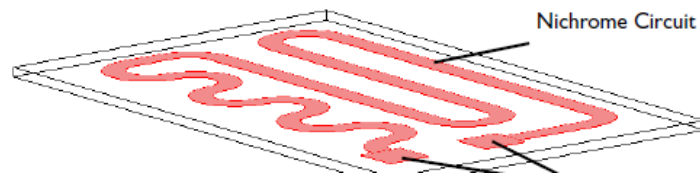


EFEITO TERMOELÉTRICO, ELETROSTÁTICO E PIEZOELÉTRICO

PARTE 1 – Tutorial COMSOL de desenho da geometria do circuito (Heating circuit)

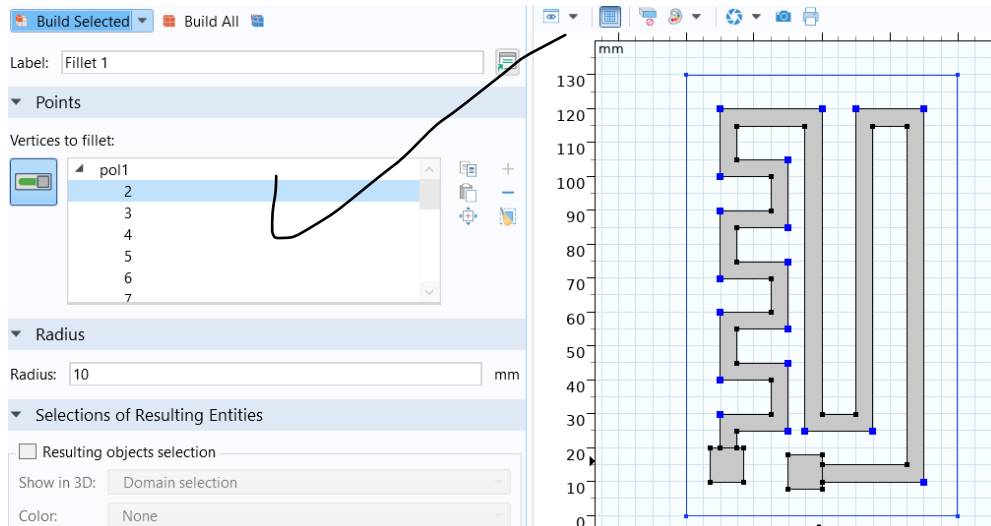


O dispositivo consiste numa camada resistiva em forma de serpentina, depositada numa placa de 130 mm x 80 mm x 2 mm. Em cada extremidade da serpentina, existe uma região de contato (Pads), medindo 10 mm por 10 mm. Assume-se que as bordas e as laterais da placa estão isoladas termicamente.

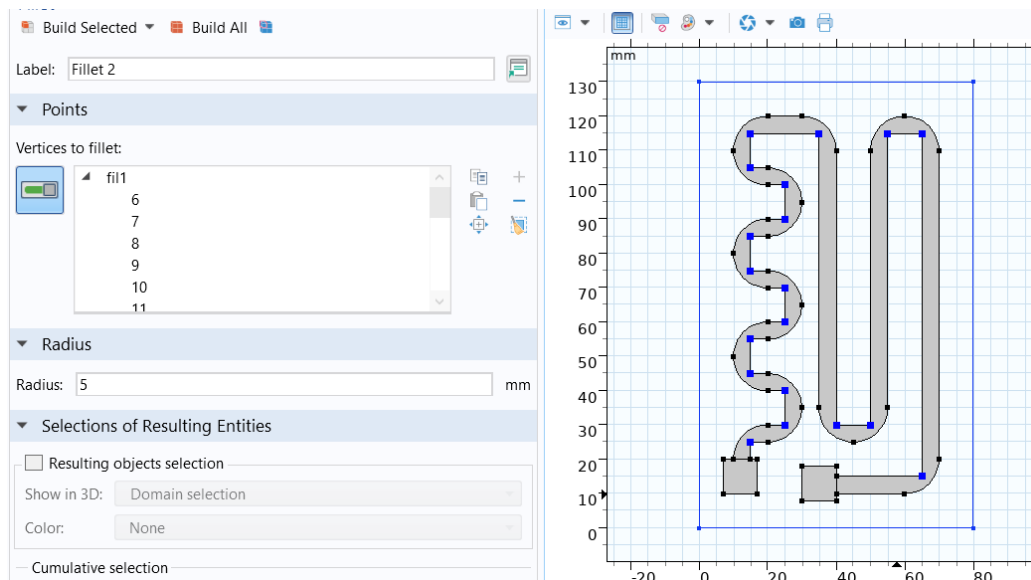
- 1) Criar novo *Blank model* e adicionar componente 3D.
- 2) Ir a parâmetros e criar novos parâmetros, correspondentes à espessura que a serpentina terá e ao potencial elétrico, respetivamente.
Nome: *d_layer*, expression: 1 [mm], description: layer thickness;
Nome: *voltage*, expression: 20[V], description: voltage
- 3) Dentro da componente, clicar em Geometry 1 e, na janela de settings, definir a unidade principal para mm.
- 4) Desenhar um bloco 3D de dimensões 80 x 130 x 2 mm (canto posicionado em 0,0,0). Clicar em *build selected*. Ajustar a janela (*zoom extents*) para ver a geometria completa.
- 5) Dentro de Geometry 1, clicar com o botão direito e adicionar *work plane*. Na secção de *Plane Definition*, criar um plano xy, com a coordenada z a 2 mm (ou seja, estamos a desenhar um plano no topo do bloco anteriormente construído). Build selected.
- 6) Clicar em show work plane (1º símbolo na janela settings, à esquerda de “build selected”). Agora, vamos começar a desenhar no plano 2D.
- 7) Desenhar um dos contactos da serpentina: Na Geometry 1, dentro do Work Plane, surgiu um novo campo de Plane Geometry. Clicar com o botão direito em Plane Geometry e, nas primitivas disponíveis, seleccionar quadrado. No tamanho do quadrado, colocar 10 mm de lado. Na posição, no campo xw, colocar 7 mm; no campo yw colocar 10 mm. Build.
- 8) Desenhar o outro contacto. Como têm a mesma dimensão, clicar (botão direito) em Square 1 e seleccionar Duplicar. No novo quadrado, a posição é: xw: 30 mm; yw: 8 mm. Build.
- 9) Desenhar a serpentina que vai ligar os 2 contactos. Em Plane Geometry, clicar com o botão direito e, nas primitivas disponíveis, seleccionar Polygon. Na secção de coordenadas, em vez de ter a opção Table (que aparece por defeito), vamos importar a lista de coordenadas do polígono a partir de um ficheiro auxiliar. Por isso, em Data source, seleccionar File. Procurar o ficheiro *heating_circuit_polygon.txt* e importar. Build.

