

ПРОЕКТУВАННЯ І МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СЕНСОРІВ

SENSORS DESIGN AND MATHEMATICAL MODELING

УДК 538.9

DOI: <https://doi.org/10.18524/1815-7459.2025.4.347717>

ТРИБОЕЛЕКТРИЧНИЙ НАНОГЕНЕРАТОР НА ОСНОВІ ЗІМ'ЯТИХ ЗОЛОТИХ ПЛІВОК: РОЗРАХУНКИ З ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ

В. М. Пресс, <https://orcid.org/0009-0008-6876-8370>

Р. М. Балабай, <https://orcid.org/0000-0002-2618-7796>

В. Б. Ніколенко, <https://orcid.org/0009-0003-1022-0189>

Криворізький державний педагогічний університет,
просп. Університетський, 54, м. Кривий Ріг, 50086, Україна
e-mail: vladimpress@gmail.com, balabai@i.ua, vv.nikolenko913@gmail.com

Анотація. У статті проведено чисельне моделювання просторових розподілів густини валентних електронів та кулонівського потенціалу у поперечному напрямку трибоелектричного контакту силікону із зім'ятими золотими плівками. Визначено локальні електричні заряди в околі атомів Au, задіяних у контакті, та проаналізовано їхню залежність від морфології поверхні й сили взаємодії. Показано, що зменшення зовнішнього стискального зусилля силікону, еквівалентне віддаленню силікону від пласкої плівки золота, призводить до вирівнювання зарядових станів контактуючих атомів і більш однорідного розподілу заряду на поверхні золотої плівки, при цьому різниця потенціалів на межі контакту зростає. Аналіз впливу ступеня зім'ятості структури свідчить, що збільшення нерівностей у золотих плівках зумовлює підвищення локальних зарядів на атомах Au та посилює різницю кулонівських потенціалів на трибоелектричному контакті.

Ключові слова: трибоелектричний наногенератор, зім'ята золота плівка, функціонал електронної густини, псевдопотенціал із перших принципів, розподіл густини валентних електронів, кулонівський потенціал

Вступ

Швидко розвивається портативна електроніка для стеження за здоров'ям, захисту навколишнього середовища та моніторингу інфраструктури. Забезпечення живлення таких пристроїв залишається викликом через обмежені можливості сучасних акумуляторів. Тому

створення легких та стійких джерел живлення досі є актуальною проблемою. Останнім часом трибоелектричні наногенератори (ТЕНГ), які базуються на явищах трибоелектризації та електростатичній індукції, продемонстрували просту, економічно ефективну та універсальну технологію збору енергії [1]. Вони є перспек-

тивними кандидатами для реалізації різних автономних систем. На сьогодні розроблено низьку стратегій для підвищення виходу ТЕНГ, зокрема модифікацію поверхні, оптимізацію складу матеріалів, інжекцію носіїв заряду, удосконалення архітектури тощо. Однак більшість із цих підходів мають фінансові та технологічні обмеження у практичному застосуванні. Нещодавно дослідники [2] продемонстрували простий та економічно ефективний метод досягнення більшої вихідної потужності завдяки використанню структур і пристроїв із малими розмірами на основі зім'ятих шарів графену. Проте максимальна потужність і термін служби цих пристроїв були обмежені через ненадійність графену. Подібний підхід було застосовано і в роботі [3], де використання золотих наночастинок дозволило покращити стабільність та електричні характеристики гнучкого наногенератора.

Дослідники [4-5] відзначають, що структурні вібрації є поширеним видом механічного руху, характерним для транспортних засобів, залізниць, будівель, мостів та промислових об'єктів, і становлять універсальне джерело для збору енергії. У літературі [6-7] продемонстровано різні типи ТЕНГ для збору енергії від структурних вібрацій та їхніх застосувань, зокрема вільно-фіксований ТЕНГ для збору енергії та моніторингу коліс потяга, багаторе-

жимний ТЕНГ для збору енергії на стиках вантажних вагонів і саможивленого моніторингу вантажних поїздів, а також саможивлений вібраційний ТЕНГ на основі електроспінених нанотрубчатих структур для контролю натягу залізничних скріплень [8]. Водночас енергія рухів людини також розглядається як важливе джерело для носимих і біомедичних застосувань збору енергії [9-11].

У подальших своїх дослідженнях автори [12] запропонували гнучкий трибоелектричний наногенератор на основі зім'ятих золотих (Au) плівок. Введення зім'ятої морфології в тонку плівку золота замість складного літографічного процесу дозволило суттєво підвищити ефективність. ТЕНГ на основі трибоелектричного контакту площею у $1,5 \text{ см}^2$, утвореного зім'ятою золотою плівкою з шаром полідиметилсилоксану, за стискального зусилля $\sim 20 \text{ Н}$ генерував вихідну напругу $100,2 \text{ В}$ і густину струму $9,14 \text{ мкА/см}^2$, що у 7 разів перевищувало напругу та у 6 разів – густину струму порівняно з ТЕНГ на основі плоских золотих плівок.

Для оцінки впливу ступеня зім'ятості у структурі золотих плівок та стискального зусилля (рис. 1) на вихідну потужність ТЕНГ нами проведено чисельні дослідження методами теорії функціоналу густини та першопринципного псевдопотенціалу, реалізованого за допомогою власного програмного коду [13].

