

В.М. ЗАДОРЖНИЙ, Р.М. БАЛАБАЙ, О.О. БОНДАРЕНКО

Криворізький державний педагогічний університет
(Просп. Гагаріна, 54, Кривий Ріг 50086; e-mail: vitaliy_zadorozhniy@ukr.net, balabai@i.ua, alenkagonohova@gmail.com)

П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНИЙ ВІДГУК ПОЛІ (L-МОЛОЧНОЇ КИСЛОТИ) α -ФОРМИ НА МЕХАНІЧНО НАПРУЖЕНИЙ СТАН

УДК 539

У роботі досліджено п'єзоелектричні ефекти в полімері (L-молочна кислота) при механічному впливі методами теорії функціонала густини та псевдопотенціалу на основі власного програмного коду. Розраховано просторові розподіли густини валентних електронів, густини електронних станів, кулонівських потенціалів у різних напрямках фрагмента полімеру PLLA та зарядових станів його окремих атомів. Встановлено, що лише один фрагмент полімерного ланцюга дозволяє визначити характер зарядової поляризації валентних електронів та іонів при механічній деформації.

Ключові слова: п'єзоелектричні ефекти, полімер (L-молочна кислота), стиснення, згинання, скручування, теорія функціонала густини, розрахунки з перших принципів.

1. Вступ

Щодо накопичення п'єзоелектричної енергії було досліджено широкий спектр матеріалів, включаючи неорганічні, органічні та композитні матеріали [1]. П'єзоелектричні полімери є природними гнучкими, міцними та легкими в обробці, тому сприятливі для багатьох застосувань [2]. П'єзоелектричні полімери, серед яких нейлон-11 [3], отриманий з касторової олії; полімер, армований вуглецевим волокном, [4] та інші можуть успішно замінити неорганічні керамічні п'єзоелектрики, які зазвичай є крихкими, негнучкими та часто містять токсичні важкі метали – фактори, які перешкоджають їх застосуванню в медицині [5]. П'єзоелектричні по-

лімери можна знайти в природі. Наприклад, деревина є п'єзоелектричним матеріалом через наявність целюлози в його структурі [6]. Полі(L-молочна кислота) (PLLA) є одним із синтетичних біорозкладних п'єзоелектричних полімерів, синтезованих полімеризацією мономерів L-молочної кислоти. П'єзоелектрична функціональність PLLA продемонстрована як датчика сили в літературі [7]. Незважаючи на те, що ці біорозкладані п'єзоелектричні матеріали мають нижчу п'єзоелектричність, ніж керамічні, можна застосувати кілька підходів для підвищення їхньої п'єзоелектричної здатності, наприклад, шляхом модифікації їхніх кристалічних структур. Чжу та інші [8] виготовили п'єзоелектричний пристрій на основі нановолокон PLLA для вимірювання деформації та збору п'єзоелектричної енергії.

У нашій роботі теоретично досліджено п'єзоелектричні ефекти в полімері (L-молочної кислоти) методами теорії функціонала густини та першопринципного псевдопотенціалу на основі власного програмного коду Криворізького державного пе-

Цитування: Задорожній В.М., Балабай Р.М., Бондаренко О.О. П'єзоелектричний відгук полі (L-молочної кислоти) α -форми на механічно напружений стан. *Укр. фіз. журн.* **70**, № 2, 107 (2025).

© Видавець ВД "Академперіодика" НАН України, 2025. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

ISSN 2071-0194. *Укр. фіз. журн.* 2025. Т. 70, № 2

дагогічного університету [9, 10]. Розраховано просторові розподіли густини валентних електронів, густини електронних станів, кулонівські потенціали в різних напрямках фрагмента полімеру PLLA та зарядові стани окремих його атомів для встановлення кореляції між кристалічною структурою та п'єзоевластивостями, що дозволить з'ясувати його конкретне застосування на практиці при різних механічних впливах типу стиснення, згинання або скручування.

2. Методи та моделі дослідження

Основним значенням у формалізмі функціонала електронної густини є густина заряду. Вона оцінювалася нами із самоузгодженого розв'язку рівнянь Кона-Шема для штучної періодичної системи:

$$\rho(\mathbf{G}) = \frac{2}{N_T} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{j}} \sum_{\alpha \in T} \sum_{\mathbf{G}'} b_j^*(\mathbf{k} + \mathbf{G}' + \alpha \mathbf{G}) \times b_j(\mathbf{k} + \mathbf{G}'), \quad (1)$$

де індекс j проходив по всіх зайнятих станах, \mathbf{k} є вектором із першої зони Бриллюена, N_T є числом операторів α в точковій групі T атомного базису, а фактор 2 враховував спінове виродження.

