

## **Diseño y simulación de un nanogenerador alimentado por energía mecánica**

María Magdalena Hernández Ramos<sup>1</sup>, Carlos Ponce Corral<sup>1</sup>, Luz Angélica García Villalba<sup>1</sup>, Carlos Felipe Ramírez Espinoza<sup>1</sup>, Martha Victoria González Demoss<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería Industrial y Manufactura, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez.

### **Resumen**

En la actualidad los dispositivos móviles son cada vez más recurrentes en las personas, por tal motivo es necesario investigar tecnologías que los hagan más eficientes, algunas formas de mejorarlos pueden ser la auto alimentación de dichos dispositivos por medio de la nano-tecnologías y avances en el uso de materiales piezoeléctricos. Dicha autoalimentación es llevada por un nanogenerador el cual además de eliminar la batería externa de un circuito ayudará a tener carga indefinida y en un futuro no muy lejano con un arreglo de estos se podrá generar el suficiente voltaje para alimentar un dispositivo móvil tal como un celular, una computadora portátil, una agenda electrónica. Entre el 2001 hasta el 2011 se han tenido muchos avances en el desarrollo de los nanogeneradores, el objetivo de esta investigación es el diseñar una metodología para el desarrollo de un nanogenerador que sea alimentado por energía mecánica y aprovechando de sus propiedades piezoeléctricas poder generar un voltaje y lograr simularlo en un software llamado COMSOL. Se abordará sobre el desarrollo de la nanotecnología, su definición, sus orígenes para después introducirnos en los nanogeneradores sus características entre otras cosas, en seguida se contemplará una revisión bibliográfica de dichos nanogeneradores. En la metodología se revisan varias fórmulas para entender las teorías fundamentales de la electroestática, la densidad de corriente, la continuidad para poder describir el comportamiento estático y dinámico de los nanocables, Se divisará tres tipos de uniones más comunes en el desarrollo de los nanocables: tipo p-n piezoeléctricas, metal-semiconductor y de tipo metal-Wurtzite. En la última sección se avistará la metodología aplicada a una de las uniones que será la de tipo p-n los resultados estarán divididos en dos pruebas con diferentes valores de fuerzas mecánicas aplicadas a el nanocable y se analizarán los resultados obtenidos.

**Palabras Clave:** Tecnologías, Nanogeneradores, Piezoeléctricos, Nanotecnología.

### **Introducción**

Según la revista Spectrum del Instituto de Ingenieros en Electricidad y Electrónica (IEEE por sus siglas en inglés) en [1], los smartphones encabezaron la lista como la mejor tecnología de la década, por lo tanto, es importante buscar perfeccionar dicha tecnología, sin embargo ¿Cuál es el problema que comparten dichos dispositivos? ¿Cómo se podrían mejorar? Al momento de analizar estos dispositivos se encontraron factores que podrían ser problemas tales como: tamaño, color, tipo de teclado, diseño. Pero todos estos factores mencionados son mayormente estéticos y varían mucho según el usuario y sus necesidades. En la búsqueda de un problema compartido se encuentra la insuficiencia de las baterías para mantener con carga a los dispositivos durante un periodo largo de tiempo todo esto debido a que dichos dispositivos

realizan muchas funciones las cuales a su vez consumen mucha energía. Una forma de mejorar estos dispositivos es desarrollada por medio de la nanotecnología. En la actualidad se desarrollan nanosistemas los cuales son alimentados por nanogeneradores y a su vez los nanogeneradores se alimentan de la energía que hay en el medio ambiente ya sea mecánica, solar. En la presente investigación se llevará a cabo el diseño y simulación de un nanogenerador el cual será alimentado por energía mecánica. La aplicación para un nanogenerador no sólo es de nanoescala, se pueden llegar a tener arreglos de este nanosistema y en un futuro generar una ayuda a la batería de los dispositivos móviles, logrando así que esta no sea la única en suministrar energía eléctrica a estos artefactos o en el mejor de los casos hasta lograrla sustituir.

## Metodología

Los nanogeneradores actúan con el mismo concepto de un transistor para generar una diferencia de potencial, el doctor. Z. L. Wang con su equipo de trabajo crearon un nuevo campo de estudio el cual combina las propiedades piezoeléctricas de los nanocomponentes con las electrónicas para generar la piezotrónica, este nuevo campo está validado por la NASA y es la base del estudio del comportamiento de los nanogeneradores [13]. Debido a que un transistor piezotrónico implica un semiconductor piezoeléctrico, son obligatorias las ecuaciones y teorías fundamentales que se rigen para los semiconductores y materiales piezoeléctricos. Aparte las ecuaciones básicas que describen la piezotrónica son electrostáticas, de densidad de corriente, y de continuidad, que logran describir el comportamiento estático y dinámico de los

portadores de carga en los semiconductores, así como las ecuaciones piezoeléctricas, que describen el comportamiento de los materiales piezoeléctricos bajo una tensión dinámica [14,15]. La ecuación de Poisson es una ecuación básica que describe el comportamiento electrostático de las cargas.

$$\nabla^2 \Psi_i = -\frac{p(\vec{r})}{\epsilon_s} \quad (1)$$

Dónde:  $n\Psi_i$  es la distribución del potencial eléctrico,  $p(\vec{r})$  es la densidad de distribución de carga.  $\epsilon_s$  es la permeabilidad del material. Las ecuaciones de densidad de corriente se relacionan con los campos locales, densidades de carga, y las corrientes locales.

$$J_n = qu_n nE + qD_n \nabla_n$$

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería Industrial y Manufactura, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez.

$$J_p = qu_p p \mathbf{E} + qD_p \nabla p \quad (2)$$

$$J_{cond} = J_n + J_p$$

Dónde:  $J_n$  y  $J_p$  son las densidades de corriente del hueco y del electrón,  $q$  es el valor absoluto de la carga del electrón,  $u_n$  y  $u_p$  son las movilidades de los huecos,  $n$  y  $p$  son las concentraciones libres de electrones y huecos,  $D_n$  y  $D_p$  son los coeficientes de los electrones y los huecos,  $\mathbf{E}$  es el campo eléctrico,  $J_{cond}$  es la densidad total de corriente. La conducción del transporte de las cargas está dada por un campo que es descrito con las ecuaciones siguientes.

