Математическое моделирование ВЧ-плазменной модификации сверхвысокомолекулярного полиэтилена [[1]](#footnote-1)\*)

1Желтухин В.С., 2Абдуллин И.Ш., 1Некрасов И.К., 2Сагитова Ф.Р.

1Казанский (Приволжский) федеральный университет), vzheltuk@kpfu.ru
2ООО «Плазма-ВСТ», plasma.vst@gmail.com

Рассмотрена молекулярно-динамическая модель модификации поверхности СВМПЭ потоком ионов Ar, генерируемых ВЧ емкостным разрядом в динамическом вакууме. Под динамическим вакуумом понимается средний вакуум с непрерывным продувом газа в диапазоне давлений *p*=13.3−133 Па и расходом газа *G*=0.01−0.25 г/с.

Характеристики плазмы ВЧ-разряда в динамическом вакууме отличаются от свойств разряда без продува газа: степень ионизации 10-5–10-4, концентрация электронов *ne*=1015–1018 1/м3, электронная температура *Te*=1–4 эВ, температура атомов и ионов 0,03–0,06 эВ. Образец, помещенный в поток плазмы ВЧЕ-разряда в динамическом вакууме, подвергается воздействию потока ионов с энергией 70–100 эВ и плотностью ионного тока 0,1–3 А/м2 [1].

Модель взаимодействия ионов с полимерным материалом описывается системой уравнений классической молекулярной механики

 $\frac{dv\_{k}}{dt}=\frac{1}{m\_{k}}\sum\_{k\ne l}^{}F\_{kl}, \frac{dr\_{k}}{dt}=v\_{k}, F\_{kl}=-grad U\_{kl},$ (1)

 $v\_{k}\left(0\right)=0, r\_{k}\left(0\right)=r\_{k0}, k,l=1,…,N.$ (2)

Здесь $v\_{k}$ – вектор скорости *k*-ой частицы, $r\_{k}$ – ее радиус-вектор, $r\_{k0}$ – координаты начального положения частиц, $F\_{kl}$ – сила, действующая на *k*-ую частицу со стороны *l*-ой частицы, $m\_{k}$ – масса *k*-й частицы, *t* – время, $U\_{kl}$ – потенциал взаимодействия частиц с индексами *k* и *l, N* – количество атомов в модели.

Модель реализована с помощью универсального программного пакета молекулярно-динамического моделирования LAMMPS. Моделировалась ионная бомбардировка кристаллита СВМПЭ размером 9х7.6х75 Å с энергиями ионов 10, 50 и 100 эВ. Силовое поле моделировалось с помощью потенциала AIREBO-M.

В результате моделирования установлено, что при энергии иона до 10 эВ значительных изменений в структуре полиэтилена не происходит. При энергиях 50 эВ и 100 эВ атомы аргона проникают внутрь материала на глубину 1.8 и 2.8 нм, соответственно. Вдоль траектории движения атома происходит разрыв молекулярных цепочек, вследствие чего образуются короткие алкеновые радикалы. С поверхности полиэтилена эмиттируются отдельные атомы углерода и водорода, а также короткие молекулы углеводородов.

Результаты экспериментов показали, что активные алкеновые радикалы реагируют с кислородом воздуха при выносе обработанных образцов из вакуумной камеры после ВЧ-плазменной обработки и на поверхности СВМПЭ волокон возникают функциональные карбонильные группы (–С=О), вследствие чего поверхность СВМПЭ приобретает гидрофильные свойства [2].

Литература

1. Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Кашапов Н.Ф. Высокочастотная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях: Теория и практика применения. - Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2000.
2. Kudinov V. V. et al. // Inorganic Materials: Applied Research. – 2012. – Т. 3. – №. 3. – С. 257-260.
1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/L/Pt/en/HF-Zheltukhin_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)