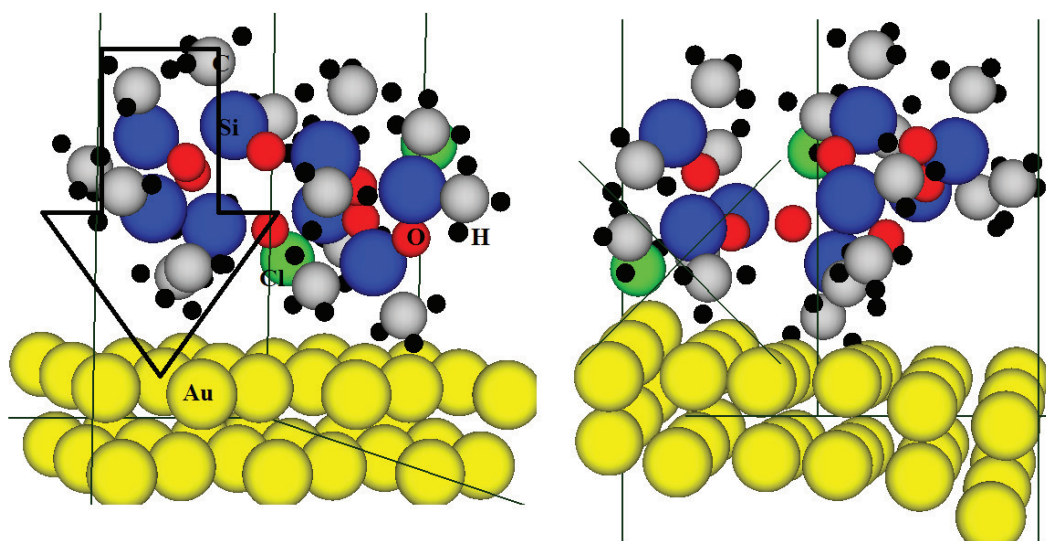


Рис. 1. Зовнішня сила забезпечує трибоелектричний контакт плоскої (зліва) та зім'ятої (справа) золотої плівки із шаром силікону (полідиметилсилоксан). На рисунку подано одиничні комірки суперґратки, які під час трансляції формують нескінченну двошарову плівку золота.

Обчислювальні методи і моделі

Усі розрахунки проведено з використанням авторського програмного коду КДПУ. Основні стани електронно-ядерних систем визначено шляхом самоузгодженого розв'язання одночастинкових рівнянь Кона-Шема:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\partial U}{\partial n(\vec{r})} \right\} \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}). \quad (1)$$

Під час розв'язання цих рівнянь застосовано формалізм псевдопотенціалу, відповідно до якого тверде тіло розглядається як система валентних електронів та іонних остовів. У псевдопотенціальному наближенні оператор псевдопотенціалу V_{PS} , що описує взаємодію валентних електронів з остовом, є малим, а відповідна псевдохвильова функція відзначається гладкістю. У роботі використано *ab initio* псевдопотенціал Бечелета-Хемена-Шльотера. Повний кристалічний потенціал формується як сума іонних псевдопотенціалів, що не перекриваються і пов'язані з іонами (ядро + остовні електрони), розташованими в положеннях $\vec{R}_S$, які періодично повторюються для кристалів ($\vec{p}$):

$$V_{crystal}(\vec{r}) \rightarrow V_{PS}(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \sum_S \bar{V}_S^{PS}(\vec{r} - \vec{p} - \vec{R}_S). \quad (2)$$

Для неперіодичних систем, таких як тонка плівка або кластер, проблему відсутності періодичності можна обійти за допомогою методу суперґратки. Наприклад, кластер періодично

повторюється в просторі, але відстань між кожним кластером і його періодичними зображеннями настільки велика, що їх взаємодія незначна. Повсюдна періодичність кристалічної (або штучної) ґратки створює періодичний потенціал і, відповідно до теореми Блоха, накладає таку саму періодичність на густину. Потенціал Кона-Шема періодичної системи демонструє таку ж періодичність, що й ґратка, а орбіталі Кона-Шема можна записати у формі Блоха:

$$\psi(\vec{r}) \equiv \psi_i(\vec{r}, \vec{k}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u_i(\vec{r}, \vec{k}), \quad (3)$$

де $\vec{k}$ є вектором із першої зони Бриллюена. Функція $u_i(\vec{r}, \vec{k})$ має періодичність у просторі. Індекс «i» проходить по всіх станах. Періодичні функції можуть бути розкладені за базисом плоских хвиль. Це обґрунтовує використання плоских хвиль як загального базисного набору для розкладення періодичної частини орбіталей. Оскільки плоскі хвилі утворюють повний і ортонормований набір функцій, їх можна використовувати для розкладення орбіталей відповідно до:

$$\Psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_0} \sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{G}} b_j(\vec{k} + \vec{G}) \exp(i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}) \quad (4)$$

де $\vec{G}$ є вектором в оберненому просторі, а Ω – об'ємом одиничних комірок, з яких складається періодичний кристал або штучна суперґратка під час відтворення неперіодичних об'єктів.

Рівняння (1) після перетворення Фур'є у обернений простір має вигляд:

$$\sum_{\vec{G}} \left[\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2 - \varepsilon_j \right\} \delta_{\vec{G}, \vec{G}'} + V_{KS}(\vec{k} + \vec{G}, \vec{k} + \vec{G}') \right] b_j(\vec{k} + \vec{G}) = 0, \quad (5)$$

де V_{KS} є потенціалом Кона-Шема:

$$V_{KS}(\vec{k} + \vec{G}, \vec{k} + \vec{G}') = V_{PS}(\vec{k} + \vec{G}, \vec{k} + \vec{G}') + V_H(\vec{G}' - \vec{G}) + V_{XC}(\vec{G}' - \vec{G}), \quad (6)$$

де V_{XC} є обмінно-кореляційним потенціалом. Для його розрахунку використано наближення Сіперлі-Олде, параметризоване Пердью та Зунге.