Кулонівський потенціал вздовж заданого напрямку розраховували за формулою, яка у оберненому просторі має вигляд:

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

де $\rho(\mathbf{G})$ – фур'є-компонента електронної густини (1).

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

$$q_\alpha = Z_\alpha - \int_{V_\alpha} n(r) d^3. \quad (3)$$

Наші розрахунки проводились за таких умов: підсумовування по зоні Бриллюена була змінена розрахунком в одній точці – Γ -точці. Ітерації самоузгодженості припинялися, якщо результати розрахунку поточної ітерації збігалися з попередньою із заданою похибкою. Зазвичай, наші результати збігалися після 5–6 ітерацій. Кількість

плоских хвиль у розкладі хвильової функції була урізана шляхом пробних розрахунків. Кількість плоских хвиль вибирали приблизно 20–25 хвиль на один атом базису. Атомний базис не був оптимізований.

У досліджуваних атомних системах штучну трансляційну симетрію було введено шляхом побудови суперґратки з примітивною тетрагональною коміркою та атомним базисом, який містить повну інформацію про досліджувану систему. Комірка транслявалася в трьох ортогональних напрямках. Для розрахунків були розроблені такі об'єкти:

Об'єкт 1: один ізольований фрагмент полімерного ланцюга (L-молочної кислоти) α форми, що складався із 45 атомів та був орієнтований в межах Лабораторної Декартової системи координат, що діє у програмному комплексі, своєю найдовшою стороною – вуглецевим каркасом – вздовж напрямку Z . До фрагмента застосовувалося моделювання механічного впливу типу статичного стиснення шляхом зміни відповідних координат атомів у напрямку дії сили стиснення, що спряжений з декартовим напрямком Z , тобто, зменшувалися Z -координати атомів до 9% від вихідних із кроком 2%.

Об'єкт 2: один ізольований фрагмент полімерного ланцюга (L-молочної кислоти) α форми, до якого застосовувалося моделювання механічного впливу типу скручування шляхом дії матриці перетворення скручування навколо осі Z , що залежить від погонного кута, пропорційного віддаленню точки об'єкта від нерухомої точки, котра вибиралася у найнижньому атомі полімерного фрагмента (кут = кут *z_i).

Об'єкт 3: один ізольований фрагмент полімерного ланцюга (L-молочної кислоти) α форми, до якого застосовувалося моделювання механічного впливу типу згинання шляхом дії матриці перетворення згинання навколо осі X . На відміну від скручування, при деформації згинання кут повороту точки навколо осі згинання є пропорційним її віддаленню. Згинання здійснювалося відносно нерухомої точки, котра вибиралася у центрі полімерного фрагмента.

3. Результати та їх обговорення

Аналізували зміни обчислених розподілів валентних електронів у різних областях ізольованого фрагмента полімерного ланцюга (L-молочної ки-

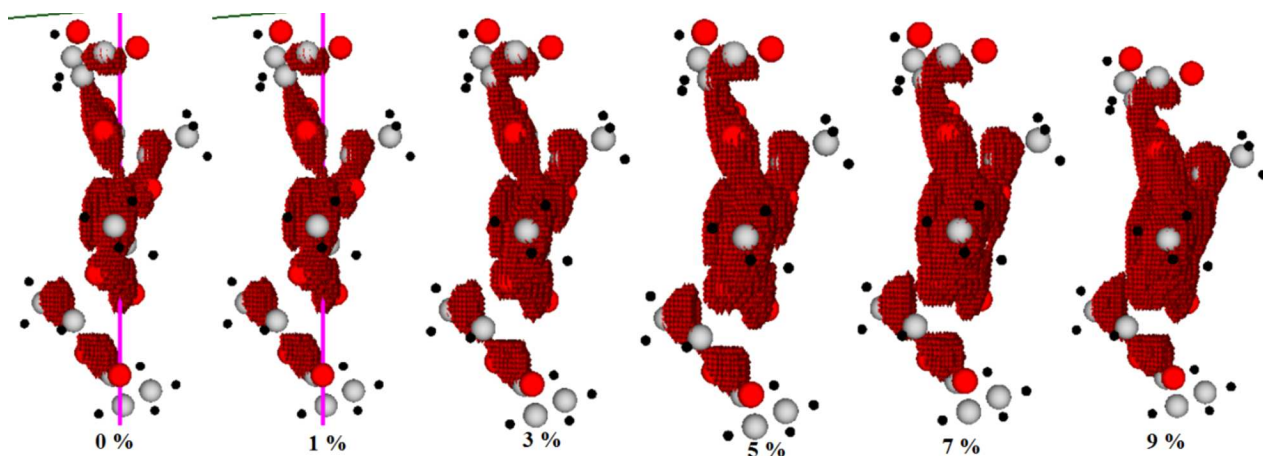


Рис. 1. Просторові розподіли густини валентних електронів для ізозначення 0,9–1,0 від максимального в межах одного ланцюга PLLA при різних механічних рівнях стиснення

