



# Simulación de cargas de los Polímeros

## ARTICULO

### Simulación de las cargas de los polímeros

Gonzalez Hernandez Fernando,<sup>a</sup> Satu Elisa Schaeffer<sup>b</sup>

Received 00th January 20xx,  
Accepted 00th January 20xx

DOI: 10.1039/x0xx00000x

www.rsc.org/

#### Resumen.

En esta nueva era con el avance tecnológico, se continua buscando e innovando nuevas formas de generar energías, que sean limpias y renovables, esto para potenciar el rendimiento de los dispositivos móviles que tienen un importante uso, ya sea en las comunicaciones, medicina, hogar, oficina, etc. todas éstos usando equipos que puedan ser sensibles e indispensables en nuestro haber diario, por lo tanto es de suma importancia encontrar nuevas fuentes de energía que nos permitan dejar de depender de electricidad provenientes de combustiones fósiles tales como el gas, petróleo y el carbón, por lo tanto los materiales nanoestructurados en las diferentes configuraciones se convierte en una alternativa, debido a que las partículas cuánticas nos permitirán obtener fenómenos y comportamientos específicos para la generación de energía, entre ellas se encuentra el Fenómeno Triboelectrico, la cual en el presente trabajo consistirá en mostrar la producción de cargas eléctricas por fricción de dos materiales, esto nos permitirá diseñar nuevos circuitos eléctricos a escala nanométrica para capturar energía de diferentes formas en donde con el estrés mecánico podrá producir cargas eléctricas.

Palabras clave: nanoestructura, teng, triboelectricidad, energía.

#### Abstract.

In this new era with technological progress, we continue to seek and innovate new ways of generating energy, which are clean and renewable, this to enhance the performance of mobile devices that have an important use, whether in communications, medicine, home, office, etc. In most cases these equipment's can be sensitive and indispensable in our daily life, therefore it is of the utmost importance to find new sources of energy that allow us to stop relying on electricity from fossil fuels such as the gas, oil and coal, therefore the nanostructured materials in the different configurations becomes an alternative, because the quantum particles will allow us to obtain specific phenomena and behaviors for the generation of energy, among them is the Triboelectric Phenomenon, which in the present work will consist in showing the production of loads electric friction of two materials, this will allow us to design new electrical circuits on a nanometric scale to capture energy in different ways where mechanical stress can produce electrical charges

<sup>a</sup> Address here.

<sup>b</sup> Address here.

<sup>c</sup> Address here.

† Footnotes relating to the title and/or authors should appear here.

Electronic Supplementary Information (ESI) available: [details of any supplementary information available should be included here]. See DOI: 10.1039/x0xx00000x

## Los polímeros y su conducción eléctrica

**Polímero con efecto aislante:** En la naturaleza en la conducción eléctrica interviene la oscilación o el impulso de las partículas con cargas eléctricas, los cuales normalmente se refieren como electrones, por lo tanto, su comportamiento se encuentra estrechamente relacionada con la capacidad estática (mantener electrones) a la cual se encuentre relacionada. Por lo tanto, en un material polimérico, los electrones de valencia se encuentran determinadas por los diferentes enlaces químicos los cuales tienden a limitar sus movimientos. Esta forma tan básica de visualizar el comportamiento de los polímeros nos permitirá comprender el porque la mayoría de los polímeros se consideran como materiales aislantes.

Este fenómeno se interpreta muy fácilmente, tomando como referencia la teoría de cuerdas, donde se expone el motivo teórico por el cual un material puede ser aislante, semiconductor o bien un conductor (figura1), en el cual se muestran que los niveles de conducción (niveles de Band-Gap) tienen una estrecha relación con la capacidad de conducir electrones entre un material y otro.

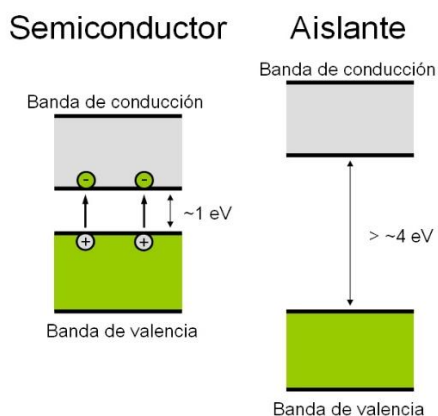


Figura 1: Bandas de conducción (Aislante)

Por lo tanto, en condiciones normales de temperatura, si se aplica un campo eléctrico sobre el material polimérico, la cantidad de energía que llega a recibir no se considera suficientemente fuerte para que los electrones puedan pasar desde la banda de valencia hasta la banda de conducción. Por lo tanto, los electrones que son inducidos al polímero no pueden desplazarse libremente sobre la superficie del material.