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - U_n + \frac{1}{q} \nabla J_n \quad (3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - U_p + \frac{1}{q} \nabla J_p$$

Donde:  $G_n - G_p$  son las tasas de generación de los electrones y huecos,  $U_n - G_n$  son las tasas de recombinación. El comportamiento del material piezoeléctrico se describe a través de un vector de polarización llamado vector  $P$ . Para una pequeña tensión uniforme  $S_{jk}$  [16] la polarización del vector  $P$  es obtenido en términos de la tensión  $S$  como:

$$(P)_i = (e)_{ijk} (S)_{jk} \quad (4)$$

Donde:  $(e)_{ijk}$  es la tensión piezoeléctrica de tercer orden,  $P$  es el vector de polarización,  $(S)_{jk}$  es una tensión uniforme. Y de acuerdo con la teoría convencional de la piezoelectricidad y elasticidad se construyeron las siguientes ecuaciones [15,17]

$$\sigma = c_e S - e^T E \quad (5)$$

$$D = eS + kE$$

Dónde:  $\sigma$  es el tensor del estrés,  $\mathbf{E}$  es el campo eléctrico,  $\mathbf{D}$  es el desplazamiento eléctrico,  $c_e$  es el tensor de la elasticidad,  $k$  es el tensor dieléctrico.

### Solución Analítica para casos de 1D simplificados

En el modelado de dispositivos prácticos, las ecuaciones básicas presentadas pueden ser resueltas bajo límites específicos. Para ilustrar solamente la física básica se considera un dispositivo piezotrónico 1D con el ideal de contactos óhmicos en la fuente y el drenaje. Esto significa que las condiciones de contorno de Dirichlet de la concentración de portadores y potencial eléctrico se aplicarán en los límites del dispositivo. La tensión se aplica normal a la interfaz de  $M - S$  sin la introducción de la tensión de corte [14].

### Uniones Piezoeléctricas p-n

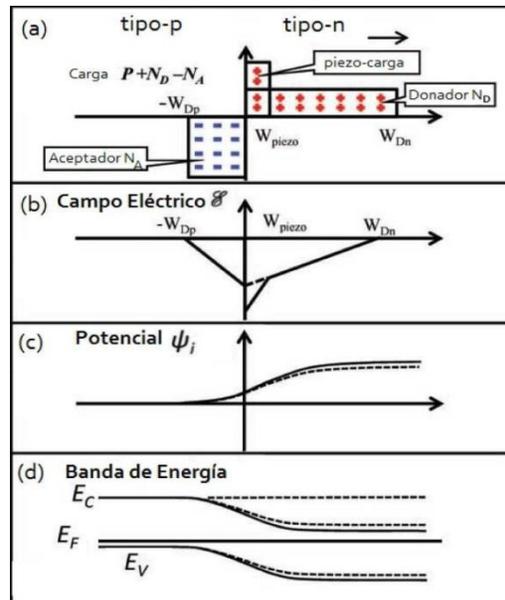
Las uniones  $p - n$  son los pilares fundamentales en los modernos dispositivos electrónicos, la teoría de Shockley [14] ofrece las características básicas de la corriente-voltaje (V-I) en las uniones  $p - n$ , simplificando se supone que la región de tipo  $p$  no es piezoeléctrica y la de tipo  $n$  es piezoeléctrica. Teniendo en cuenta que  $ZnO$  crece a lo largo de la dirección del  $eje - c$ , las cargas positivas son creadas en el lado del tipo  $n$  mediante la aplicación de un esfuerzo de compresión a lo largo del  $eje - c$ . Desde la teoría piezoeléctrica, las cargas piezoeléctricas son consideradas como cargas superficiales en el material, porque la región de distribución de las cargas es mucho más pequeña que el volumen de la mayor parte del cristal. Por lo que es razonable suponer que las cargas piezoeléctricas se distribuyen en una superficie. Sin embargo, esta hipótesis no es válida para nanodispositivos o incluso microdispositivos por tal motivo se asume que las cargas piezoeléctricas son distribuidas en la interface de las uniones  $p - n$  dentro de un ancho de  $W_{piezo}$  como se muestra en la figura 1(a).

En la figura 1(a) se muestran las cargas piezoeléctricas, aceptador y distribución de la carga de los donantes. En la figura 1(b) se muestra el campo eléctrico. En la figura 1(c) se muestra la distribución potencial, y en la figura 1(d) las líneas discontinuas muestran el campo eléctrico, el potencial, y la banda de energía en

ausencia de cargas piezoeléctricas, y las líneas continuas indican los casos en que un piezopotencial está presente en el lado de tipo  $n$ . Se utilizó un modelo de unión abrupta o también llamado modelo para diodo normal recordando que este tipo de diodos son poco dopados por lo tanto el resultado es el efecto avalancha que provoca una corriente grande de electrones, en él que la concentración de impurezas en las uniones  $p-n$  cambia

bruscamente de aceptador  $N_A$  a donador  $N_D$  también es visto en la figura 1(a). Los electrones y los huecos en la unión de la región forman una zona de agotamiento de carga. Después de haber definido las ecuaciones básicas se calculó el campo de distribución eléctrica dentro de las uniones  $p-n$  por medio de la ecuación 3.1 que puede ser reducido a:

$$-\frac{d^2\psi_i}{dx^2} = \frac{dE}{dx} = \frac{p(x)}{\epsilon_s} = \frac{1}{\epsilon_s} [qN_D(x) - qn(x) - qN_A(x) + qp(x) + qp_{piezo}(x)] \quad (6)$$



**Figura 1.** Uniones de tipo p-n con la presencia de cargas piezoeléctricas con un voltaje aplicado de  $V = 0$  (equilibrio térmico).