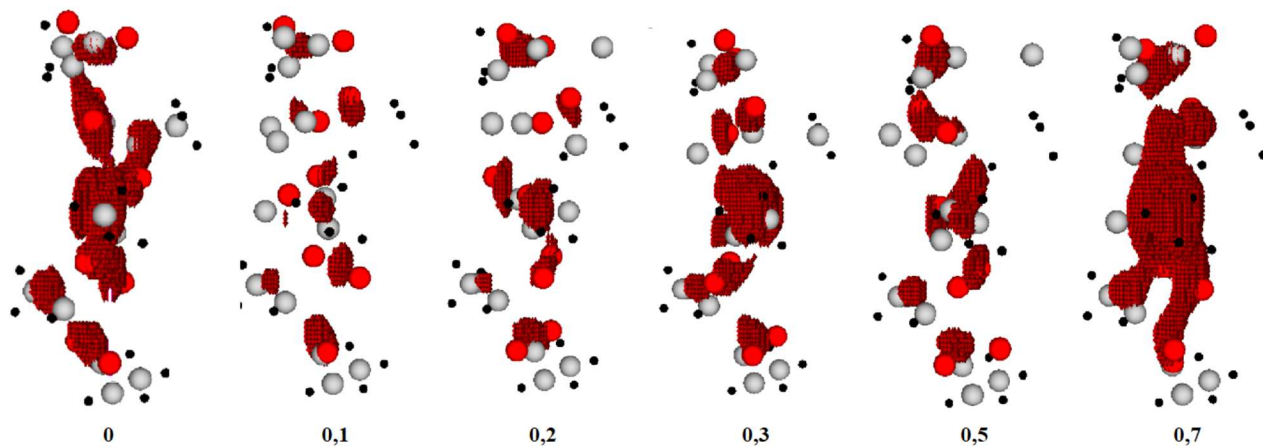


Рис. 2. Просторові розподіли густини валентних електронів для ізозначення 0,9–1,0 від максимального в межах одного ланцюга PLLA при різних механічних рівнях кручення

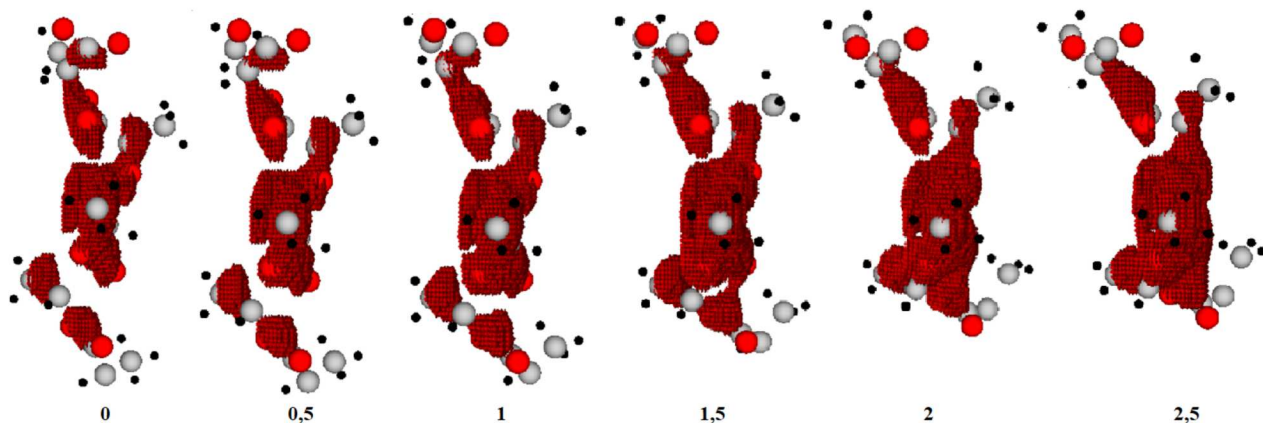



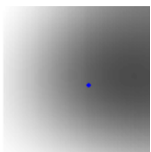
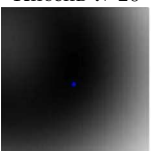
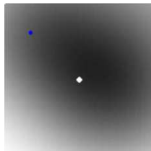
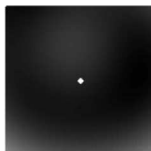
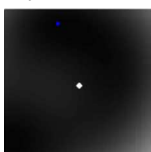
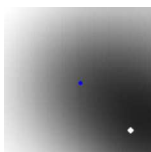
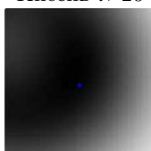
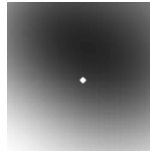
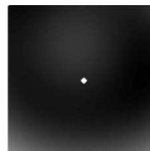
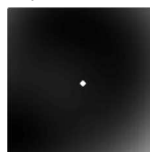
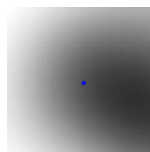
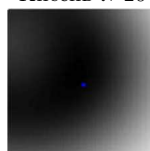
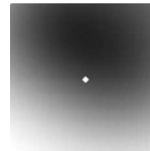