10) Agora que a geometria base está desenhada, vamos arredondar os cantos da serpentina através da função Fillet. Em Plane Geometry, clicar com o botão direito e selecionar a opção Fillet.

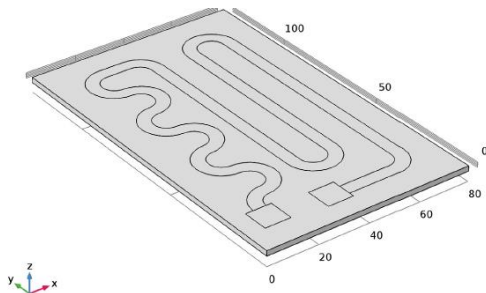
11) Nas settings, no campo de raio (radius), selecionar 10 mm. Para selecionar os pontos a arredondar, escolher todos os pontos de curvatura exterior (exemplo: pontos a azul na figura abaixo). São os pontos: 2–8, 23–29, 34, 36, 37, 41, 42. Build.



12) Fazer agora o mesmo para arredondar os pontos interiores. Criar novo Fillet (botão direito em Plane Geometry). Nas settings, no campo de raio (radius), selecionar 5 mm. Para selecionar os pontos a arredondar, escolher todos os pontos de curvatura interior (exemplo: pontos a azul na figura abaixo). São os pontos: 6–12, 26–31, 37, 40, 43, 46, 49, 50. Build.



13) Por fim, fazer a união da estrutura: bloco 3D + plano 2D desenhado. Para isso, em Geometry 1, onde aparece Form Union, clicar em Build All.



14) A serpentina foi inicialmente como um work plane diretamente desenhado no bloco (sem espessura). Agora vamos aplicar uma espessura de 1 mm (apenas à serpentina), através de extrude, sobre a superfície de base. Clicar com o botão direito do rato em Work Plane 1, selecionar extrude. Na distância a colocar, identificar a variável d_layer (que tinham criado anteriormente em parâmetros). Observa a geometria 3D criada, após o extrude.

PARTE 2 – Heating circuit (aquecedor)

Este exercício consiste em simular um circuito de aquecimento baseado no efeito termoelétrico. O dispositivo consiste numa serpentina de níquel, à qual será aplicada uma corrente elétrica, sobre uma estrutura de silício.

1 – Começar por adicionar os materiais. Adiciona o material **níquel** à serpentina (incluindo a região dos pads). No domínio da base coloca um material semiconductor, como o silício policristalino – **Si – Polycrystalline silicon**.

Se faltarem dados nas propriedades do material (poderão ser pedidas mais tarde, quando adicionarmos as físicas), assumir os valores de:

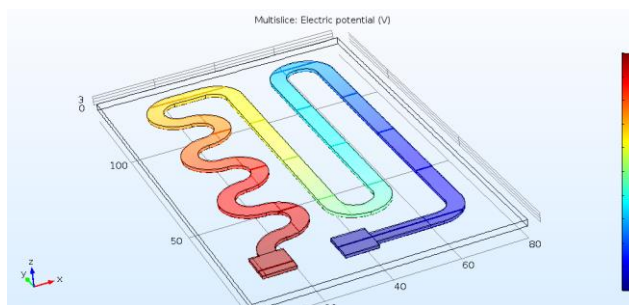
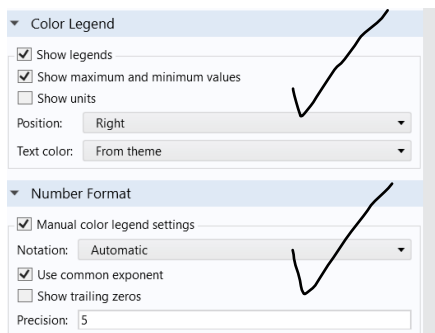
	coeficiente de Seebeck	permitividade relativa	condutividade elétrica
níquel	-15 V/K	110	-
silício policristalino	440 V/K	-	1.56e-3 S/m

2 – Adicionar as físicas. Adiciona ao modelo o **efeito termoelétrico**. Nesta fase, iremos **considerar apenas a serpentina** (Vamos deixar de fora, por enquanto, a base de silício). Para isso, tanto na física associada ao módulo das correntes elétricas como na física de transporte de calor, apenas o domínio da serpentina deve estar selecionado. Aplica aos pads quadrados na extremidade da serpentina uma diferença de potencial. Para isso, aplica condições de fronteira: a um dos contactos um terminal de tensão com potencial de 20 V (parâmetro **voltage** que tinha sido criado) e ao outro ground. Por fim, confirma que, na física Heat Transfer in Solid, nas condições iniciais (initial values, está **definida uma temperatura inicial de 273.15 K**)

3 – Cria uma malha normal e simula em estado estacionário o efeito termoelétrico.