Donde:  $N_D(x)$  es la concentración del donador,  $N_A(x)$  es la concentración del aceptador,  $p_{piezo}(x)$  es la densidad de carga de polarización,  $W_{Dp}$  y  $W_{Dn}$  son definidas como los anchos de agotamiento de las capas del lado

$p$  y del lado  $n$  respectivamente. El campo eléctrico se obtiene entonces mediante la integración de las ecuaciones anteriores como se muestra en la figura 1 (b). Lo cual es mostrado en las siguientes expresiones.

$$E(x) = -\frac{qN_A(x + W_{Dp})}{\epsilon_s}, \text{ para } -W_{Dp} \leq x \leq 0$$

$$E(x) = -\frac{q[N_D(W_{Dn} - x) + p_{piezo}(W_{piezo} - x)]}{\epsilon_s}, \text{ para } 0 \leq x \leq W_{piezo}$$

$$E(x) = -\frac{qN_D}{\epsilon_s}(W_{Dn} - x), \text{ para } -W_{piezo} \leq x \leq W_{Dn} \quad (7)$$

El máximo campo es  $E_m$  este existe en  $x = 0$  es obtenido por:

$$|E_m| = \frac{q(N_D W_{Dn} + p_{piezo} W_{piezo})}{\epsilon_s} \quad (8)$$

El potencial de distribución es  $\Psi_i(x)$  visto en la figura 1(c),

$$\Psi_i(x) = \frac{qN_A(x + W_{Dp})^2}{2\epsilon_s}, \text{ para } -W_{Dp} \leq x \leq 0$$

$$\Psi_i(x) = \Psi_i(0) + \frac{q}{\epsilon_s} \left[ N_D \left( W_{Dn} - \frac{x}{2} \right) x + p_{piezo} \left( W_{piezo} - \frac{x}{2} \right) x \right] \text{ para } 0 \leq x \leq W_{piezo}$$

$$\Psi_i(x) = \Psi_i(W_{piezo}) - \frac{qN_D}{\epsilon_s} \left( W_{Dn} - \frac{W_{piezo}}{2} \right) W_{piezo} + \frac{qN_D}{\epsilon_s} \left( W_{Dn} - \frac{x}{2} \right) x, \text{ para } W_{piezo} \leq x \leq W_{Dn} \quad (9)$$

Por consecuencia el potencial  $\Psi_{bi}$  esta incorporado de la siguiente manera:

$$\Psi_{bi} = \frac{q}{2\epsilon_s} (N_A W_{Dp}^2 + p_{piezo} W_{piezo}^2 + N_D W_{Dn}^2) \quad (10)$$

La ecuación 10 presenta un cambio incorporado en el potencial como resultado de las cargas piezoeléctricas debido al esfuerzo de compresión y tensión, que definen el signo de las cargas piezoeléctricas locales. Es evidente que el piezopotencial puede cambiar la banda de energía de los semiconductores en relación al nivel de Fermi. Después se analizó las características piezoeléctricas de corriente-voltaje en las uniones  $p-n$  por medio de la teoría de Shockley, el modelo parte de un ideal que se basa en cuatro supuestos: Una ensambladura piezoeléctrica de tipo  $p-n$  tiene una capa de agotamiento precipitada. Los semiconductores piezoeléctricos son no degenerativos de modo que la aproximación de Boltzmann se aplique, La concentración de portadores minoritarios inyectados es menor que la concentración de portadores mayoritarios por lo que la hipótesis de baja inyección es válida, Ninguna corriente de la combinación de generación existe dentro de la capa de agotamiento y las corrientes de electrones y

huecos son constantes a lo largo de la unión  $p-n$ . Si la anchura de las piezocargas es mucho menos que la anchura de la zona del agotamiento ( $W_{piezo} \ll W_{Dn}$ ), el efecto de las cargas piezoeléctricas sobre la banda de energía de  $ZnO$  se considera como perturbación. La densidad de corriente total es obtenida resolviendo la ecuación 2.

$$J = J_P + J_n = J_0 \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (11)$$

Dónde: la corriente de saturación  $J_0 = \frac{qD_p p_{np}}{L_p} + \frac{qD_n n_{po}}{L_n}$ ,  $p_{no}$  es la concentración de equilibrio térmico en el hueco del semiconductor de tipo  $n$ .  $n_{po}$  es la concentración de equilibrio térmico en el electrón del semiconductor de tipo  $p$ .  $L_p$  y  $L_n$  son las longitudes de difusión de los electrones y de los huecos respectivamente. La carga intrínseca destinada en ni esta obtenida por la siguiente ecuación:

$$n_i = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_i}{kT}\right) \quad (12)$$

Donde:  $N_c$  es la densidad efectiva de estados en la banda de conducción.  $E_i$  es el nivel de Fermi intrínseco.  $E_c$  es el borde inferior de la banda de conducción. Para un caso sencillo el lado de tipo n tiene una unión abrupta con la concentración de los donantes  $N_D$  y localmente  $P_{n0} \gg n_{p0}$  entonces  $J_0 \approx \frac{qD_p p_{np}}{L_p}$  y  $P_{n0} = n_i \exp\left(-\frac{E_i - E_f}{kT}\right)$ , por lo tanto la densidad de corriente total está dada por la siguiente ecuación:

$$J = J_0 \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] = \frac{qD_p n_i}{L_p} \exp\left(\frac{E_i - E_f}{kT}\right) \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (13)$$