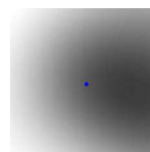
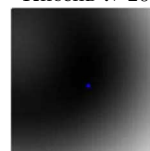
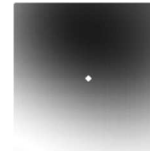
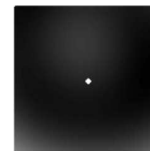
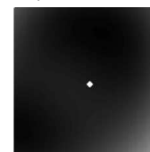
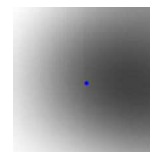

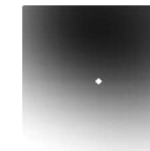


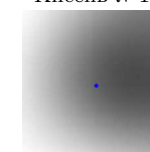
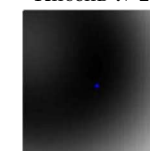
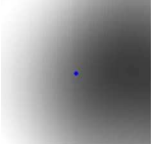
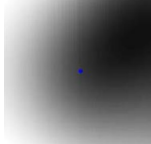
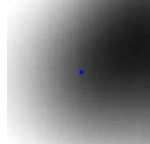
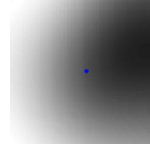
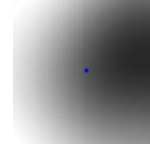
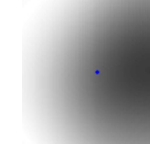


Рис. 3. Просторові розподіли густини валентних електронів для ізозначення 0,9–1,0 від максимального в межах одного ланцюга PLLA при різних механічних рівнях згинання

Таблиця 1. Значення електричних зарядів в околі остовів атомів С, О, Н в залежності від кута згинання полімеру

Згинання 0 градусів	Деформація. Згинання 0,5 градусів	Деформація. Згинання 1 градус	Деформація. Згинання 1,5 градусів	Деформація. Згинання 2 градуса	Деформація. Згинання 2,5 градусів
№ та тип атома в центрі околу радіусом 1.323 Å. Переріз електронної густини в околі. Кількість та сорти атомів, що потрапили в окіл. Заряд, еє					
<p>Вуглець №3</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 2,2110 Вуглець №9</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 2 -1,8203 Вуглець №12</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 2 -1,623 Кисень №16</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 4,2634 Кисень №20</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 -0,1385</p>	<p>Вуглець №3</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 2,7567 Вуглець №9</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 2 -1,8176 Вуглець №12</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 2 -1,5677 Кисень №16</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 4,405 Кисень №20</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 -0,1884</p>	<p>Вуглець №3</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 3,2217 Вуглець №9</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 2 -1,8117 Вуглець №12</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 2 -1,5086 Кисень №16</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 4,468 Кисень №20</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 -0,197</p>	<p>Вуглець №3</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 3,5569 Вуглець №9</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 2 -1,8377 Вуглець №12</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 2 -1,424 Кисень №16</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 4,6377 Кисень №20</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 -0,2842</p>	<p>Вуглець №3</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 3,8242 Вуглець №9</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 2 -1,8885 Вуглець №12</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 2 -1,3532 Кисень №16</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 4,8323 Кисень №20</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 -0,3998</p>	<p>Вуглець №3</p>  <p>Вуглець – 1 -2,0043 Вуглець №9</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 -1,9211 Вуглець №12</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 -1,2808 Кисень №16</p>  <p>Кисень – 1 0,9557 Кисень №20</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 -0,5027</p>