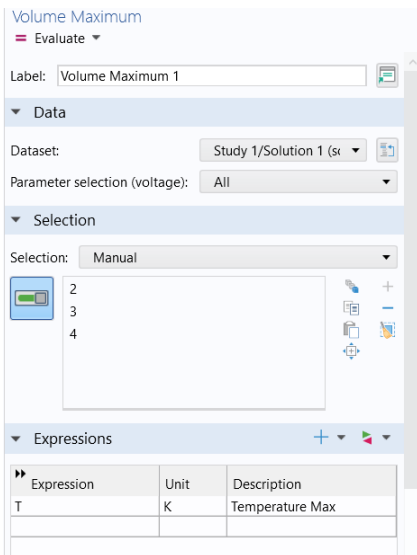
Questão 1:

Analisa a distribuição da densidade de corrente, da diferença de potencial e da temperatura gerada no domínio. O que se observa em relação à temperatura máxima e mínima, em comparação com a temperatura inicial do sistema? Sugestão: para facilitar ver as escalas, podem mostrar os valores máx e mínimos nas escalas dos gráficos de temperatura, assim como ajustar o n° de algarismos a mostrar.



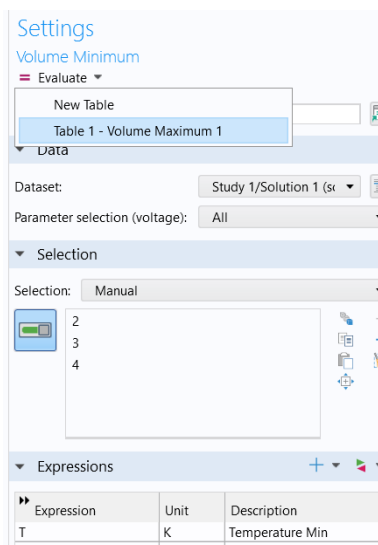
4 – Vamos criar agora uma simulação paramétrica para ver qual a influência da tensão aplicada na temperatura máxima e mínima atingida pelo domínio. Em study, clicar com o botão direito e selecionar *parametric sweep*. Nas *settings*, selecionar o parâmetro **voltage**. Na lista de valores, variar a tensão entre 10 e 50 V, em intervalos de 10V: range(10,10,50). Compute!

Para analisar os dados, vai a: **Results >> derived values (botão direito do rato) >> maximum >> volume maximum**. Confirma que o dataset tem a solução do study 1 e que nos parâmetros estão todos os valores selecionados (Parameter selection: ALL). Seleciona os domínios correspondentes à serpentina e contactos, e escolhe como expressão a avaliar o valor de T. No campo “description”, podes personalizar o nome do campo que queres que apareça na tabela.



Ao clicar em Evaluate, os resultados da T máxima surgirão em forma de tabela.

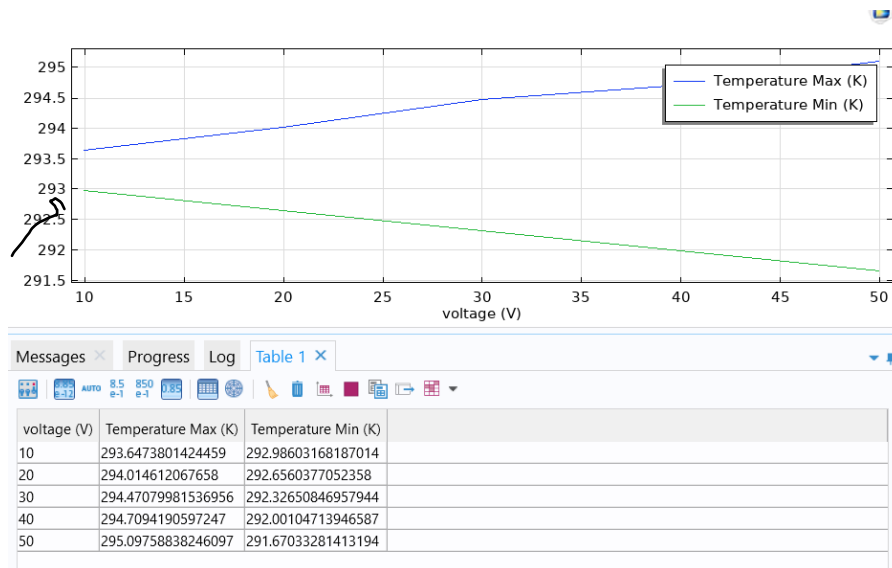
Vai novamente a derived values e **analisa agora a T mínima no domínio: Results >> derived values >> minimum >> volume minimum**. Confirma que o dataset também tem a solução do study 1 e que nos parâmetros estão todos os valores (Parameter selection: ALL). Seleciona os domínios da serpentina e contactos, e escolhe como expressão o valor de T. **Ao fazer evaluate, clica na setinha ao lado e seleciona ~~Table 1~~** (em vez de nova tabela), para ficar na mesma tabela que os valores máximos, mas noutra coluna:



tabela

Sobre a tabela gerada, com as duas colunas de resultados, clica na opção table graph, com o símbolo abaixo, para que os resultados surjam em forma de gráfico (que pode ser exportado):

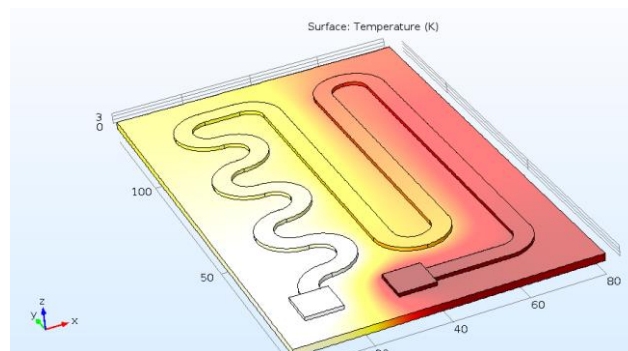




Questão 2:

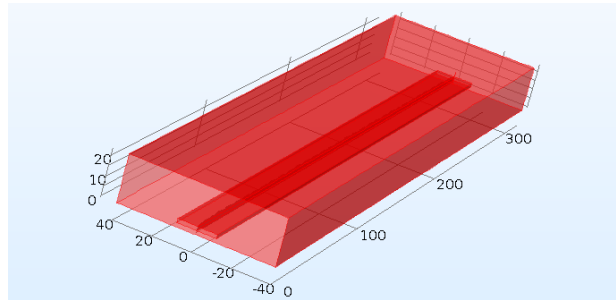
Observe os gráficos da variação da temperatura máxima e mínima em função da tensão elétrica. Se aumentar a tensão elétrica, o que acontece ao intervalo de temperatura atingido?

5 – Por fim, vamos considerar agora também como se comporta a estrutura completa, considerando também a estrutura de silício sob a serpentina. **Nas duas físicas consideradas, componente de transporte de calor em sólidos e correntes elétricas, todos os domínios devem ser agora selecionados.** Na tensão aplicada, considere 20 V (podes desativar a simulação paramétrica, clicando no botão direito em *parametric sweep* e selecionando *disable*). Refaz a malha e resolve novamente em estado estacionário.



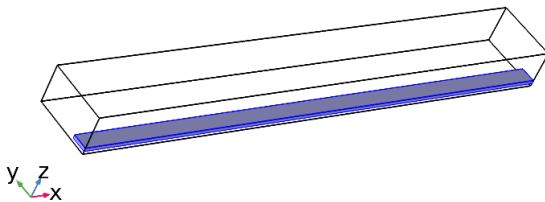
PARTE 3 – Simulação de uma força eletrostática num cantilever/viga de polissilício

Força eletrostática: descreve a força entre as cargas elétricas em repouso ou movimento lento nas estruturas. A força eletrostática leva à atração entre superfícies de carga oposta e à repulsão entre estruturas com a mesma carga. Vários dispositivos baseados em microssistemas eletromecânicos (MEMS) exploram as forças eletrostáticas para atuar interruptores e deformar estruturas.



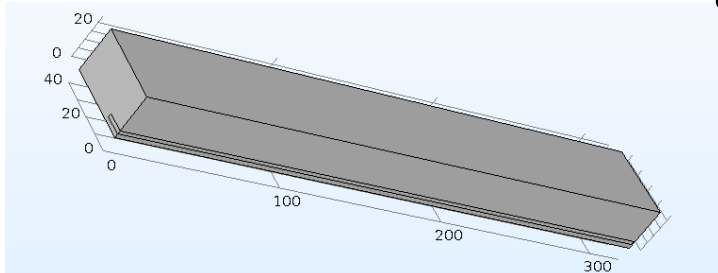
A viga é a região mais escura que vemos na base. À volta, em tom mais claro, é um domínio de ar.

Como se vai considerar um problema com simetria, apenas se vai simular metade da geometria (adiante há mais detalhes).



Resumo do problema a implementar (os passos para a implementação estão descritos abaixo):
A viga é composta por polissilício com módulo de Young de 153 GPa, coeficiente de Poisson de 0.23. Está fixa numa das extremidades e mecanicamente livre no resto da estrutura. Para o modelo físico em questão, vai ser desprezada a penetração de campo elétrico na estrutura sólida. A viga está inserida numa câmara com ar eletricamente isolada. O lado inferior da câmara de ar tem um elétrico ligado à terra. Aplicando uma diferença de potencial entre os dois elétricos gera-se uma força eletrostática que deforma o material. À medida que a viga se deforma, a geometria do ar muda continuamente, o que resulta numa variação do campo elétrico entre os elétricos. A interface eletromecânica permite simular isto.

1 – Num novo ficheiro COMSOL, criar componente 3D e desenhar uma geometria 3D tendo em conta a geometria final (atenção às unidades – definir nas settings [um]):

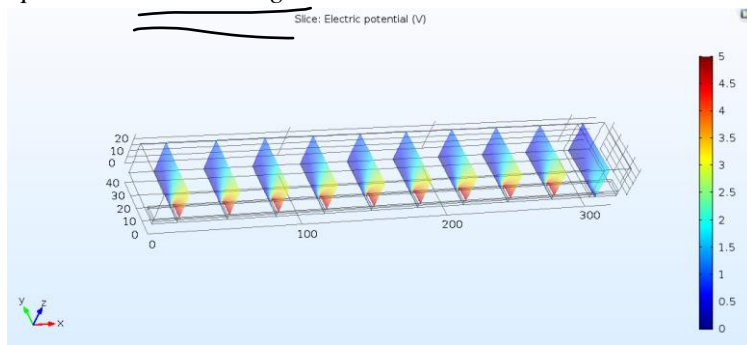


A geometria será composta por dois blocos:

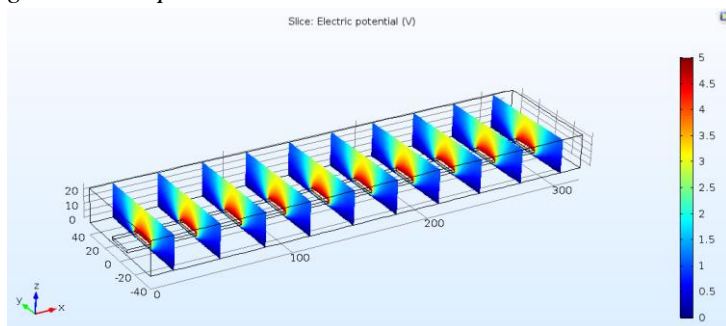
320 x 10 x 2 um, com o canto posicionado nas coordenadas $(x, y, z) = (0, 0, 2 \text{ um})$