Si  $J_{c0}$  y  $E_{F0}$  se definen como la densidad de saturación actual y el nivel de Fermi en la ausencia de un piezopotencial entonces:

$$J_{c0} = \frac{qD_p n_i}{L_p} \exp\left(\frac{E_i - E_{F0}}{kT}\right) \quad (14)$$

Según la ecuación 9 y la ecuación 10, el nivel de Fermi  $x$  en presencia de un piezopotencial está dado por:

$$E_F = E_{F0} - \frac{q^2 p_{piezo} W_{piezo}^2}{2\epsilon_s} \quad (15)$$

Substituyendo la ecuación 14 y 15 en la ecuación 13, obtenemos las características de corriente-voltaje de la unión piezoeléctrica de  $p - n$  dada en la siguiente ecuación:

$$J = J_{c0} \exp\left(\frac{q^2 p_{piezo} W_{piezo}^2}{2\epsilon_s kT}\right) \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (16)$$

Esto significa que la corriente transportada a través de la unión  $p - n$  es una función exponencial de la piezocargas locales cuyo signo depende de la tensión. Por lo tanto, la corriente a ser transportada puede ser efectivamente controlada para determinar la magnitud y el signo de la tensión. Este es el mecanismo del transistor piezotrónico basado en uniones  $p - n$ .

### Contacto metal-semiconductor

El contacto  $M - S$  es un componente importante en dispositivos eléctricos. El

contacto ya antes mencionado se puede simplificar en términos de distribución de carga según las indicaciones de la figura 1 Con la presencia de la barrera de Schottky. El lado del semiconductor se supone que es de tipo n y los estados de superficie y otras anomalías son ignorados por simplicidad. Bajo tensión, las piezocargas creadas en la interfaz no sólo cambian la altura de la barrera de Schottky, sino también modifican su anchura. Este es diferente del método de cambiar la altura de la barrera Schottky mediante la introducción de dopantes en el lado de los semiconductores, el piezopotencial puede estar continuamente ajustado por la tensión de un dispositivo fabricado. Hay varias teorías acerca del contacto  $M - S$  Schottky, la teoría de emisión termiónica, la teoría de la difusión y la teoría de la emisión termiónica de difusión. El modelo de difusión es tomado como ejemplo para describir con claridad el mecanismo del efecto piezotrónico [14]. En la Figura 2 se muestra el contacto ideal  $M - S$  metal-semiconductor con la presencia de cargas piezoeléctricas

El transporte de los portadores en el contacto  $M - S$  es dominado por los portadores mayoritarios. La densidad de corriente en la ecuación 2 puede ser reescrita de la siguiente manera:

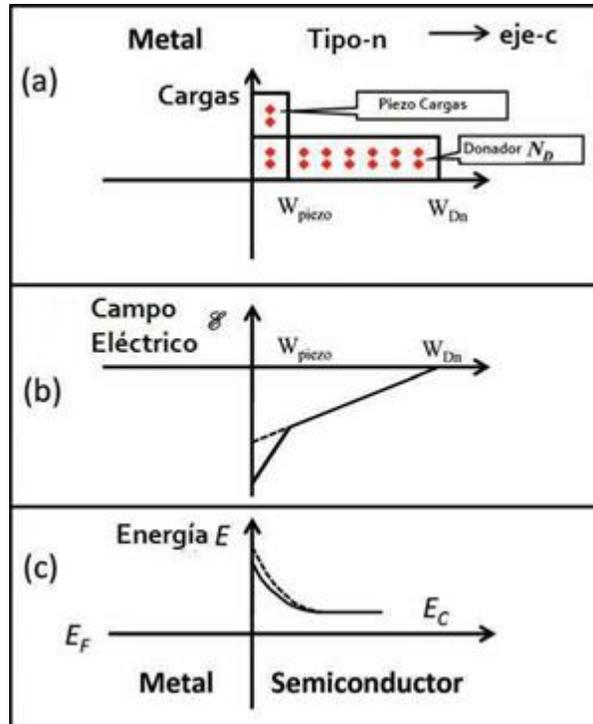
$$J = J_n = q u_n n E + q D_n \frac{dn}{dx}, \text{ donde } E = \frac{d\Psi_i}{dx} = \frac{dE_c}{dx} \quad (17)$$

De acuerdo con la teoría de la difusión de Schottky, las soluciones bajo polarización directa (un metal es polarizado positivo) se pueden obtener como:

$$J_n \approx J_D \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right) \left[ \left( \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right) \right] \quad (18)$$

Donde  $J_D = \frac{q^2 D_n N_c}{kT} \sqrt{\frac{2qN_D(\Psi_{bi} - V)}{\epsilon_s}} \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right)$  es la

densidad corriente de saturación. Se define  $J_{D0}$  como la densidad corriente de saturación en la ausencia de cargas piezoeléctricas.



**Figura 2.** Contacto ideal de metal-semiconductor con la presencia de cargas piezoeléctricas con un voltaje aplicado de  $V = 0$  (equilibrio térmico)

$$J_{D0} = \frac{q^2 D_n N_c}{kT} \sqrt{\frac{2qN_D(\Psi_{bi}-V)}{\epsilon_s}} \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right) \quad (19)$$

Donde  $\Psi_{bi0}$  y  $\phi_{Bn0}$  son incorporados en el potencial y la altura de la barrera de Schottky en la ausencia de cargas piezoeléctricas. En este caso, el efecto de la carga piezoeléctrica se puede considerar como una perturbación para la conducción de banda del borde  $E_C$ . El cambio eficaz en la altura de la barrera de Schottky inducida por las cargas piezoeléctricas se puede derivar de la distribución potencial en la ecuación 9 y la ecuación 10,

$$\phi_{Bn} = \phi_{Bn0} - \frac{q^2 p_{piezo} W_{piezo}^2}{2\epsilon_s} \quad (20)$$

Por lo tanto, la densidad de corriente puede ser reescrita como:

$$J_n \approx J_D \exp\left(\frac{q^2 p_{piezo} W_{piezo}^2}{2\epsilon_s kT}\right) \left[\exp\frac{qV}{kT} - 1\right] \quad (21)$$

Esto significa que la corriente transportada a través del contacto  $M - S$  es una función exponencial de las piezocargas locales, dependen de la tensión. Por lo tanto, la corriente que se transportará se puede controlar con eficacia por la magnitud de la tensión y también por el tipo de tensión aplicada. Este es el mecanismo del transistor piezotrónico para el caso  $M - S$ .