Закінчення табл. 1

Згинання 0 градусів	Деформація. Згинання 0,5 градусів	Деформація. Згинання 1 градус	Деформація. Згинання 1,5 градусів	Деформація. Згинання 2 градуса	Деформація. Згинання 2,5 градусів
<p>№ та тип атома в центрі околу радіусом 1.323 Å. Переріз електронної густини в околі. Кількість та сорти атомів, що потрапили в окіл. Заряд, еє</p>					
<p>Кисень № 24</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 4,0345 Водень № 26</p>	<p>Кисень № 24</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 4,2975 Водень № 26</p>	<p>Кисень № 24</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 4,685 Водень № 26</p>	<p>Кисень № 24</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 5,0168 Водень № 26</p>	<p>Кисень № 24</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 5,4178 Водень № 26</p>	<p>Кисень № 24</p>  <p>Вуглець – 1 Кисень – 1 5,8538 Водень № 26</p>
<p>Вуглець – 1 Водень – 1 2,9998 Водень № 31</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 3,6799 Водень № 31</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 4,1329 Водень № 31</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 4,3107 Водень № 31</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 4,4771 Водень № 31</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 4,5744 Водень № 31</p>
<p>Вуглець – 2 Водень – 1 4,3965 Водень № 40</p>	<p>Вуглець – 2 Водень – 1 4,2829 Водень № 40</p>	<p>Вуглець – 2 Водень – 1 4,1905 Водень № 40</p>	<p>Вуглець – 2 Водень – 1 4,1871 Водень № 40</p>	<p>Вуглець – 2 Водень – 1 4,2328 Водень № 40</p>	<p>Вуглець – 2 Водень – 1 4,1675 Водень № 40</p>
<p>Вуглець – 1 Водень – 1 0,6936 Водень № 45</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 0,6675 Водень № 45</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 0,7053 Водень № 45</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 0,7362 Водень № 45</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 0,7717 Водень № 45</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 0,7987 Водень № 45</p>
<p>Вуглець – 1 Водень – 1 2,1289</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 2,132</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 2,2322</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 2,463</p>	<p>Вуглець – 1 Водень – 1 2,8868</p>	<p>Водень – 1 -0,6509</p>

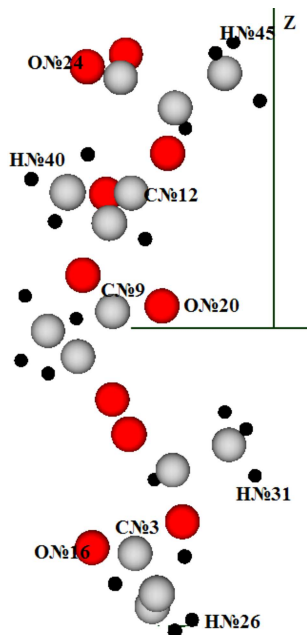


Рис. 4. Ізольований фрагмент полімерного ланцюга (L-молочної кислоти) α форми, що складався із 45 атомів, орієнтований своєю найдовшою стороною – вуглецевим каркасом – вздовж напрямку Z Лабораторної Декартової системи координат, що діє у програмному комплексі. Позначені атоми, в околі яких обчислювалися електричні заряди

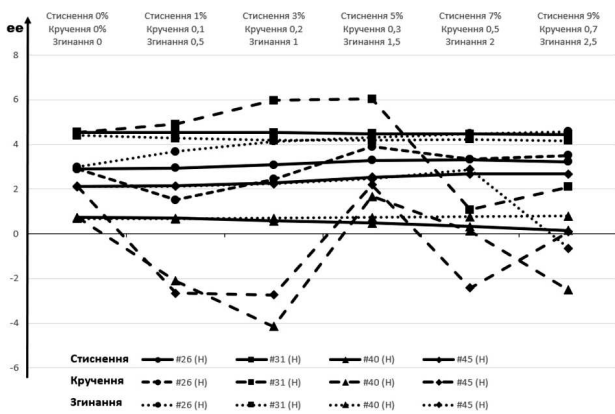


Рис. 5. Значення електричних зарядів в околі остовів атомів H залежно від рівня стиснення, кручення, згинання

слоти) α в залежності від механічних деформацій. На рис. 1–3 наведено просторові розподіли густини валентних електронів у межах усього ізольованого фрагмента PLLA при різних типах та рівнях механічних деформацій.

Аналіз лише одного фрагмента полімерного ланцюга вже дозволяє визначити характер перерозпо-

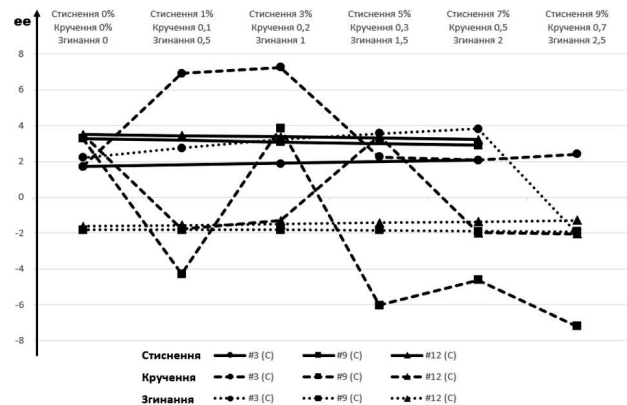


Рис. 6. Значення електричних зарядів в околі остовів атомів C залежно від рівня стиснення, кручення, згинання