Основним значенням у формалізмі функціонала електронної густини є густина заряду. Вона оцінюється із самоузгодженого

розв'язку рівнянь (1), який необхідно виконати в усіх точках неприводимої частини зони Бриллюена:

$$\rho(\vec{G}) = \frac{2}{N_T} \sum_{\vec{k}} \sum_j \sum_{\alpha \in T} \sum_{\vec{G}'} b_j^*(\vec{k} + \vec{G}' + \alpha \vec{G}) b_j(\vec{k} + \vec{G}'), \quad (7)$$

де індекс j пробігає всі зайняті стани, $\vec{k}$ є вектором із першої зони Бриллюена, N_T є числом операторів α в точковій групі T атомного базису, а фактор 2 враховує спінове виродження.

Інтеграл по зоні Бриллюена суперґратки апроксимовано підсумовуванням по особливих точках зони. Задовільну точність можна досягати, замінюючи підсумовування за кінцевим числом спеціальних точок однією точкою із зони Бриллюена – Γ -точкою, що особливо актуально для штучних періодичних систем.

Кулонівський потенціал вздовж заданого напрямку розраховано за формулою, яка в оберненому просторі має вигляд:

$$V_h(\vec{G}) = \frac{4\pi e^2 \rho(\vec{G})}{G^2}, \quad (8)$$

де $\rho(\vec{G})$ – фур'є-компонента електронної густини (7).

Для оцінки перерозподілу заряду електронів між атомами розраховувався вираз в околі атома α в об'ємі V :

$$q_\alpha = Z_\alpha - \int_V n(r) d^3r. \quad (9)$$

Розрахунки проведено за таких умов: підсумовування по зоні Бриллюена змінено розрахунком в одній точці (Γ -точка). Кількість плоских хвиль у розкладі хвильової функції становила приблизно 20-25 хвиль, що приходяться на один атом базису. Атомний базис не оптимізовано.

Для вивчення трибоелектризації на контакті золото-силікон, зумовленої ступенем зім'ятості у структурі золотих плівок та зусиллям тиску, створено атомні модельні об'єкти, що відтворюють кристалографічний простір нескінченної плівки золота з двох атомних шарів (36 атомів у базисі), та фрагмента силікону (полідиметилсилоксан) (81 атом у базисі, див. рис. 1). Стискальне зусилля враховували у розрахунку шляхом збільшення відстані між поверхнею плівки та фрагментом полімеру від початкового нульового значення, коли координати Z відповідних атомів плівки та силікону збігалися (максимальне зусилля тиску). Деформацію у структурі золотих плівок моделювали шляхом застосування до координат атомів плівки та фрагмента силікону матричних операцій одночасного вигину відносно осей X та Y ; на початковому етапі плівка мала пласку форму (кут вигину 0°).

Результати та обговорення

Розраховано та обговорено просторові розподіли густини валентних електронів і кулонівського потенціалу в поперечному напрямку трибоелектричного контакту. Обчислено значення електричних зарядів у околі атомних ядер Au, задіяних у контакті.

Результати наведено в таблицях 1-2 та на рисунках 2-8.