**Contacto semiconductor de tipo metal-Wurtzite**

Para el caso especial de un contacto metal-semiconductor Wurtzite, como  $Au - ZnO$  ó  $Ag - ZnO$  que son los nanocables de  $ZnO$  crecidos a lo largo del  $Eje - c$ , el coeficiente de piezo-cociente de la matriz se escribe como:

$$(e)_{ijk} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Si la tensión creada es la tensión  $e_{33}$  a lo largo del  $eje - c$ , la polarización del piezoeléctrico puede obtenerse de la ecuación 4 y 5.

$$P_z = e_{33} s_{33} = q p_{piezo} W_{piezo} \quad (22)$$

La densidad de corriente es:

$$J = J_D \exp\left(\frac{q e_{33} s_{33} W_{piezo}}{2 \epsilon_s k T}\right) \left[ \exp\frac{qV}{kT} - 1 \right] \quad (23)$$

La corriente transportada a través de la interfaz  $M - S$  está relacionada directamente con el exponencial de la tensión local, significa que la corriente puede ser controlada como un interruptor por la tensión.

### Simulación Numérica de dispositivos Piezotrónico

En la siguiente sección se mostrará los valores que fueron necesarios para el desarrollo de la simulación del nanocable por medio de los cuales se logró la solución numérica y su reproducción en el software Comsol [9].

#### Uniones p-n piezoeléctricas

Se escogió para la simulación los nanocables de uniones piezoeléctricas de tipo p-n porque son los más comunes en el desarrollo de nanocomponentes además de que se tiene más estudio en este tipo de uniones lo cual nos ayuda a entender mejor el sistema. En general las ecuaciones básicas para los dispositivos piezotrónico pueden resolverse numéricamente. La distribución de cargas piezoeléctricas es obtenida al resolver las ecuaciones 4 y 5. Entonces las ecuaciones de electrostática, las ecuaciones de convección, las de difusión, y la

de continuidad se solucionan usando el software de Comsol [9].

### Material Óxido de Zinc

En la simulación realizada se eligió como material el Óxido de Zinc ( $ZnO$ ) porque tiene tres propiedades que son clave para el desarrollo de nanocables, ya que: Es un semiconductor con un ancho de banda prohibida ( $3.37 eV$ ) y tiene una buena excitación de energía de enlace nuclear ( $60 meV$ ). Además, exhibe pocos rayos ultravioletas y tiene una buena transparencia. No tiene una simetría central, Es un material seguro y sustentable con el medio ambiente y los humanos, puede ser usado para aplicaciones médicas sin capas o recubrimientos especiales [18].

### Valores Numéricos para la simulación

Para la simulación numérica se asumieron los siguientes valores: La longitud del  $tipo - p$  es de  $20nm$ . La del  $tipo - n$  es de  $80 nm$ .

El dieléctrico relativo son las constantes  $\kappa_{\perp}^r = 7.77$  y  $\kappa_{\parallel}^r = 8.91$ .

La densidad de la carga intrínseca es  $n_i = 1.0 \times 10^6 cm^{-3}$ .

La movilidad del electrón y las cargas son  $u_n$  y  $u_p = 180 cm^2 V^{-1} s^{-1}$ .

El tiempo de vida de las cargas es  $T_p = 0.1 us$  y  $T_n = 0.1 us$ .

La concentración del fondo del dopaje del  $tipo - n$  es  $N_{Dn} = 1 \times 10^{15} cm^{-3}$ .

La concentración máxima del dopaje del donador es  $N_{Dnmax} = 1 \times 10^{17} cm^{-3}$ .

La del aceptador es  $N_{Apmax} = 1 \times 10^{17} cm^{-3}$ .

La constante de control es  $ch = 4.66 nm$ .

La temperatura es  $T = 300K$ .

Una vez definidos los valores a usar con el modelo analítico los cuales la mayoría de ellos son constantes, se empieza por ingresar dichos valores para desarrollar la simulación y

así obtener los resultados de la investigación en base a las pruebas realizadas.

## Resultados

En esta sección se mostrarán los resultados obtenidos en la simulación, aquí se puede observar la metodología para llegar a la solución analítica y numérica de tres tipos de uniones en nanocables de Óxido de Zinc las cuales son:

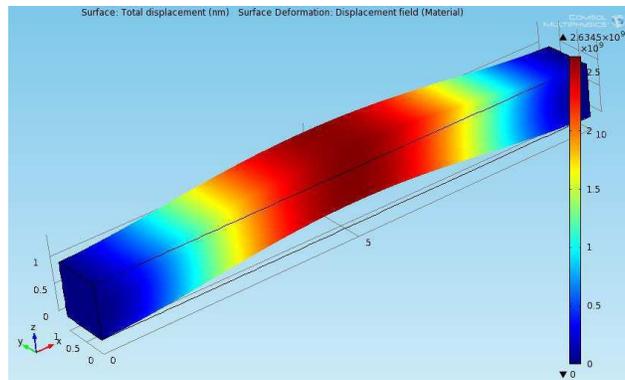
1. Uniones Piezoeléctricas  $p - n$ .
2. Contacto metal-semiconductor.
3. Contacto semiconductor de tipo metal-Wurtzite.