**Polímero con efecto Conductor:** En el caso de los polímeros conductores y semiconductores se mantiene presente una distribución alterna de enlaces de carbono simple y carbonos dobles, esto a lo largo de toda su cadena molecular; esta particularidad permite que exista un flujo de electrones sobre la superficie del carbono del polímero y lo convierta en un material conductor, aunque está claro que mientras el polímero se encuentre neutro, su transferencia electrónica estaría muy limitada, por lo que será necesario doparlo con agente oxidante.

Durante este proceso se presentarían reacciones redox entre las cadenas poliméricas y sus aceptores o bien, dadores de electrones. Por lo que desde el punto de vista teórico de las bandas de valencia. La oxidación o la reducción de las moléculas poliméricas causa la aparición de estados electrónicos que se encuentran dentro de la banda de conducción situados en la zona de Band gap, por lo que facilitaría el proceso de conducción de los electrones.

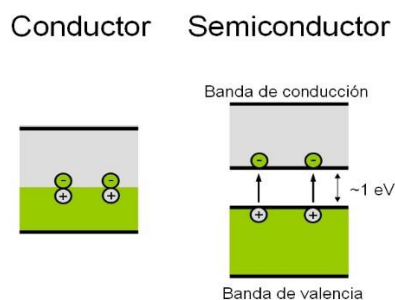


Figura 2. Bandas de conducción (Conductor)

## Modelo Informático del Polímero

La Simulación de una serie de polímeros es una de las técnicas computacionales ha tenido un gran impacto en la modelización molecular, ya que permite crear modelos químicos de materiales diversos, así como predecir sus propiedades ópticas, mecánicas, medica, etc.

Un modelo de simulación computacional nos puede proporcionar valiosa información sobre un material determinado, ya que podemos obtener información valiosa tales como la geometría mas estable, la energía, la distribución de cargas eléctricas, así como sus diferentes propiedades espectroscópicas (IR, Raman, NMR, UV-Vis, EPR). Asimismo, nos permite recabar datos termodinámicos y cinéticos (como calores de formación y de reacción, entropías, capacidades caloríficas y constantes de velocidad de una reacción química) o propiedades mecánicas (módulos elásticos, curvas de tensión-deformación, etc.)

Tomando en consideración de estos datos, procedemos a realizar una modelo computacional sobre el comportamiento de dos polímeros que tiene la capacidad de ceder y recibir electrones.

Por lo tanto el presente trabajo consiste una simulación la cual se comenzara con captura de los datos para determinar la cantidad de energía en electro-volt que puede tener una matriz polimérica, esto con el fin de encontrar cuanta carga puede generar la interacción de dos películas mediante un fenómeno llamado Efecto Triboelectrico.

El Fenómeno consiste en la fricción de dos matrices para producir una interacción de

electrones que permita que un material tenga la capacidad de alterar la cantidad de electrones que tiene en su superficie y dependiendo de la polaridad que contenga el material, éste quedara con una cantidad mayor de electrones y la otra con menor cantidad.

Por lo tanto los datos que colocaremos en la matriz polimérica se encuentran reflejado conforme a su posición y configuración electrónica tal como se muestra a continuación. (Tabla 1)

	V1	V2	V3	V4
1	1.564345e-01	3.090170e-01	4.539905e-01	5.877853e-01
2	3.090170e-01	5.877853e-01	8.090170e-01	9.510565e-01
3	4.539905e-01	8.090170e-01	9.876883e-01	9.510565e-01
4	5.877853e-01	9.510565e-01	9.510565e-01	5.877853e-01
5	7.071068e-01	1.000000e+00	7.071068e-01	1.224606e-16
6	8.090170e-01	9.510565e-01	3.090170e-01	-5.877853e-01
7	8.910065e-01	8.090170e-01	-1.564345e-01	-9.510565e-01
8	9.510565e-01	5.877853e-01	-5.877853e-01	-9.510565e-01
9	9.876883e-01	3.090170e-01	-8.910065e-01	-5.877853e-01
10	1.000000e+00	1.224606e-16	-1.000000e+00	-2.449213e-16
11	9.876883e-01	-3.090170e-01	-8.910065e-01	5.877853e-01
12	9.510565e-01	-5.877853e-01	-5.877853e-01	9.510565e-01
13	8.910065e-01	-8.090170e-01	-1.564345e-01	9.510565e-01
14	8.090170e-01	-9.510565e-01	3.090170e-01	5.877853e-01
15	7.071068e-01	-1.000000e+00	7.071068e-01	3.673819e-16
16	5.877853e-01	-9.510565e-01	9.510565e-01	-5.877853e-01
17	4.539905e-01	-8.090170e-01	9.876883e-01	-9.510565e-01
18	3.090170e-01	-5.877853e-01	8.090170e-01	-9.510565e-01
19	1.564345e-01	-3.090170e-01	4.539905e-01	-5.877853e-01
20	1.224606e-16	-2.449213e-16	3.673819e-16	-4.898425e-16