320 x 40 x 24 um, canto posicionado em $(0, 0, 0)$

Neste trabalho pretende-se também estudar o efeito da utilização de simetrias no COMSOL, como dica para poupar recursos computacionais. Assim, a geometria acima desenhada corresponde apenas a metade da viga:



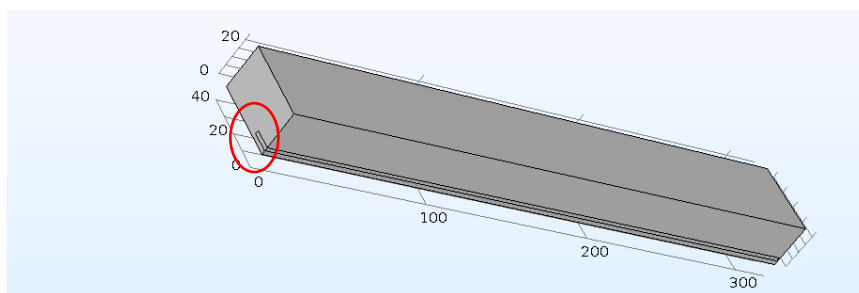
Como todo o comportamento é simétrico, iremos simular apenas esta metade e no final da simulação analisar os resultados para um todo, aplicando um espelho aos resultados, como na geometria representada abaixo:



2 – Adicionar o módulo de **mecânica estrutural** >> **interação eletromagnética-estrutura** >> **eletromecânica** e aplicá-lo ao domínio sólido da viga. ✓

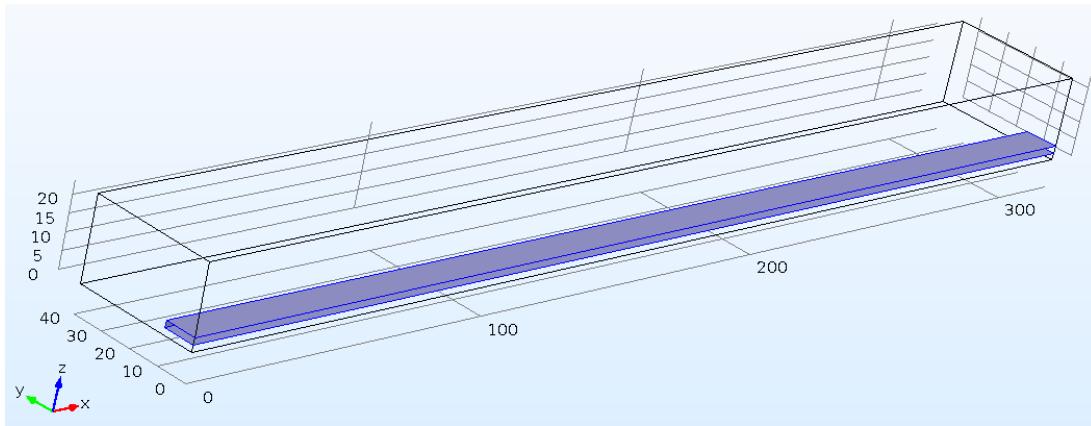
O domínio correspondente à viga irá comportar-se como um material condutor quando atuado a um potencial constante (é o caso). Assim, para fazer corresponder isso mecanicamente na física do problema, vamos assumir o **domínio da viga como “linear elastic material”**. O domínio de ar não deve estar selecionado na física solid mechanics.

Uma das extremidades da viga [ver círculo vermelho na figura] será fixada mecanicamente (*fixed constraint*):

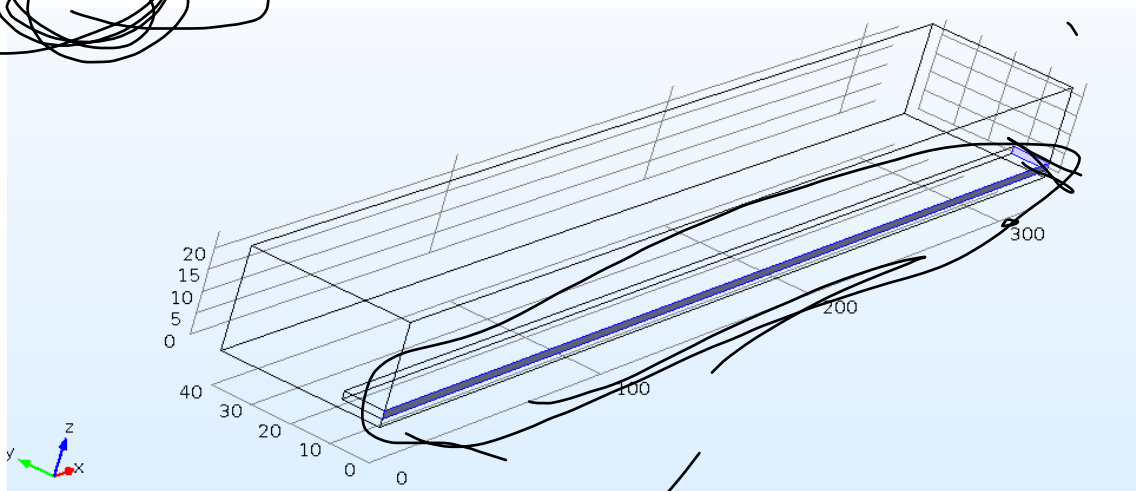


Vamos agora definir as condições elétricas do problema (*nota, para definir as fronteiras o mais fácil é colocar a geometria transparente, para ter acesso às fronteiras interiores*):