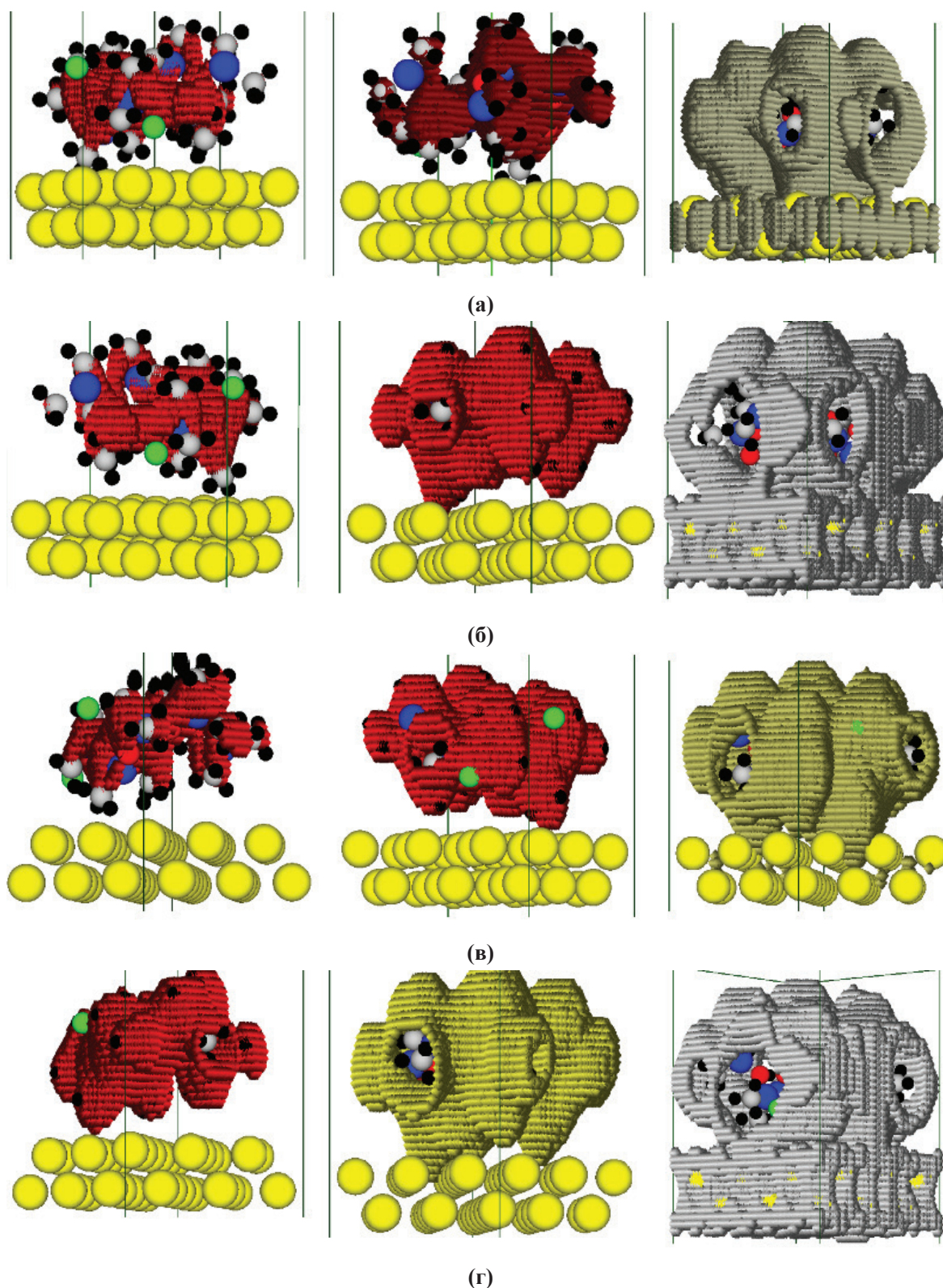


Рис. 2. Вид на просторові розподіли густини валентних електронів у межах одиничної комірки трибоелектричного контакту для різних ізозначень густини, починаючи від максимального та відстаней силікону від плівки (а – перший рядок розподілів за відстані 0 Å, другий, третій – за відстані 0.5 Å; б – за відстані – 1.0 Å; в – за відстані – 1.5 Å; г – за відстані – 2.0 Å.