Para la simulación se trabajó con las uniones piezoeléctricas de tipo p-n, sobre este punto se elaboraron las pruebas.

### Uniones Piezoeléctricas $p - n$

#### Prueba 1

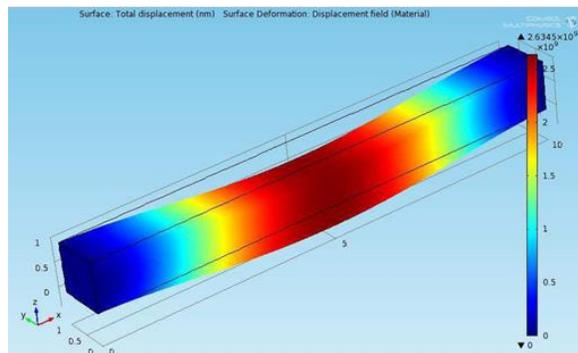
En lo que se llamó prueba uno, se caracteriza por la aplicación de una fuerza total de 10 Newton sobre la superficie del nanocable dicha fuerza está dividida en dos formas de aplicarla: esfuerzo de tensión y esfuerzo de compresión, ambos aplicados con el mismo valor, pero invirtiendo el signo. A continuación, se muestra una imagen de la deformación física del nanocable al momento de aplicar 10 Newton sobre la superficie:



**Figura 3.** Deformación del nanocable después de ser sometido a una fuerza de 10 Newton

En la figura 3 se puede analizar que el valor máximo de deformación del nanocable a una fuerza aplicada ya antes especificada es de 2.63 nm. También en esta imagen existe una

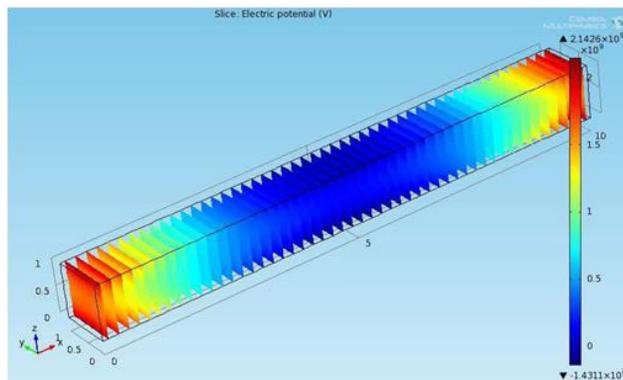
barra al lado derecho que nos muestra la igualdad de los valores de deformación de acuerdo al color.



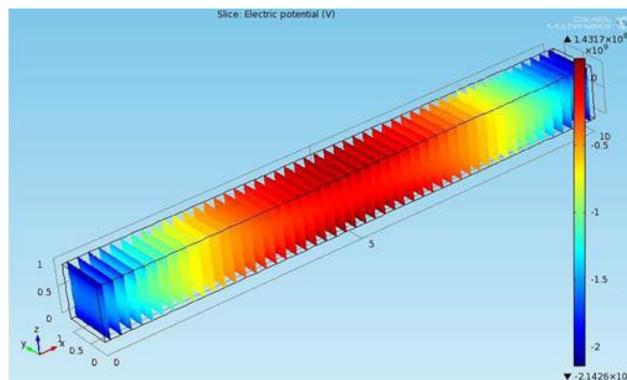
**Figura 4.** Deformación del nanocable después de ser sometido a una fuerza de -10 Newton

En la figura 4 se analiza la deformación del nanocable a una fuerza de -10 Newton, teniendo también una misma deformación que la figura 3 pero en diferente sentido. A

continuación, se mostrarán las imágenes de la salida de potencial eléctrico al momento de aplicar 10 y -10 Newton:



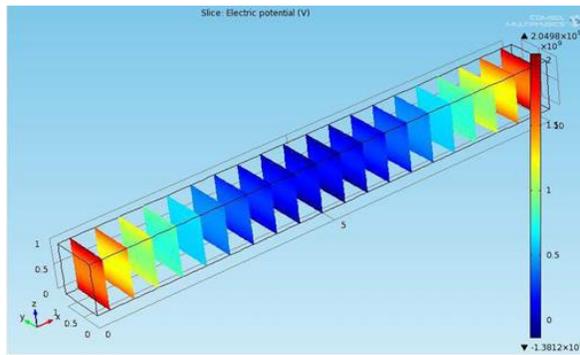
**Figura 5.** Potencial eléctrico del nanocable después de ser sometido a una fuerza de 10 Newton, nanocable dividido en 50 partes



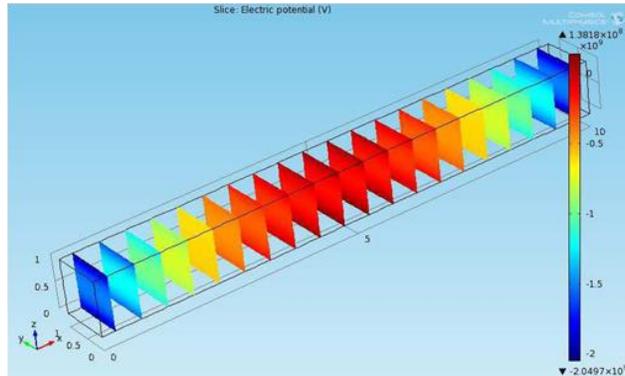
**Figura 6.** Potencial eléctrico del nanocable después de ser sometido a una fuerza de -10 Newton, nanocable dividido en 50 partes

Se puede ver como el potencial de acuerdo a la fuerza aplicada es inversa la salida de voltaje, la cual está entre 2.14 nV y -2.14 nV . En las figuras 5 y 6 se visualiza el potencial eléctrico de una forma que divide al nanocable en varias partes ya que el potencial eléctrico no está

distribuido uniforme a lo largo del nanocable, por tal motivo se visualiza de la forma ya antes mencionada para su mejor comprensión. Las imágenes siguientes muestran los mismos resultados que las 5 y 6 pero en las 7 y 8 se mostrara el nanocable con menos divisiones.