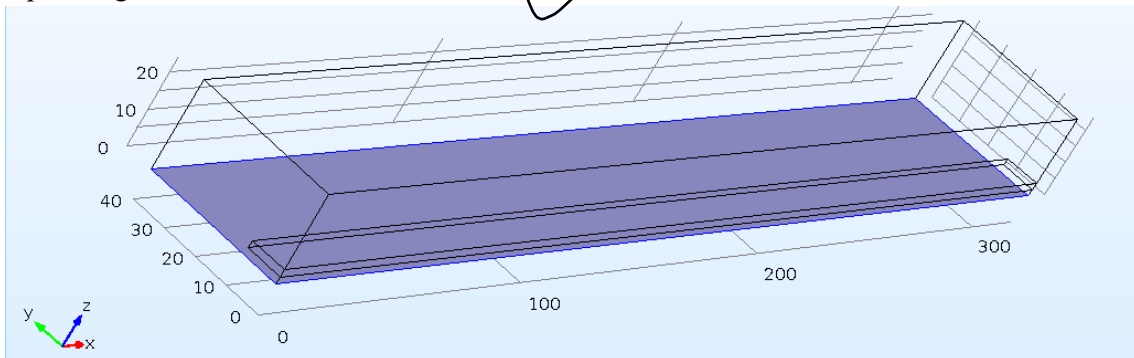
Fronteiras com potencial elétrico de 5 V (condição *terminal*) – 3 fronteiras da viga (inferior, superior e traseira), que correspondem às fronteiras exteriores da viga – não esquecer que isto corresponde apenas a metade da geometria: ✓



Fronteiras livres (a central corresponde à fronteira que fará espelho): Por defeito, o software aplica condição zero charge a todas as outras fronteiras não especificadas, comportando-se como simetrias.



Aplicar “ground” à base da câmara de ar:



Por defeito, o software aplica condição zero charge a todas as outras fronteiras não especificadas, comportando-se como simetrias.

3 – Materiais:

Para a viga, adicionar um novo material [blank material] com as seguintes propriedades:

Property	Name	Value	Unit	Property group
Relative permittivity	epsilon _r	4.5	I	Basic
Young's modulus	E	153 [GPa]	Pa	Basic
Poisson's ratio	nu	0.23	I	Basic
Density	rho	2330	kg/m ³	Basic

Para a câmara, adicionar o material ar (para este módulo a única propriedade necessária para resolver a física que implementamos é a permitividade relativa)

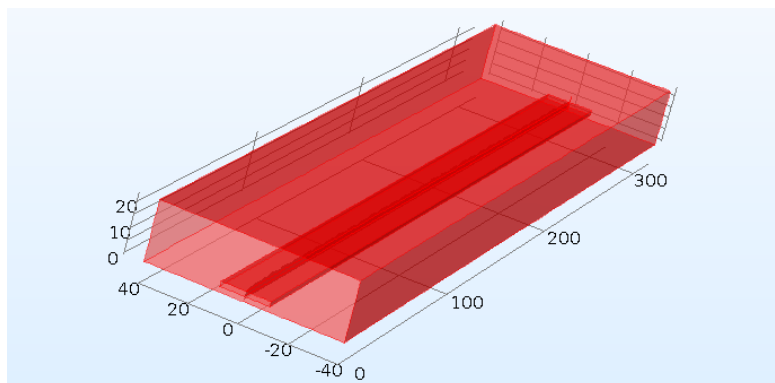
Property	Name	Value	Unit	Property group
Relative permittivity	epsilon _r	1	1	Basic

4 – Malha e simulação:

Definir uma malha normal para o problema e **resolver em estado estacionário** (*stationary study*).

5 – Pós-processamento:

Analisar os resultados do potencial elétrico e do deslocamento da barra atuada para a geometria simulada. Agora, vamos criar o efeito *mirror* para análise dos resultados na viga completa. Na opção data sets dos resultados, **criar um data set mirror 3D** (opção *more data sets*). Na lista de planos associada ao data set, **seleciona planos zx**. *Plot*.



Analisar agora os resultados de deslocamento e tensão elétrica. Para ver nestas condições, **selecionar como fonte dos dados (dataset), o dataset *mirror* criado** (dentro dos resultados, seleccionar o *dataset* de interesse).

Para visualizar o deslocamento apenas na direção z – ir aos resultados, clicar em surface e substituir a expressão a visualizar (seta verde e vermelha): seleccionar Component 1 > Electromechanics (Solid Mechanics) > Displacement > Displacement field (Material) > w - Displacement field, Z Component.

Questão 3:

O que se observa em relação ao deslocamento em z do cantilever? Em que sentido se está a deslocar o cantilever? E como se propaga o potencial elétrico para o meio de ar?