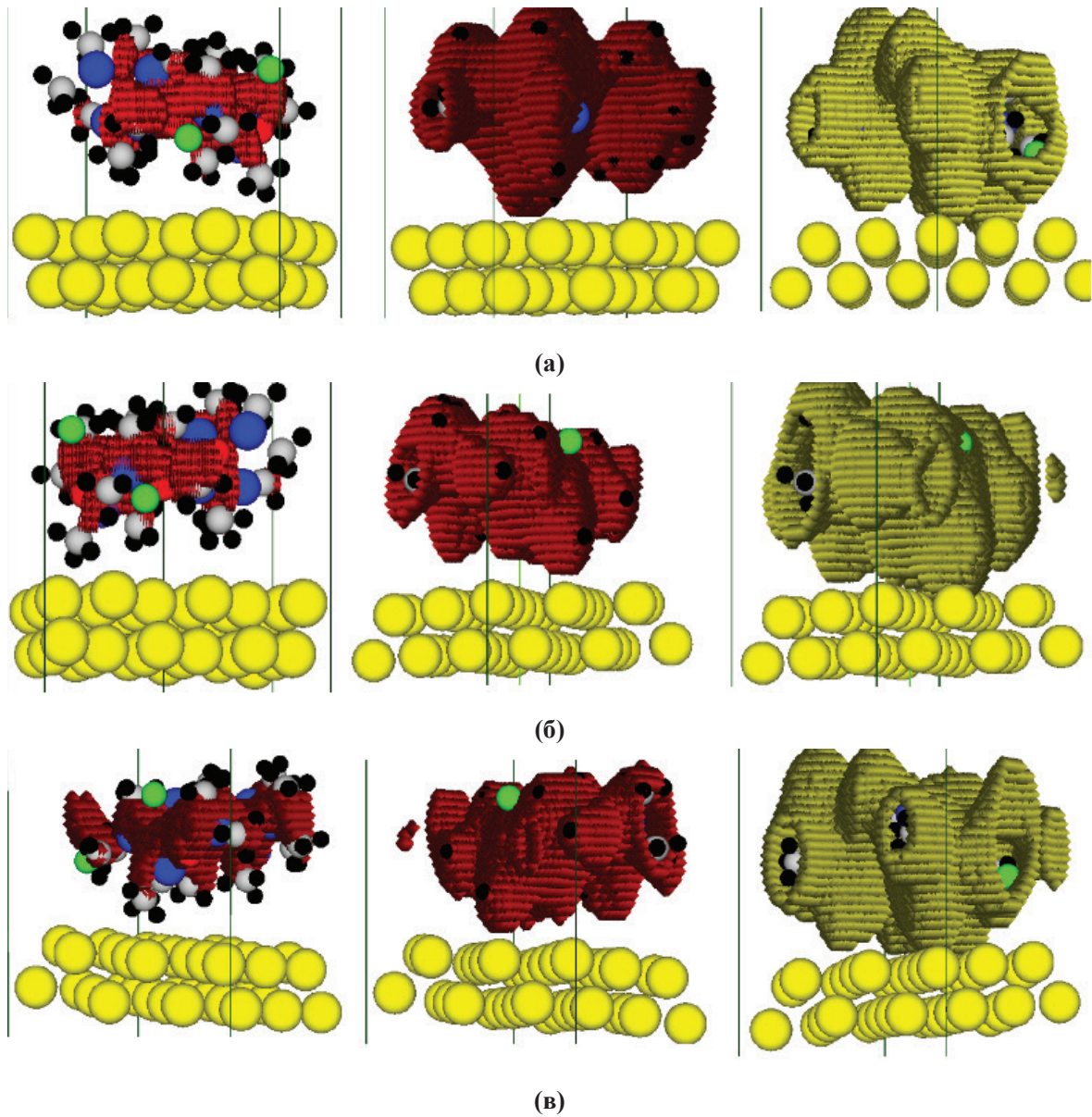


Рис. 3. Вид просторових розподілів густини валентних електронів у межах одиничної комірки трибоелектричного контакту для різних ізозначень густини, починаючи від максимального та ступеню зім'ятості у структурі золотих плівок (а – 0.1° ; б – 0.2° ; в – 0.4°). Відстань силікону від плівки золота $2.0 \text{ \AA}$.

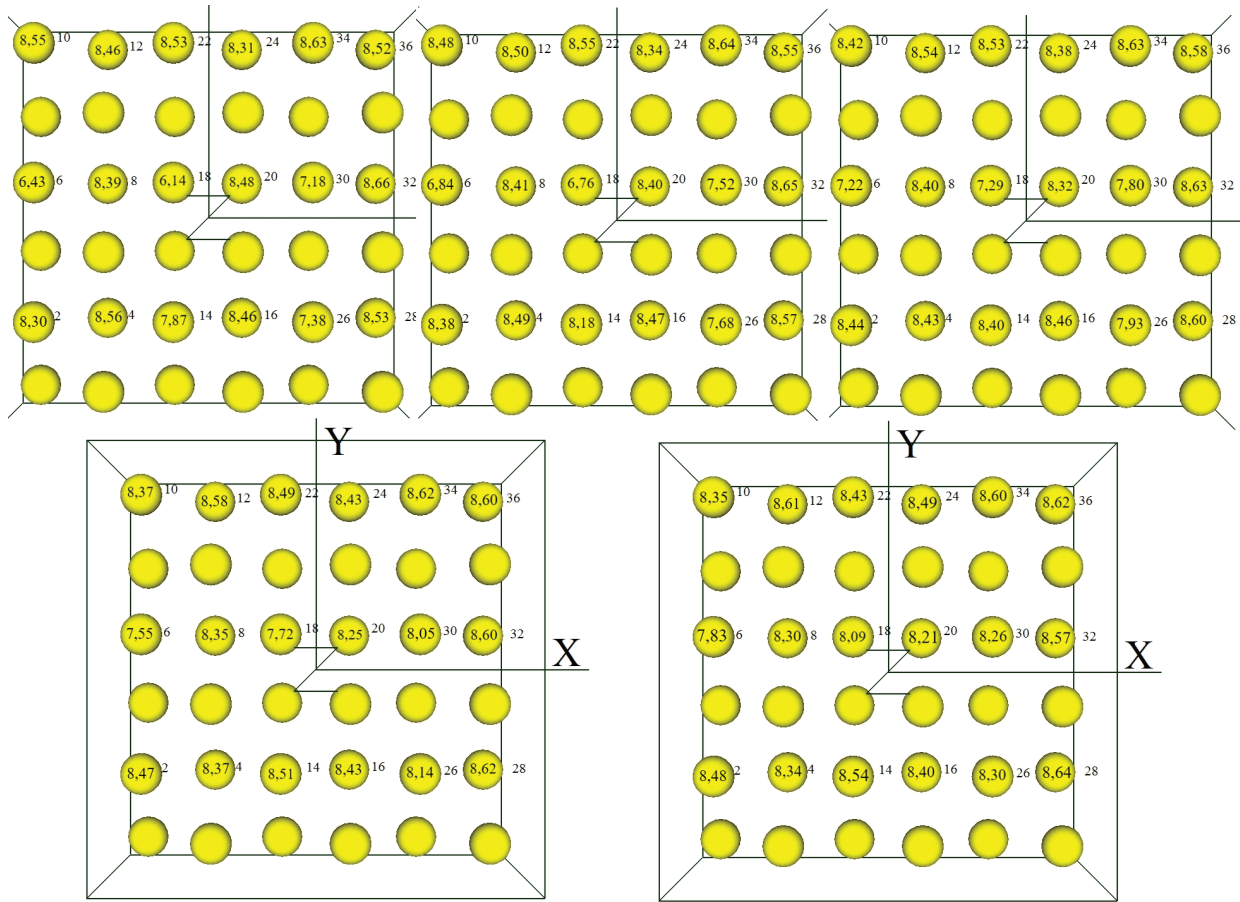


Рис 4. Зображено атомний шар пласкої плівки золота, що контактує із силіконом на різних відстанях (0 Å, 0.5 Å, 1.0 Å, 1.5 Å, 2.0 Å – зліва направо), у межах одиничної комірки з позначенням електричних зарядів (числа в середині кіл в одиницях заряду електрона, справа від кіл позначається номер атома в межах базису), розрахованих за формулою (8) в околі радіусом 1.323 Å. Відповідні дані наведено у Табл. 1.