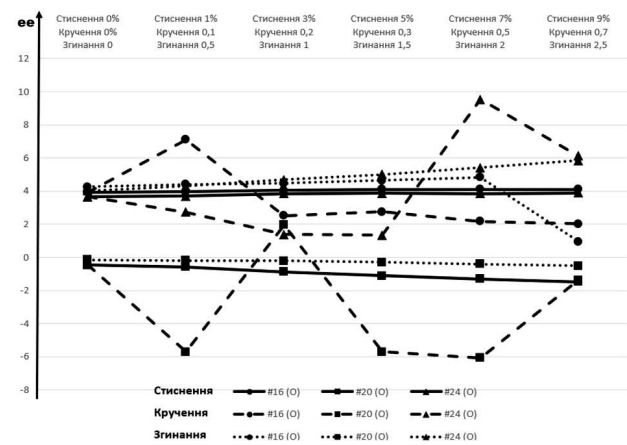


Рис. 7. Значення електричних зарядів в околі остовів атомів O залежно від рівня стиснення, кручення, згинання

ділу валентних електронів. Видно, що електронний заряд відступає від звисаючих кінців полімерного ланцюга та втягується всередину ланцюга (див. рис. 1–3). Механічні деформації викликали додаткову поляризацію дипольних компонентів (валентні електрони – іонні остови), що виникають, як уздовж основного вуглецевого ланцюга PLLA, так і впоперек.

Був виконаний більш деталізований аналіз перерозподілу густини валентних електронів у полімері при деформаціях. Так, на рис. 5–7 та частково у табл. 1 наведені значення електричних зарядів в околі остовів атомів C, O, H об'єктів 1, 2 та 3, які оцінені за формулою (3) в сферичному об'ємі з радіусом 1,323 Å в залежності від рівня стиснення, скручування, згинання відповідно. Атоми, для

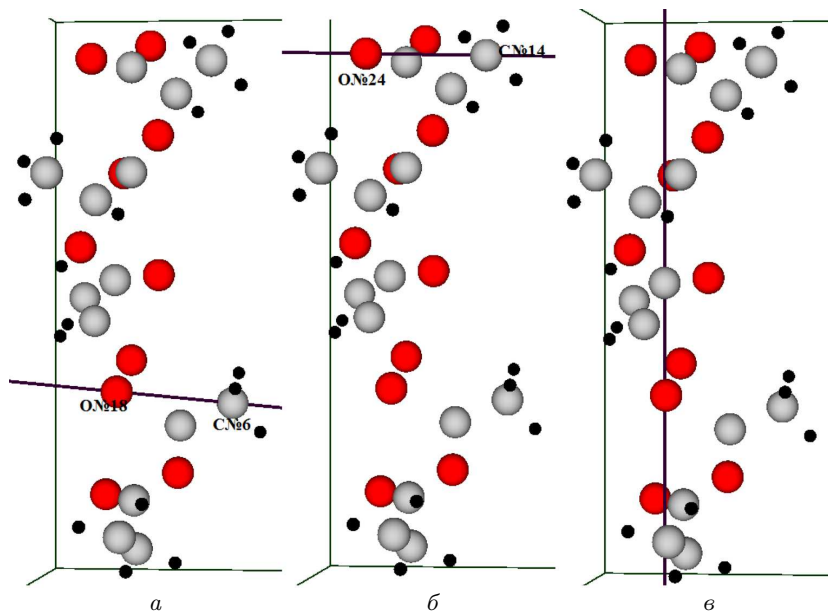


Рис. 8. Напрямки поперек (а, б) та вздовж (в) полімеру для обчислення розподілів кулонівських потенціалів