**Figura 7.** Potencial eléctrico del nanocable después de ser sometido a una fuerza de 10 Newton, nanocable dividido en 20 partes

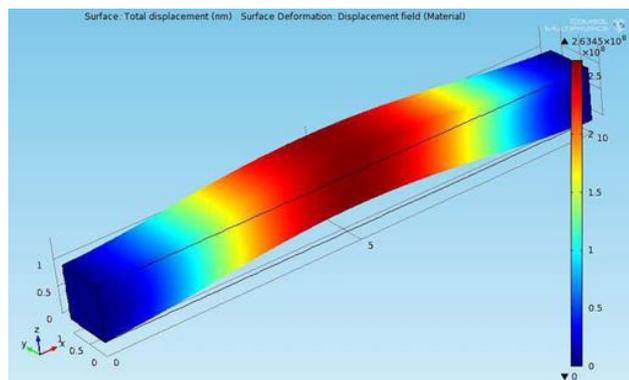


**Figura 8.** Potencial eléctrico del nanocable después de ser sometido a una fuerza de -10 Newton, nanocable dividido en 20 partes

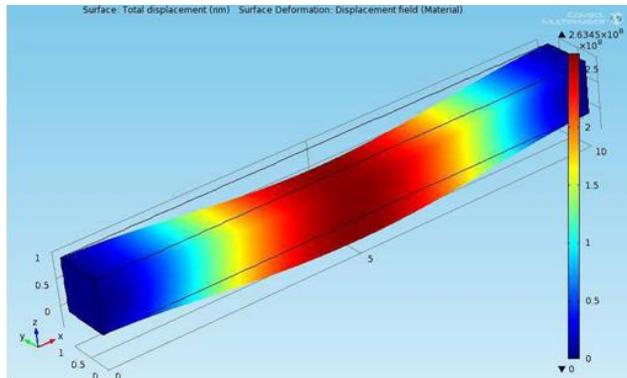
*Prueba 2*

En esta prueba se aplicó una fuerza de 1 Newton sobre la superficie del nanocable esta fuerza está dividida en dos formas de aplicarla: esfuerzo de tensión y esfuerzo de compresión, ambos aplicados con el mismo valor, pero invirtiendo el signo al igual que en la prueba uno. En las figuras

9 y 10 se ve la deformación a la que se somete el nanocable después de aplicar una fuerza de 1 y -1 newton. En estas imágenes se puede observar que ahora la deformación del material llega a ser de 26.34 nm y el sentido de la deformación es según la aplicación de la fuerza.



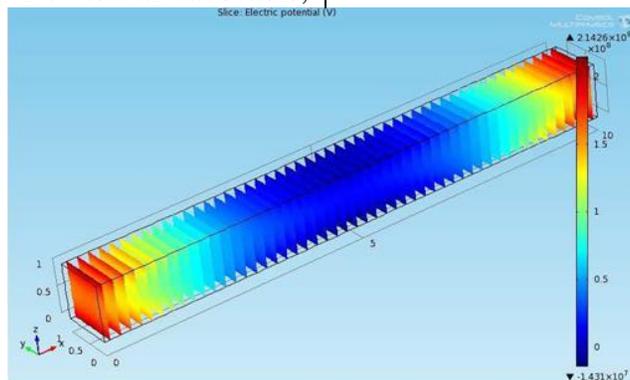
**Figura 9.** Deformación del nanocable después de ser sometido a una fuerza de 1 Newton



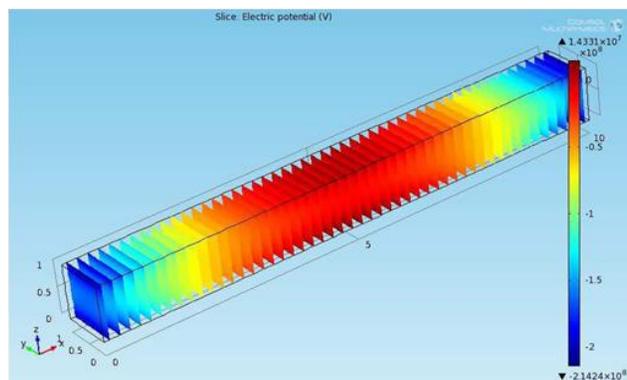
**Figura 10.** Deformación del nanocable después de ser sometido a una fuerza de -1 Newton

Aprovechando las propiedades piezoeléctricas del ZnO se muestra las imágenes 11 y 12 que simulan el potencial eléctrico al momento de aplicar un Newton al nanocable,

las imágenes mostradas dividen el nanocable en 50 partes para apreciar mejor los valores del potencial.