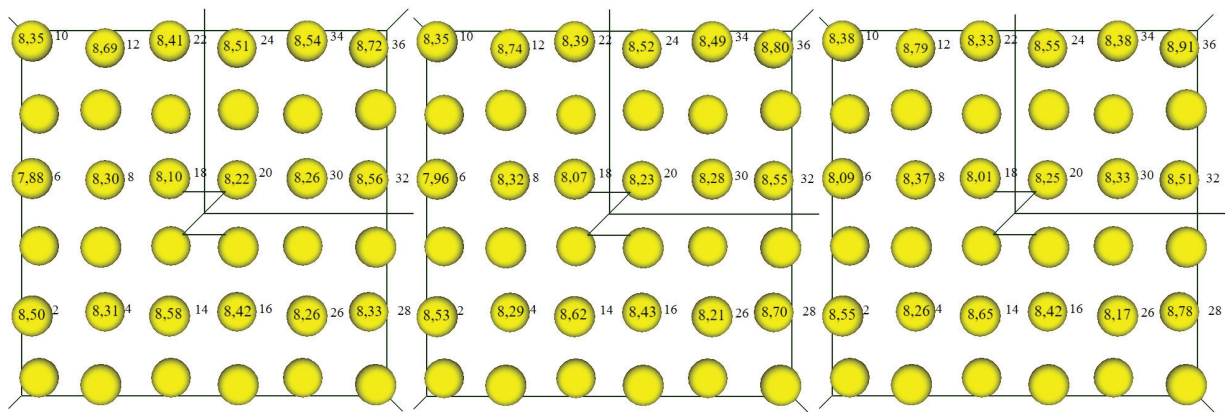


Рис 5. Зображено атомний шар пласкої плівки золота, що контактує із силіконом, за різних ступенів зім'ятості у структурі золотих плівок (а – 0.1°; б – 0.2°; в – 0.4° – зліва направо) на відстані 2.0 Å, у межах одиничної комірки з позначенням електричних зарядів (числа в середині кіл в одиницях заряду електрона, справа від кіл позначається номер атома в межах базису), розрахованих за формулою (8) в околі радіусом 1.323 Å. Відповідні дані наведено у Табл. 2.

Таблиця 1

Заряди в околі радіусом 1.323 Å атомів золота та параметри кулонівських потенціалів (див. рис.5) у пласкій плівці золота, що контактує із силіконом на різних відстанях.

№ атому	Заряд, ес					ΔV , ат. од.				
	0 Å	0.5Å	1.0Å	1.5Å	2.0 Å	0 Å	0.5Å	1.0Å	1.5Å	2.0 Å
2	8,307	8,383	8,441	8,473	8,489	42,746	45,439	48,219	51,070	54,093
4	8,561	8,499	8,436	8,379	8,340	46,293	48,824	51,475	54,186	57,085
6	6,439	6,848	7,226	7,557	7,831	44,547	47,189	49,959	52,817	55,855
8	8,393	8,419	8,402	8,354	8,303	49,371	51,957	54,653	57,455	60,471
10	8,551	8,485	8,424	8,376	8,359	40,715	43,380	46,131	48,956	51,957
12	8,467	8,505	8,546	8,584	8,617	44,184	46,889	49,685	52,529	55,544
14	7,877	8,189	8,408	8,511	8,547	49,009	51,545	54,244	57,201	60,352
16	8,460	8,479	8,469	8,439	8,407	49,804	52,585	55,439	58,372	61,506
18	6,142	6,765	7,293	7,727	8,090	51,068	53,704	56,434	59,280	62,363
20	8,489	8,402	8,326	8,259	8,210	50,666	53,242	55,922	58,759	61,928
22	8,536	8,555	8,533	8,490	8,437	47,007	49,767	52,619	55,534	58,614
24	8,314	8,343	8,384	8,432	8,492	46,597	49,137	51,802	54,500	57,368
26	7,385	7,683	7,936	8,142	8,307	47,861	50,545	53,346	56,238	59,305
28	8,537	8,570	8,603	8,623	8,640	43,995	46,666	49,443	52,302	55,290
30	7,184	7,520	7,804	8,052	8,263	48,393	50,918	53,547	56,256	59,172
32	8,665	8,658	8,637	8,606	8,572	42,734	45,437	48,225	51,100	54,178
34	8,637	8,641	8,634	8,620	8,602	43,059	45,590	48,239	50,952	53,838
36	8,523	8,553	8,583	8,606	8,628	38,908	41,625	44,420	47,297	50,356

Таблиця 2

Заряди в околі атомів золота радіусом 1.323 Å та параметри кулонівських потенціалів (див. рис. 5) у зім'ятій плівці золота, що контактує із силіконом на відстані 2.0 Å, за різних ступенів зім'ятості у структурі золотих плівок.

№, атому	Заряд, ес				ΔV , ат. од.			
	0.0°	0.1°	0.2°	0.4°	0.0°	0.1°	0.2°	0.4°
2	8,489	8,509	8,532	8,555	54,093	54,545	54,873	55,139
4	8,340	8,316	8,297	8,269	57,085	57,528	58,548	59,387
6	7,831	7,888	7,963	8,094	55,855	55,290	54,688	54,338
8	8,303	8,304	8,320	8,374	60,471	60,116	59,633	58,016
10	8,359	8,350	8,353	8,381	51,957	52,038	52,011	51,464
12	8,617	8,692	8,749	8,795	55,544	55,837	55,929	55,318
14	8,547	8,586	8,621	8,657	60,352	60,955	61,265	61,027
16	8,407	8,424	8,434	8,423	61,506	61,596	61,465	60,625
18	8,090	8,100	8,071	8,016	62,363	62,160	61,814	60,645
20	8,210	8,225	8,235	8,253	61,928	61,993	61,904	61,079
22	8,437	8,412	8,396	8,332	58,614	58,943	59,008	58,372
24	8,492	8,515	8,524	8,557	57,368	58,072	58,969	59,653
26	8,307	8,265	8,216	8,179	59,305	59,260	59,082	58,085
28	8,640	8,336	8,704	8,780	55,290	55,107	54,804	53,777
30	8,263	8,266	8,284	8,332	59,172	59,240	59,564	59,333
32	8,572	8,565	8,557	8,515	54,178	54,370	54,618	55,023
34	8,602	8,545	8,493	8,389	53,838	53,705	53,482	54,492
36	8,628	8,720	8,805	8,912	50,356	50,840	51,338	52,414

