemi, le condizioni in cui possono in generale operare e le modalità di rappresentazione delle stesse. Inoltre, è stato possibile avviare la realizzazione di opportuni programmi di calcolo con il Mathematica ponendo le basi per quelli che verranno usati nella seconda annualità da usare: a monte, per una definizione di dettaglio, in termini di materiali e geometrie, dei generatori candidabili nelle diverse varianti realizzative (Figura 3-6); ed a valle della caratterizzazione funzionale dei generatori, per un confronto fra i risultati attesi ed i risultati sperimentali (presupposto per un eventuale raffinamento dei modelli stessi a fini progettuali e predittivi).

4 Conclusioni

Durante il primo anno di attività è stato affrontato lo studio dei principali modelli presenti in letteratura relativi alla parte attiva dei dispositivi termoelettrici. I modelli, in particolare, sono stati implementati con l'ausilio del Mathematica facendo uso di un approccio del tipo analitico-numerico. Ciò è da considerarsi, in particolare, il primo passo verso la realizzazione di programmi e modellazioni, ove possibili originali, che siano, in prospettiva delle attività previste per il secondo e terzo anno, in grado di simulare efficacemente configurazioni alternative di μ -TEG in condizioni di esercizio realistiche od in laboratorio.

Inoltre, a valle di tale studio e di una analisi attenta delle varie architetture di μ -TEG presenti in letteratura, sono state individuate alcune varianti di generatori termoelettrici del tipo verticale candidabili per la realizzazione *proof-of-concept* del terzo anno di attività. In particolare, si è individuata la struttura di massima di alcune varianti, qui denominate del tipo compatto, sulle quali si prevede di effettuare test costruttivi e prove preliminari, anche di tenuta meccanica, nel secondo anno di progetto.

Sono inoltre state individuate le prime versioni di reti termiche rappresentative, a costanti concentrate, quali modelli di funzionamento termoelettrico complessivo di un sistema μ -TEG sotto tre diverse condizioni al contorno. L'evoluzione di tali reti e delle relative routine di calcolo in grado di risolvere le equazioni del bilancio energetico ad esse connesso, consentiranno, da ultimo, la progettazione del sistema finale in termini di *layout* geometrico, scelta dei materiali di supporto, caratteristiche del dissipatore.

Val la pena sottolineare che tali tipi di modellazione-simulazione potranno essere efficacemente utilizzati, con le opportune variazioni, anche nel caso di strutture laterali del tipo convenzionale. E ciò soprattutto ove le prove di fattibilità delle strutture compatte dessero esito negativo. In tal caso i programmi realizzati e summenzionati verranno usati per la progettazione di opportune maschere metalliche adatte alla deposizione via tecniche PVD.

Da ultimo, l'esame della letteratura specialistica, unitamente alle considerazioni già elencate ed inerenti le caratteristiche generali dei dispositivi da testare, ha permesso di individuare nell'argento e nel nichel una coppia di materiali adatti alla sperimentazione oggetto di questo WP2 parallelamente allo sviluppo di materiali termoelettrici efficienti, a basso costo e basso impatto ambientale previsto nell'ambito del WP1 di questo progetto.

5 Riferimenti bibliografici

- 1) Sun, T., Peavey, J. L., Shelby, M. D., Ferguson, S., & O'Connor, B. T. "Heat shrink formation of a corrugated thin film thermoelectric generator", *Energy conversion and management*, 103 (2015), pp. 674-680.
- 2) Yadav, A., Pipe, K. P., & Shtein, M. "Fiber-based flexible thermoelectric power generator", *Journal of Power Sources*, 175(2008), pp. 909-913.
- 3) Iezzi, B., Ankireddy, K., Twiddy, J., Losego, M. D., & Jur, J. S. "Printed, metallic thermoelectric generators integrated with pipe insulation for powering wireless sensors", *Applied Energy*, 208 (2017), pp. 758-765.
- 4) Ankireddy, K., Menon, A. K., Iezzi, B., Yee, S. K., Losego, M. D., & Jur, J. S., "Electrical conductivity, thermal behavior, and seebeck coefficient of conductive films for printed thermoelectric energy harvesting systems", *Journal of Electronic Materials*, 45(2016), pp. 5561-5569.
- 5) Markowski, P., & Dziedzic, A., "Planar and three-dimensional thick-film thermoelectric microgenerators", *Microelectronics Reliability*, 48(2008), pp. 890-896.
- 6) Kim, H. S., Liu, W., Chen, G., Chu, C. W., & Ren, Z., "Relationship between thermoelectric figure of merit and energy conversion efficiency", *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112 (2015), pp. 8205-8210.
- 7) Contento, G., Lorenzi, B., Rizzo, A., & Narducci, D., "Simultaneous materials and layout optimization of non-imaging optically concentrated solar thermoelectric generators", *Energy*, 194 (2020), pp. 116867.
- 8) Yan, J., Liao, X., Yan, D., & Chen, Y., "Review of micro thermoelectric generator", *Journal of Microelectromechanical Systems*, 27 (2018), pp. 1-18.
- 9) Takayama, K., & Takashiri, M., "Multi-layered-stack thermoelectric generators using p-type Sb₂Te₃ and n-type Bi₂Te₃ thin films by radio-frequency magnetron sputtering", *Vacuum*, 144 (2017), pp. 164-171.
- 10) Yazawa, K., & Shakouri, A. "Energy payback optimization of thermoelectric power generator systems", In *ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, 44298 (2010), pp. 569-576.
- 11) Snyder, G. J., & Ursell, T. S., "Thermoelectric efficiency and compatibility", *Physical review letters*, 91 (2003), pp. 148301 1-4.
- 12) Kim, H. S., Liu, W., & Ren, Z., "Efficiency and output power of thermoelectric module by taking into account corrected Joule and Thomson heat", *Journal of Applied Physics*, 118 (2015), pp. 115103 1-9.