Tabla 1: Matriz de Datos

Una vez obtenido los datos de la matriz polimérica, procedemos a realizar la simulación sobre un espacio de tres dimensiones que permita observar que capas del materia se encuentra en contacto con el segundo polímero,

de esta manera podemos determinar la intensidad de contacto así como en que etapas se encuentra un mayor intercambio de electrones. Figura 3 y 4

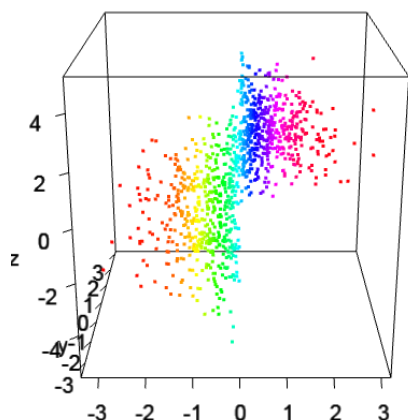


Figura 3. Modelo en tres dimensiones

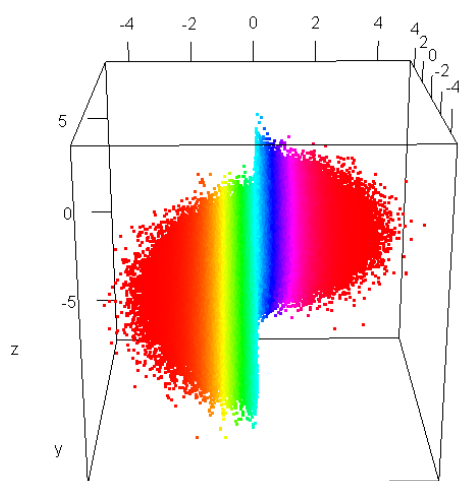


Figura 4. Modelo 3d interactuando

De esta manera observamos la interacción de las partículas poliméricas que interaccionan y generan el fenómeno de triboelectricidad, por lo tanto, cuando exista la fricción entre sus superficies, esto provocara una diferencia de potencial que se vera reflejada como un voltaje en función del tiempo de interacción. Figura 5

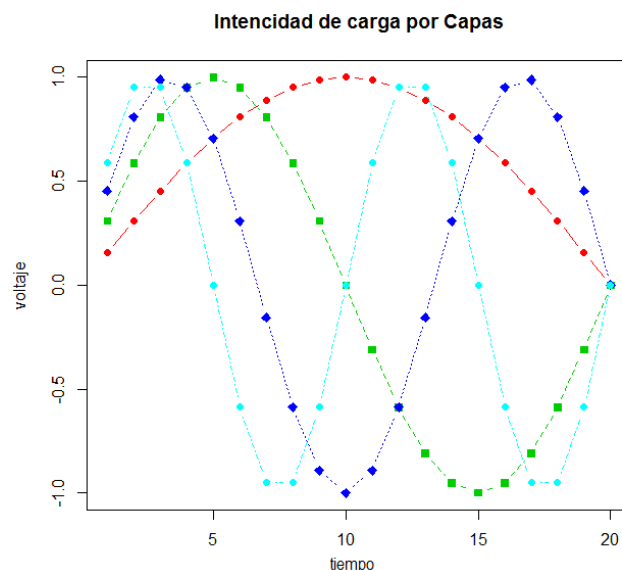


Figura 5. Intensidad de carga por capas en contacto

Como podemos ver en la Figura 5, la interacción de las capas divididas por colores nos muestra que las áreas de mayor contacto generan una mayor intensidad de carga por la fricción generada, por lo tanto, se puede considerar que a mayor superficie de contacto, mayor será la carga estática generada, así como su diferencia de potencial; por lo que es posible determinar en la simulación cuál área genera más miliamperios (mA) de corriente. Figura 6