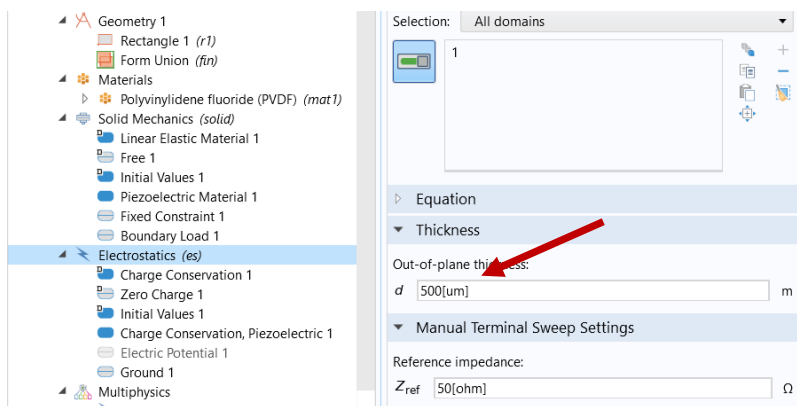
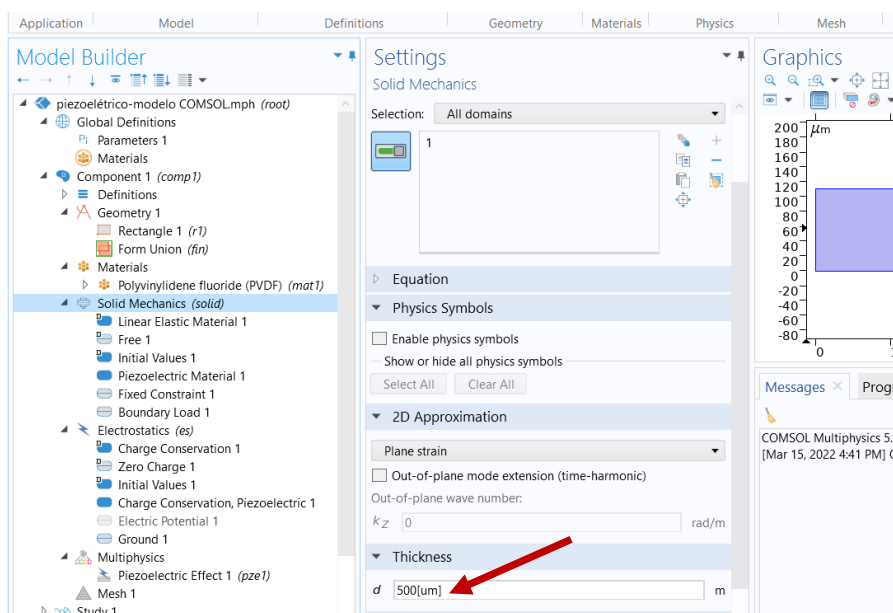


PARTE 4 – Simulação de efeito piezoelétrico num filme de PVDF

A interface *Piezoelectric Devices* combina os recursos de modelação de Mecânica dos Sólidos e de Eletrostática do COMSOL numa ferramenta acoplada para materiais piezoelétricos.

Passo 1 – Num novo ficheiro COMSOL, cria **componente 2D**, e, nas settings da geometria, selecciona micrómetro como unidade de comprimento. Desenha uma barra retangular de **500 μm x 110 μm** .

Atribui à barra o material polifluoreto de vinilideno - PVDF (através de *add material*) e acrescenta o módulo de física **Piezoelectricity-Solid** (encontra-se dentro do campo *Structural Mechanics*) – que adiciona ao modelo 2 módulos (nas settings dos 2 módulos criados, considera **espessura $d=500 \mu\text{m}$** nas duas partes: *solid mechanics* e *electrostatics*). ✓

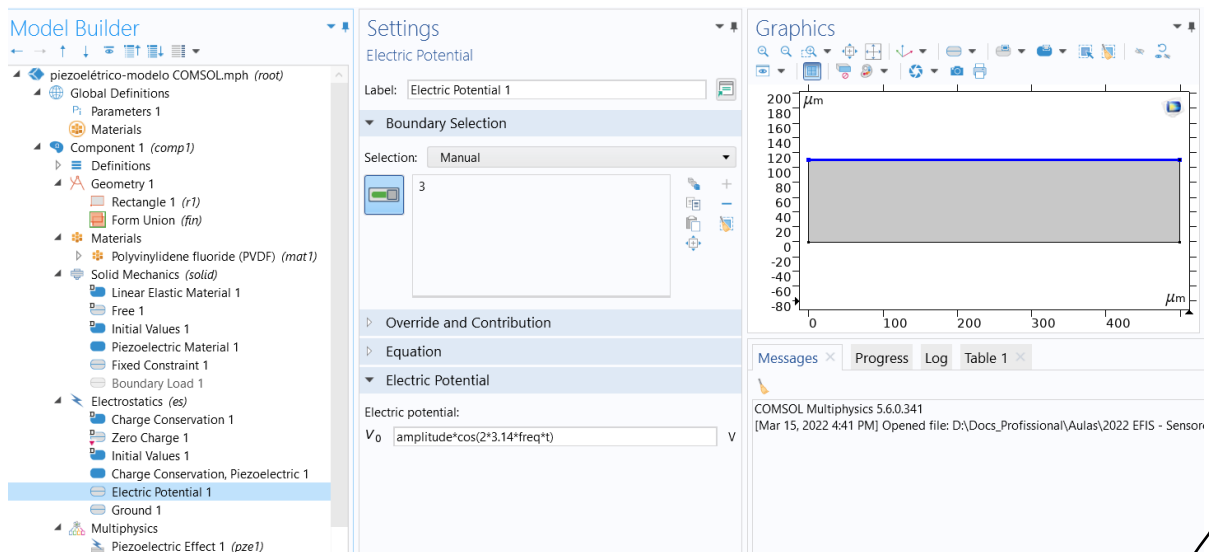
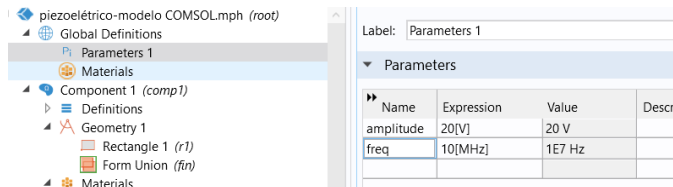


Ao adicionar o módulo Piezoelectric devices, surge automaticamente o módulo Multiphysics [é este campo multifísica que permite que a física mecânica e eletrostática se relacionem].

Em primeiro lugar aplica uma tensão elétrica sinusoidal aos contactos do material piezoelétrico e vê a deformação gerada. Para isso, na componente de **electroestática**, na face superior aplica uma

condição fronteira de tensão (*electric potential*), onde se irá definir como tensão elétrica uma função sinusoidal de amplitude 20 [V] e frequência 10 [MHz] (frequência de ressonância do material para a espessura considerada). Como fazer?

