

Hp-adaptivne multifizikalne simulacije nanoelektromehanskih sistemov / Hp-adaptive multiphysics simulations of nanoelectromechanical systems

Oznaka in naziv projekta

J1-70054: Hp-adaptivne multifizikalne simulacije nanoelektromehanskih sistemov
J1-70054: Hp-adaptive multiphysics simulations of nanoelectromechanical systems

Logotipi ARIS in drugih sofinancerjev



Javna agencija za znanstvenoraziskovalno
in inovacijsko dejavnost Republike Slovenije

Projektna skupina

Vodja projekta: Magd Abdel Wahab

Sodelujoče raziskovalne organizacije: [Povezava na SICRIS](#)

Sestava projektne skupine: [Povezava na SICRIS](#)

Vsebinski opis projekta

Predlagani raziskovalni projekt se osredotoča na optimizacijo nanoelektromehanskih sistemov (NEMS). Le-ti izhajajo iz mikroelektromehanskih sistemov (MEMS), pomanjšanih na nanometrsko raven. NEMS so naprave kot so aktuatorji, nosilci, senzorji, črpalke, resonatorji in motorji, ki so sestavljene iz miniaturnih električnih in mehanskih aparatov. Zaradi majhne porabe energije, hitrega odzivnega časa in majhne mase dosegajo NEMS izjemno merilno ali kontrolno občutljivost in imajo zato velik potencial v številnih inženirskih in industrijskih aplikacijah. Načrtovanje in analiza vsakega elektromehanskega sistema se začeta z razumevanjem termoelektromehanskega obnašanja naprav in njegovih interakcij z zunanjimi silami. Ko se kritična dimenzija naprave skrči na nanometrsko raven, postanejo napake v materialu in površinski učinki materiala pomembni za pravilno delovanje naprave. Za ustrezno simulacijo naprave NEMS, vključno s poškodbami in zlomi na atomski ravni, ki lahko povzročajo neželeno obnašanje, je potreben večrazsežnostni multifizikalni pristop. Končni cilj predlaganega projekta je razviti zanesljivo, natančno in robustno numerično orodje, ki ga bo mogoče razširiti za zajem bistvenih pojavov na atomski ravni, vendar bo še vedno dovolj računsko učinkovito za praktične simulacije.

Primarno se projekt osredotoča na numerične simulacije NEMS in predlaga numerično brez mrežno metodologijo kot pristop k problemu. Cilj projekta je razviti hp-adaptivne multifizikalne simulacije, ki

bi omogočale preučevanje NEMS iz vidikov, kot so učinki heterogenosti materiala, napak, vmesnikov in temperature na delovanje naprave. Čeprav je predlagana metodologija splošna, bo razvita na primeru piezoelektričnih naprav NEMS v obliki kompozitnih plošč nanometrskih dimenzij. Poleg tega bo v projektu obravnavano povezovanje numeričnih simulacij z algoritemskim modeliranjem geometrije, prilagojenim na NEMS. Rezultat geometrijskega modeliranja so lahko zelo zapletene geometrije, ki v splošnem zahtevajo ročno pomoč uporabnika za pravilno mreženje v okviru diskretizacije. Postavljanje vozlišč, ki ga zahtevajo brez mrežni pristopi je v nasprotju z mreženjem mogoče popolnoma avtomatizirati tudi za kompleksne trodimenzionalne domene. Rezultati algoritmskega modeliranja se zato lahko povežejo s postavljanjem vozlišč in tako tvorijo vhodne podatke za numerični postopek.

Projekt združuje računalniško simulacijo in geometrijsko modeliranje s postopkom stohastične optimizacije v optimizacijsko okolje za simuliranje in optimizacijo NEMS. S takim okoljem bo mogoče optimizirati geometrijo in ostale lastnosti NEMS. Čeprav je postopek stohastične optimizacije računsko drag, lahko dobro izkoristi vzporednost in je skalabilen na sodobnih računalniških sistemih.

The proposed research project focuses on the optimization of Nanoelectromechanical systems (NEMS) devices, i.e., MEMS devices shrunk to nanometer scale. NEMS are nano-scale devices that consist of miniaturized electrical and mechanical apparatuses such as actuators, beams, sensors, pumps, resonators, and motors. Due to the low power consumption, fast response time, and low mass, NEMS achieve extreme measurement sensitivity and have thus vast potential in many engineering and industrial applications. The design and analysis of any electromechanical system start with understanding the devices' thermo-electro-mechanical behaviour and their interactions with external forces. When the critical dimension shrinks to the nanometer scale, as in NEMS, the material defects and surface effects significantly impact their performance. To adequately simulate a NEMS device, including damage and fracture at the atomic level that can lead to undesired behaviour, a multiscale multiphysics approach is required. The ultimate goal of the proposal is to develop a reliable, accurate and robust numerical tool that can be extended to capture essential phenomena on the atomic level; however, still computationally efficient enough for practical simulations.

First, the project focuses on the challenges of simulating their behaviour, the need for a unified numerical approach, and proposes a meshless numerical methodology to address the problem at hand. The project aims to develop an hp-adaptive multiphysics simulations, enabling the study of NEMS devices in areas such as the effects of material heterogeneity, defects, interfaces, and temperature on NEMS devices. Although general, the proposed methodology will be developed on a use case from piezoelectric NEMS devices implemented as composite plates in nano-scale dimensions.

Further, the project focuses on linking numerical simulations with algorithmic geometry modelling tailored to the NEMS. Geometric modelling can result in very complex geometries which in general require manual assistance to properly mesh. Node positioning required by meshless approaches is preferred to meshing, since it can be fully automated even for complex 3-dimensional domains. The results of algorithmic modelling can be coupled with node positioning to form input for the numerical simulation approach.

Osnovni podatki sofinanciranja so dostopni na spletni strani [SICRIS](#).

Bibliografske reference