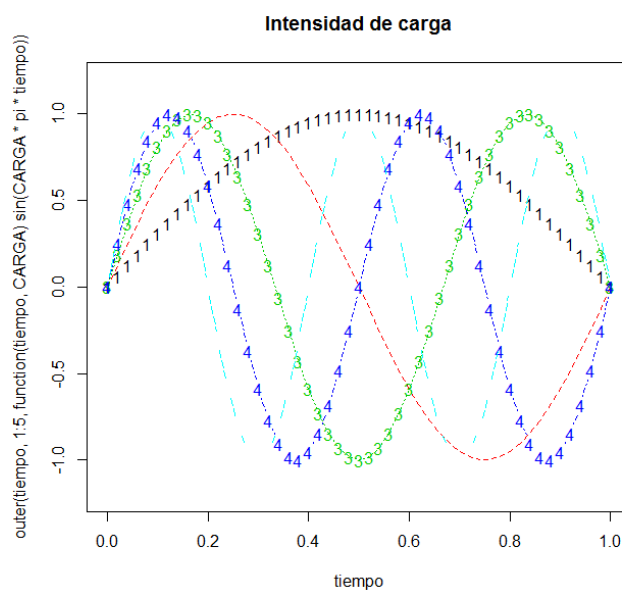


Figura 6. Intensidad de carga generada

## Conclusión

Basándonos en la información obtenida mediante la simulación computacional, podemos deducir que se puede adquirir pequeñas cargas de corriente por efecto del fenómeno de triboelectricidad, por lo tanto, es necesario realizar los experimento en físico para poder comprobar que existe esta posibilidad e incluso buscar la posibilidad de implementarlo, ya que las posibilidades serian muy benéficas.

## Notes and references

1. Armelin, E.; Iribarren, J.I.; Casanovas, J.; Liesa, F. & C. Alemán - Química e Industria 51, 13-20, (2004).
2. Raos, G.; Famulari, A. & Marcon, V. - Chem. Phys. Lett. 379, 364, (2003).
3. Alemán, C. & Julià, L. - J. Phys. Chem. 100, 1524, (1996).
4. Alemán, C.; Domingo, V.M.; Fajari, L. & Julià, L. - J. Org. Chem. 63, 1041, (1998).
14. Alemán, C.; Armelin, E.; Iribarren, J.I.; Liesa, F.; Laso, M. and Casanovas, J. - Synthetic Metals, 149, 151, (2005).
5. Satu Elisa Schaeffer <http://elisa.dyndns-web.com/teaching/comp/par/tutorial.html>
6. R. F.; Tian, Z. Q.; Lin Wang, Z. (2012). "Generador triboeléctrico flexible". Nano energía 1 (2): 328. Doi:10.1016/j.nanoen.2012.01.004.
7. Wang, L. Z. (2013). "Triboeléctrico Nanogenerators como nueva tecnología de energía para sistemas autoamplificados y sensores mecánicos y químicos activos". ACS Nano:: 131014091722005. Doi:10.1021/nn404614z.
8. Zhu, G.; Pan, C.; Guo, w el.; Chen, C. Y.; Zhou, Y.; Yu, R.; Wang, L. Z. (2012). "Pulso triboeléctrico-generador-conducido electrodeposición para Micropatterning". Nano Letters 12 (9): 4960-4965. Doi:10.1021/nl302560k. PMID22889363.
9. Wang, S.; Lin, L.; Wang, L. Z. (2012). "Nanoescala la conversión de energía Efecto triboeléctrico habilitado para accionar sosteniblemente electrónicos portátiles". Nano Letters 12 (12): 6339 – 6346. Doi:10.1021/nl303573d. PMID23130843.
10. Wang, S.; Lin, L.; Xie, Y.; Jing, Q.; Niu, S.; Wang, L. Z. (2013). "Nanogenerators corredizas-triboeléctrico basado en el mecanismo de carga-separación en el plano". Nano Letters 13 (5): 2226-2233. Doi:10.1021/nl400738p. PMID23581714.
11. Zhu, G.; Chen, J.; Liu, Y.; Bai, P.; Zhou, Y. S.; Jing, Q.; Pan, C.; Wang, L. Z. (2013). "Linear-rallar triboeléctrico generador basado en desplazamiento electrificación". Nano Letters 13 (5): 2282-2289. Doi:10.1021/nl4008985. PMID23577639.
12. Lin, L.; Wang, S.; Xie, Y.; Jing, Q.; Niu, S.; Hu, Y.; Wang, L. Z. (2013). "Segmentally estructurada Nanogenerator triboeléctrico disco para cosechar energía mecánica rotatoria". Nano Letters 13 (6): 2916-2923. Doi:10.1021/nl4013002. PMID23656350.
13. Yang, Y.; Zhou, Y. S.; Zhang, H.; Liu, Y.; Lee, S.; Wang, L. Z. (2013). "Un electrodo había basado triboeléctrico Nanogenerator como sistema de rastreo autoalimentado". Materiales avanzados:: n / a. Doi:10.1002/ADMA.201302453.