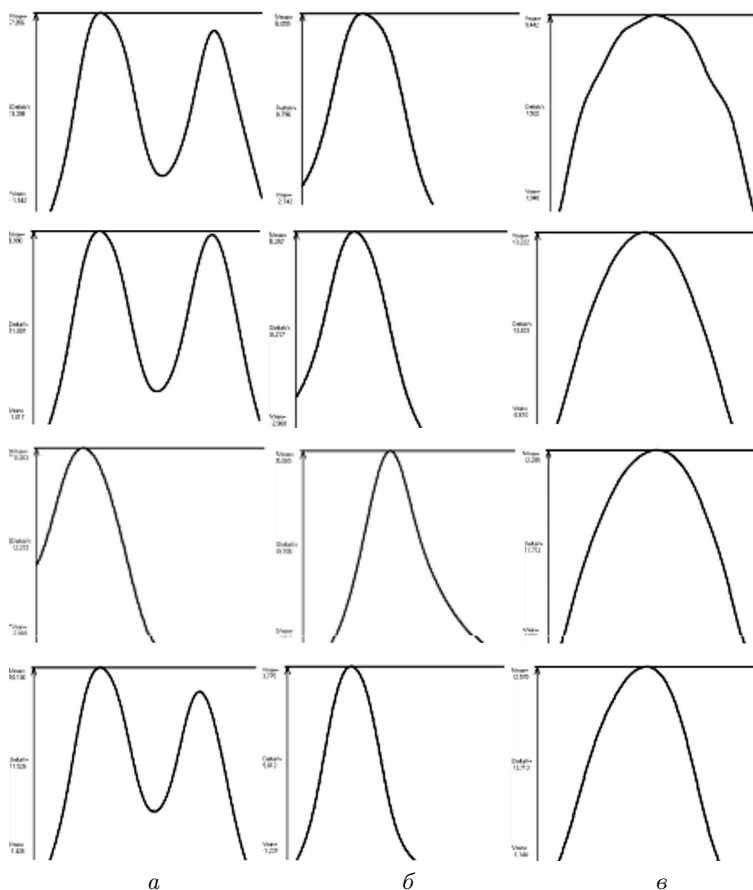


Рис. 9. Розподіли кулонівських потенціалів у напрямках поперек (а, б) та вздовж (в) полімеру зверху вниз: без деформації, із деформацією стиснення 9%, кручення на кут 0,7, згинання на кут 2,5

Таблиця 2. Мінімальні та максимальні значення у розподілах кулонівських потенціалів валентних електронів в залежності від деформації полімеру та напрямку обчислення

Напрямок	Значення	Стиснення, %					
		0	1	3	5	7	9
(а) між атомами С№ 6 та О№ 18	min	-1,426	-1,381	-1,278	-1,178	-1,096	-1,017
	max	9,128	9,219	9,428	9,629	9,812	9,99
(б) між атомами С№ 14 та О№ 24	min	-3,039	-3,037	-3,034	-3,02	-2,994	-2,96
	max	5,494	5,446	5,300	5,241	5,238	5,257
(в) вздовж полімеру	min	0,689	0,509	0,152	-0,163	-0,4	-0,61
	max	12,006	12,151	12,484	12,784	13,014	13,222
Напрямок	Значення	Кручення, %					
		0	0,1	0,2	0,3	0,5	0,7
(а) між атомами С№ 6 та О№ 18	min	-1,426	0,456	-2,156	-3,202	-0,871	-2,069
	max	9,128	9,996	10,185	9,913	9,028	10,203
(б) між атомами С№ 14 та О№ 24	min	-3,039	-3,561	-1,842	-3,612	-3,057	-4,041
	max	5,494	4,972	5,293	5,05	6,191	5,065
(в) вздовж полімеру	min	0,689	0,893	0,788	0,622	0,652	0,583
	max	12,006	11,326	11,906	12,218	11,702	12,295
Напрямок	Значення	Згинання					
		0	0,5	1	1,5	2	2,5
(а) між атомами С№ 6 та О№ 18	min	-1,426	-1,503	-1,494	-1,48	-1,443	-1,426
	max	9,128	9,438	9,57	9,698	9,886	10,1
(б) між атомами С№ 14 та О№ 24	min	-2,895	-2,662	-2,304	-1,87	-1,468	-1,237
	max	5,420	5,330	5,158	4,886	4,397	3,775
(в) вздовж полімеру	min	0,290	0,087	-0,147	-0,45	-0,814	-1,144
	max	11,977	12,046	12,125	12,237	12,414	12,57

яких обчислювався заряд, виділені на рис. 4 підписом. Електричні заряди обчислювалися в атомній системі одиниць, в якій заряд електрона вважається рівним одиниці.

Периферійні області полімерного ланцюга, які наведені в табл. 1 та на рис. 5–7 атомами: Н№ 45, О№ 24, Н№ 26, Н№ 31 та їх околами радіусом 1,323 Å, мали знак сумарного заряду “плюс” (від’ємний заряд від валентних електронів та позитивний заряд іонних остовів). Середні області полімерного ланцюга, які наводилися в табл. 1 та на рис. 5–7: Н№ 40, О№ 20, С№ 12, С№ 9, О№ 16,

С№ 3 та їх околами, мали знак сумарного заряду “мінус”. Така поляризація в розподілі зарядів підсилювалася із збільшенням рівня деформації усіх досліджених типів. При цьому вплив згинання та стиснення уздовж вуглецевого скелету полімерного волокна виявили монотонність та незначний рівень змін зарядів. Тоді як при скручуванні полімеру фіксувалися значні зміни у величинах зарядів в околах атомів, навіть змінювався знак цих сумарних зарядів, що, вочевидь, викликано значною деформацією хімічних ковалентних зв’язків.