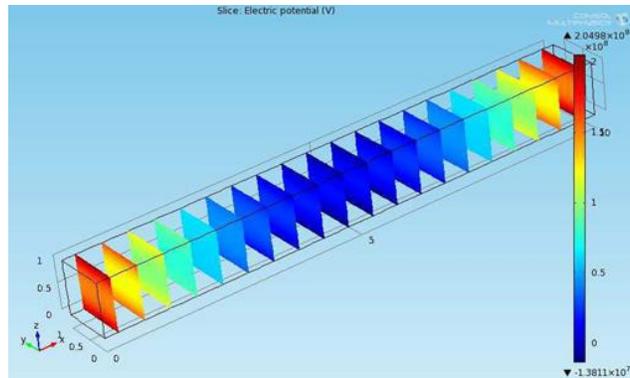
**Figura 11.** Potencial eléctrico del nanocable después de ser sometido a una fuerza de 1 Newton, nanocable dividido en 50 partes



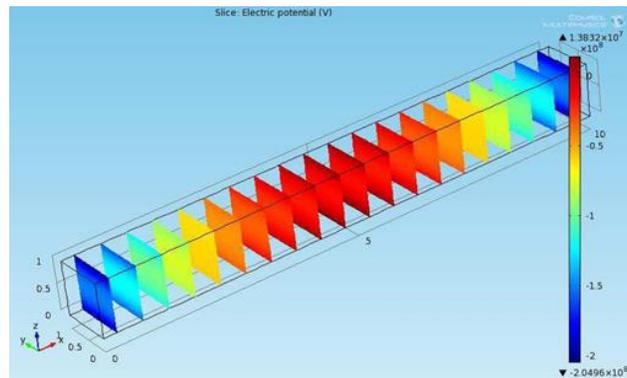
**Figura 12.** Potencial eléctrico del nanocable después de ser sometido a una fuerza de -1 Newton, nanocable dividido en 50 partes

En las figuras 13 y 14 se muestra también la distribución del potencial, pero ahora el nanocable está dividido en 20 partes para que

se visualicen de una mejor forma que en las figuras 11 y 12.



**Figura 13.** Potencial eléctrico del nanocable después de ser sometido a una fuerza de 1 Newton, nanocable dividido en 20 parte



**Figura 14.** Potencial eléctrico del nanocable después de ser sometido a una fuerza de -1 Newton, nanocable dividido en 20 partes

## Conclusiones

Al desarrollar la tecnología de los nanogeneradores se podrá eliminar las baterías convencionales, las cuales causan mucho daño al planeta porque no son reciclables y además contaminan el subsuelo de la tierra al momento de desecharlas. El modelo analítico funciona para un nanocable alimentado por energía mecánica, dicha energía mecánica puede ser extraída de una diversidad de movimientos humanos y esto hace esta tecnología muy útil para el desarrollo de nanodispositivos de alto rendimiento en la batería. Al momento de desarrollar el proyecto se llegó a la conclusión de que los nanocables de Óxido de Zinc por sus propiedades piezoeléctricas tienen un futuro prometedor al momento de generar un voltaje, en la actualidad es muy poco el voltaje de salida

para alimentar dispositivos móviles como se planteó al inicio del proyecto, pero en un futuro y con un arreglo de dichos nanocables se podrá lograr este objetivo sin ningún problema. Actualmente en la Universidad Autónoma de Ciudad Juárez no se pueden realizar pruebas físicas del nanocable de este documento, pero se espera que en un futuro se pueda adaptar el modelo matemático a escala micrométrica ya que en dicha universidad si se cuentan con las instalaciones para trabajar con esa escala. Se espera que se le pueda dar un seguimiento a esta investigación para poder en un par de años por medio de este documento como apoyo la fabricación de un nanocable de óxido de zinc alimentado de energía mecánica.

## Referencias

- [1] Ross, P.E., Top 11 technologies of the decade, *Spectrum IEEE*, 48, pages 27 to 63.
- [2] Zheng Wei Pan, Zu Rong Dai, Zhong Lin Wang, Nanobelts of Semiconducting Oxides, *Science* 291, page 1947, 2001.
- [3] Z.L. Wang, Z.W. Pan, "Nanobelts of Semiconductive Oxides - A structurally and morphologically controlled nanomaterials system", *Int. J. of Nanoscience*, 41-51, 2002.
- [4] Jin liu, peng fei, jun Zhou, rao tummala, and zhong lin wang, Toward high output-power nanogenerator, 10 April 2008.
- [5] Yi-Feng lin, Jinhua song, young ding, shih-yuan lu, zhong lin wang, "Piezoelectric nanogenerator using cds nanowires, 14 june 2008.
- [6] Zhong lin wang, ZnO nanowire and nanobelt platform for nanotechnology, 9 march 2009.
- [7] Chieh Chang, Yiin Kuen Fuh, and Liwei Lin, A direct-write piezoelectric pvd nanogenerator, june 2009.
- [8] Te Hua Fang, Win Jin Chang, Walter Water, Ching Chin Lee, "Effect of gas concentration on structural and optical characteristics of ZnO nanorods, 8 April 2010.
- [9] COMSOL Company, Comsol, Version 4.2, 2011.
- [10] Zhong Lin Wang, "Ten years venturing in ZnO nanostructures: from discovery to scientific understanding and to technology applications", *Chinese Science Bulletin*, Springer, 2009.
- [11] Zhong Lin Wang, "ZnO nanowire and nanobelt platform for nanotechnology", *Materials Science and Engineering*, Volume 64, Issues 3-4, 3 April, Pages 33-71, 2009.
- [12] Zhong Lin Wang, "Nanogenerators and Nanopiezotronics", *Electron Devices Meeting*, 2007. IEDM 2007. IEEE International, pp.371-374, 10-12 Dec 2007.
- [13] The new field of nanopiezotronics, Z.L. Wang, *Materials Today*, 10 (No.5), 2007.
- [14] S. M. Sze, *Physics of semiconductor devices*, 2nd edition, Wiley, New York, 1981.
- [15] T. Ikeda, *Fundamentals of Piezoelectricity*, Oxford University Press, Oxford, UK, 1996.
- [16] G. A. Maugin, *Continuum Mechanics of Electromagnetic Solids*, North-Holland, Amsterdam, 1988.
- [17] R. W. Soutas-Little, *Elasticity*, XVI, 431, Dover Publications, Mineola, NY 1999.
- [18] Zhong Lin Wang (2007). "Piezoelectric Nanostructures: From Growth Phenomena to Electric Nanogenerators". *MRS BULLETIN*, Volume 32, 109-115.