У табл. 1, 2 наведено характеристики кулонівських потенціалів, обчислених за формулою (9) у поперечних напрямках трибологічного контакту, що проходять через атоми

плівки золота, для яких обчислювалися заряди. Напрямки обчислення потенціалів та їхнє представлення наводяться на рис. 6.

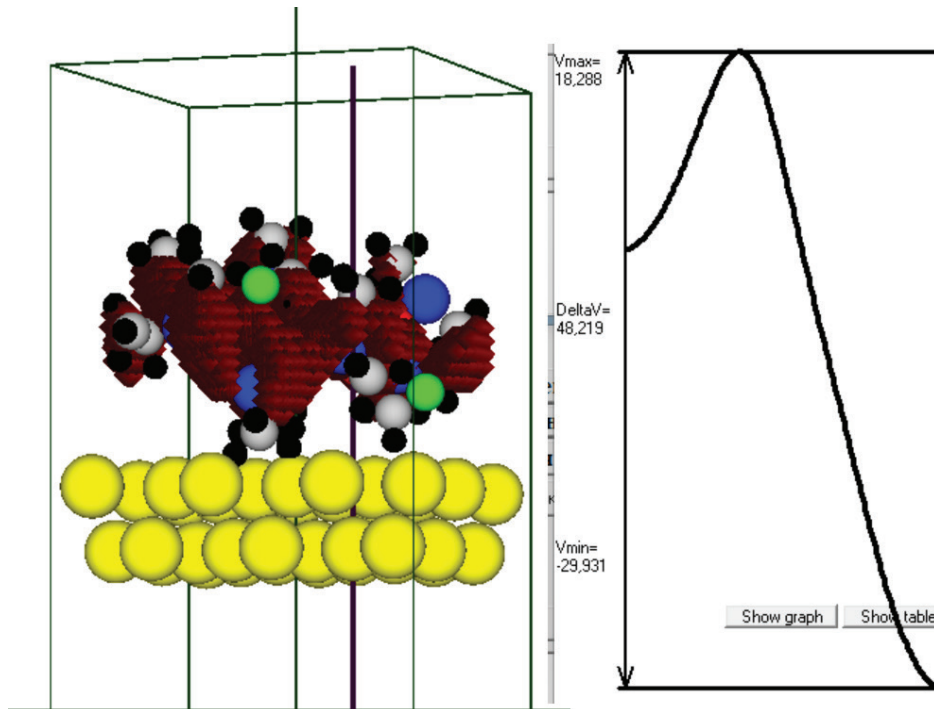


Рис. 6. Одинична комірка з атомним базисом, що відтворює нескінченну плівку золота та фрагменти силікону на її поверхні. Жирна лінія позначає поперечний напрям контакту, обраний для обчислення кулонівського потенціалу (зліва). Справа розподіл кулонівського потенціалу вздовж визначеного напрямку. Параметр кривої ΔV відображає різницю між максимальним та мінімальним значеннями в межах розподілу потенціалу (справа).

Аналіз отриманих результатів чисельних експериментів показує їхню узгодженість з експериментальними даними авторів [12]. Порівняння електричних зарядів на атомах золота показує, що послаблення зовнішнього стискального зусилля силікону до плівки (аналог віддалення силікону від плівки) призводить до вирівнювання зарядових станів атомів, що контактують (рівномірне зарядження поверхні плівки золота), а створювана різниця потенціалів на контакті збільшується. Збільшення ступеня зім'ятості структури золотих плівок та силікону підвищує заряди на атомах золота, що контактує, та підсилює різницю кулонівських потенціалів на контакті.

Отримані результати демонструють ключову роль морфології поверхні у формуванні електронних властивостей трибоелектричних

наногенераторів і підтверджують перспективність використання зім'ятих золотих плівок для підвищення ефективності пристроїв.

Висновки

Проведено чисельне дослідження впливу морфології золотих плівок та зовнішнього стискального зусилля на електронні характеристики трибоелектричного контакту золото-силікон. Розраховано просторові розподіли густини валентних електронів та кулонівського потенціалу, визначено локальні заряди в околі атомів Au і проаналізовано їхню залежність від деформації плівки та сили взаємодії з полімером.

Показано, що зменшення тиску сприяє вирівнюванню зарядових станів атомів золота та формуванню більш однорідного заряджен-

ня поверхні, що супроводжується зростанням різниці потенціалів на межі контакту.

Встановлено, що збільшення ступеня зім'ятості у структурі золотих плівок та силікону призводить до зростання локальних зарядів на атомах Au і підсилює кулонівську різницю потенціалів, що забезпечує підвищення трибоелектричного ефекту.

Отримані результати узгоджуються з експериментальними даними, що підкреслює їхню достовірність та підтверджує перспективність використання зім'ятих золотих плівок для підвищення ефективності трибоелектричних наногенераторів.