Були обчислені за формулою (2) розподіли кулонівських потенціалів за напрямками вздовж та поперек полімеру, які позначені на рис. 8 лініями та рис. 9.

Чисельні значення екстремумів у розподілах Кулонівських потенціалів наведено у табл. 2.

Більш різкий рельєф кулонівських потенціалів валентних електронів має місце в напрямку вуглецевого скелета полімеру, тобто уздовж ланцюга полімеру.

4. Висновки

Були розраховані з використанням теорії функціонала густини та *ab initio* псевдопотенціалу просторові розподіли густини валентних електронів, заряди на атомах, кулонівські потенціали для ізольованого фрагмента полімерного ланцюга (L-молочної кислоти) α в залежності від механічних деформацій типу стиснення, кручення та згинання.

Лише один фрагмент полімерного ланцюга дозволяє визначити характер зарядової поляризації валентних електронів та іонних остовів при механічних деформаціях, а саме заряд відступає від звисаючих кінців полімерного фрагмента і втягується в його середину.

Збільшення рівня механічних деформацій викликає додаткові поляризації, що виникають, як уздовж основного вуглецевого ланцюга полімеру, так і впоперек.

Вплив згинання та стиснення уздовж вуглецевого скелета полімерного волокна виявилися ефективнішими, ніж скручування.

Більш різкий рельєф кулонівського потенціалу валентних електронів має місце в напрямку вуглецевого скелета полімеру.

1. N. Sezer, M. Koç. A comprehensive review on the state-of-the-art of piezoelectric energy harvesting. *Nano Energy* **80**, 105567 (2021).
2. M. Smith, S. Kar-Narayan. Piezoelectric polymers: Theory, challenges and opportunities. *International Materials Reviews* **67**, (1), 65 (2022).
3. M. Ali, M.J. Bathaei, L. Beker. Biodegradable piezoelectric polymers: recent advancements in materials and applications. *Adv. Healthcare Mater.* **12**, 2300318 (2023).

4. Ya. Yu, F. Narita. Evaluation of electromechanical properties and conversion efficiency of piezoelectric nanocomposites with Carbon-Fiber-Reinforced polymer electrodes for stress sensing and energy harvesting. *Polymers* **13** (18), 3184 (2021).
5. J. Wu, Y. Fu, G.-H. Hu, S. Wang, C. Xiong. Effect of stretching on crystalline structure, ferroelectric and piezoelectric properties of solution-cast nylon-11 films. *Polymers* **13**, 2037 (2021).
6. J. Sun, H. Guo, G.N. Schädli, K. Tu, S. Schär, F. Schwarze, I. Burgert. Enhanced mechanical energy conversion with selectively decayed wood. *Sci. Advan.* **7** (11), eabd9138 (2021).
7. E.J. Curry, K. Ke, M.T. Chorsi, K.S. Wrobel, A.N. Miller, A. Patel, I. Kim, J. Feng, L. Yue, Q. Wu, C.L. Kuo, K.W. Lo, C.T. Laurencin, H. Iles, P.K. Purohit, T.D. Nguyen. Biodegradable piezoelectric force sensor. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **115** (5), 909 (2018).
8. J. Zhu, L. Jia, R. Huang. Electrospinning poly(l-lactic acid) piezoelectric ordered porous nanofibers for strain sensing and energy harvesting. *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* **28** (16), 12080 (2017).
9. R.M. Balabai, A.G. Solomenko, T.M. Radchenko, V.A. Tarenko. Functionalization of quasi-two-dimensional materials: Chemical and strain-induced modifications. *Progr. Phys. Metals* **23**, 147 (2022).
10. R.M. Balabai, V.M. Zadorozhnyi. Ab initio study of the piezoelectric effects of the 2D semiconductors of IV group monochalcogenides (GeSe, GeS). *Mol. Cryst. Liq. Crystals* **765**, 97 (2023).

Одержано 27.01.24

V.M. Zadorozhnyi, R.M. Balabai, O.O. Bondarenko

PIEZOELECTRIC RESPONSE OF α -FORM POLY(L-LACTIC ACID) TO MECHANICALLY STRESSED STATE

Here, the piezoelectric effects in a polymer (L-lactic acid) under a mechanical action are studied by methods of the density functional theory and first-principles pseudopotential based on own program code. The spatial distributions of the valence electron density, electronic state density, Coulomb potentials in different directions of the PLLA polymer fragment and charge states of its individual atoms are calculated. It is found that only one fragment of the polymer chain allows us to determine the nature of the charge polarization of valence electrons and ions under a mechanical deformation.

Keywords: piezoelectric effects, polymer (L-lactic acid), compression, bending, twisting, density functional theory, first-principle calculations.