Cria no projeto os parâmetros: amplitude 20 V e freq 10 MHz, e, depois, na tensão aplicada (boundary condition >> electric potential) usa a expressão: amplitude*cos(2*3.14*freq*t) [nesta fase os parâmetros amplitude e freq já são conhecidos do programa]

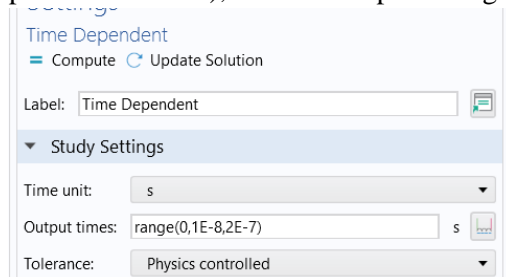


Ainda no módulo de eletrostática, na face oposta cria uma **condição fronteira ground**, para que haja diferença de potencial entre os lados do piezoelétrico e este possa vibrar.

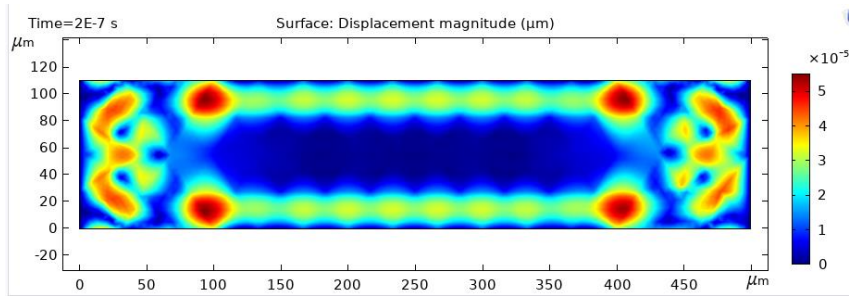
As faces laterais são definidas como *zero charge*, tal como o software deixa por defeito.

Mecanicamente, no **módulo de mecânica de sólidos**, deixam-se as fronteiras superior e inferior livres. **As extremidades da esquerda e da direita assumem-se como fixed constraint.**

Adicionar um Study: **Simulação transiente (*time dependent*)** ao longo de $2e-7$ segundos (2 períodos de onda), com timestep $1e-8$ segundos: **range(0,1E-8,2E-7)**.



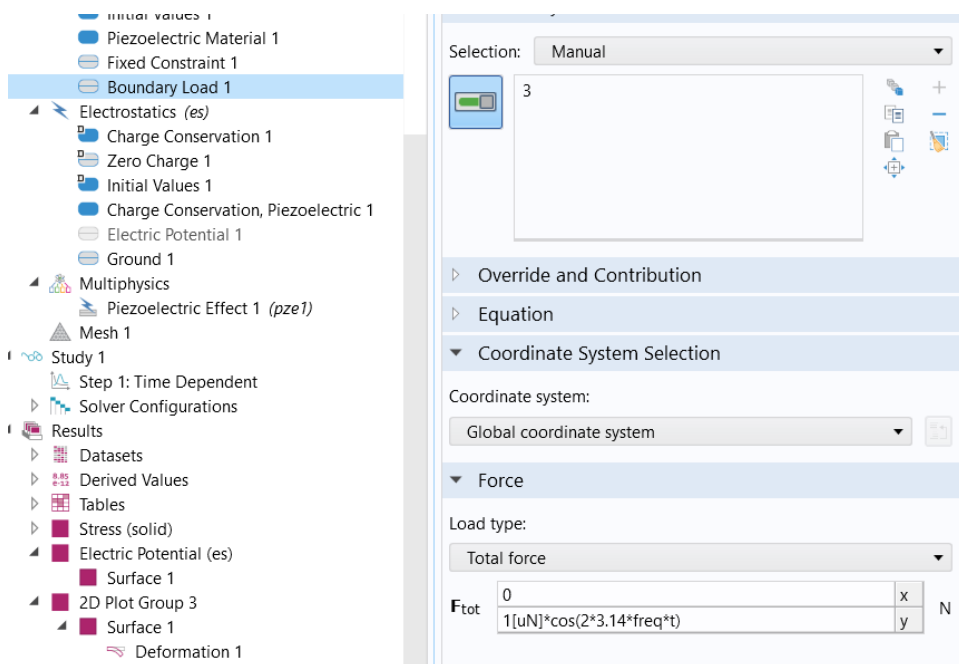
Compute.



Analisar a deformação da barra ao longo do tempo através da ferramenta *animation >> player*.

Passo 2 – Agora, em vez de aplicar uma tensão elétrica, aplica uma força mecânica sinusoidal de amplitude 0.5 uN e frequência também 10 MHz (boundary load) à estrutura (na face superior do piezo) para ver qual a tensão elétrica gerada.

Para isso, faz *disable* à condição fronteira da tensão elétrica aplicada (ou seja, desativar o estímulo elétrico) e, no módulo de mecânica, adiciona uma *boundary load* na face desejada (face superior do piezo). Na boundary load, seleciona o tipo de força (**total force**) e coloca a seguinte expressão na força em y (vertical): $0.5[\text{uN}] \cdot \cos(2 \cdot 3.14 \cdot \text{freq} \cdot t)$.



Aplica uma simulação transiente como no passo 1: $\text{range}(0, 1\text{E}-8, 2\text{E}-7)$ e faz *compute*.

Analisa o deslocamento do piezo e a tensão elétrica gerada ao longo dos períodos da onda (gráfico de superfície e vídeo).

Questão 4:

Qual o valor da tensão elétrica máxima gerada para a força de 0.5 uN (dica: nos resultados, ir a derived values e procurar valores máximos)? Se aplicar uma força sinusoidal de 1 uN, com a mesma frequência, qual é agora a tensão elétrica máxima? O que se conclui?