Список використаної літератури

- [1]. Z. Shi, Y. Zhang, J. Gu, B. Liu, H. Fu, H. Liang, J. Ji. Triboelectric nanogenerators: state of the art // *Sensors*, 24(13), 4298 (2024). DOI: <https://doi.org/10.3390/s24134298>
- [2]. H. Chen, Y. Xu, L. Bai, Y. Jiang, J. Zhang, C. Zhao, T. Li, H. Yu, G. Song, N. Zhang, Q. Gan. Crumpled graphene triboelectric nanogenerators: smaller devices with higher output performance // *Adv. Mater. Technol.*, 2(6), 1700044 (2017). DOI: <https://doi.org/10.1002/admt.201700044>
- [3]. S. Kumar, A. Singh, R. Kumar, S. Singh. Structural and electrical characterization of gold nanoparticles-based flexible triboelectric nanogenerator // *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* 34, 1-12 (2023). DOI: <https://doi.org/10.1007/s10854-022-09715-3>
- [4]. D. Choi, Y. Lee, Z.-H. Lin, S. Cho, M. Kim, C.K. Ao, S. Soh, C. Sohn, C.K. Jeong, J. Lee, et al. Recent advances in triboelectric nanogenerators: from technological progress to commercial applications // *ACS Nano*, 17(12), 11087–11219 (2023). DOI: <https://doi.org/10.1021/acsnano.2c12458>
- [5]. J. Chen, Z. L. Wang. Reviving vibration energy harvesting and self-powered sensing by a triboelectric nanogenerator // *Joule*, 1(3), 480-521 (2017). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.joule.2017.09.004>
- [6]. L. Jin, S. L. Zhang, S. Xu, H. Guo, W. Yang, Z. L. Wang. Free-fixed rotational triboelectric nanogenerator for self-powered real-time wheel monitoring // *Advanced Materials Technologies*, 6(3), 2000918 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1002/admt.202000918>
- [7]. Y. Du, Q. Tang, W. He, W. Liu, Z. Wang, H. Wu, G. Li, H. Guo, Z. Li, Y. Peng, et al. Harvesting ambient mechanical energy by multiple mode triboelectric nanogenerator with charge excitation for self-powered freight train monitoring // *Nano Energy*, 90, 106543 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2021.106543>
- [8]. Y. Meng, J. Yang, S. Liu, W. Xu, G. Chen, Z. Niu, M. Wang, T. Deng, Y. Qin, M. Han, X. Li. Nano-fiber based self-powered flexible vibration sensor for rail fasteners tightness safety detection // *Nano Energy*, 102, 107667 (2022). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2022.107667>
- [9]. Y. C. Lai, Y. C. Hsiao, H. M. Wu, Z. L. Wang. Waterproof fabric-based multifunctional triboelectric nanogenerator for universally harvesting energy from raindrops, wind, and human motions and as self-powered sensors // *Advanced Science*, 6(5), 1801883 (2019). DOI: <https://doi.org/10.1002/adv.201801883>
- [10]. L. Wang, W. Liu, Z. Yan, F. Wang, X. Wang. Stretchable and shape-adaptable triboelectric nanogenerator based on biocompatible liquid electrolyte for biomechanical energy harvesting and wearable human-machine interaction // *Advanced Functional Materials*, 31(7), 2007221 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1002/adfm.202007221>
- [11]. H. Wang, M. Han, Y. Song, H. Zhang. Design, manufacturing and applications of wearable triboelectric nanogenerators // *Nano Energy*, 81, 105627 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2020.105627>
- [12]. H. Chen, L. Bai, T. Li, C. Zhao, J. Zhang, N. Zhang, G. Song, Q. Gan, Y. Xu. Wearable and robust triboelectric nanogenerator based on crumpled gold films // *Nano Energy*, 46, pp. 73-80 (2018). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2018.01.032>
- [13]. V. M. Press, R. M. Balabai. Tribovoltaic effect at the water-silicon interface // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 769(7-8), pp. 738-745 (2025). DOI: <https://doi.org/10.1080/15421406.2025.2504038>

Стаття надійшла до редакції 12.10.2025 р.

UDC 538.9

DOI: <https://doi.org/10.18524/1815-7459.2025.4.347717>

TRIBOELECTRIC NANOGENERATOR BASED ON CRUMPLED GOLD FILMS: FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS

V. M. Press, R. M. Balabai, V. B. Nikolenko

Kyryvyi Rih State Pedagogical University,
54 Universytetskyi Ave, Kyryvyi Rih, 50086, Ukraine
e-mail: vladimpress@gmail.com, balabai@i.ua, vv.nikolenko913@gmail.com

Abstract. The article presents a numerical simulation of the spatial distributions of the valence electron density and the Coulomb potential in the transverse direction of the triboelectric contact of silicon with crumpled gold films. The local electric charges in the vicinity of the Au atoms involved in the contact are determined, and their dependence on the surface morphology and interaction force is analyzed. It is shown that a decrease in the external compressive force of silicon, equivalent to the distance of silicon from a flat gold film, leads to the alignment of the charge states of the contacting atoms and a more uniform charge distribution on the surface of the gold film, while the potential difference at the contact boundary increases. Analysis of the influence of the degree of crumpling of the structure shows that an increase in the irregularities in the gold films leads to an increase in the local charges on the Au atoms and increases the difference in the Coulomb potentials at the triboelectric contact.

Keywords: triboelectric nanogenerator, crumpled gold film, electron density functional, first-principles pseudopotential, valence electron density distribution, Coulomb potential