

ВЧ-ПЛАЗМЕННАЯ МОДИФИКАЦИЯ НАПОЛНИТЕЛЕЙ ДЛЯ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ ^{*)}

³Абдуллин И.Ш., ^{1,2}Желтухин В.С., ¹Некрасов И.К., ²Сагитова Ф.Р.

¹ФГАОУ ВО Казанский (Приволжский) федеральный университет,
igor05071997@mail.ru

²ФГБОУ ВО Казанский национальный исследовательский технологический университет, farida_sagitova@mail.ru

³ООО «Плазма-ВСТ», plasma-vst@gmail.com

Обработка углеродных, арамидных и стеклянных волокон, а также волокон на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ), используемых в качестве наполнителей полимерных композиционных материалов, потоком низкоэнергетичных (до 100 эВ) ионов, в ВЧ-разряде пониженного давления (13.3-133 Па) [1], существенно улучшает их прочностные и адгезионные характеристики, а также композитов на их основе.

Поверхность материала модифицируется за счет воздействия потока низкоэнергетичных (30-100 эВ) ионов с плотности ионного тока 0,3-1,5 А/м². Результаты экспериментов показали, что активные группы на поверхности волокон возникают либо непосредственно в плазме при обработке в воздухе, либо после выноса образцов из вакуумной камеры, если обработка проводилась в среде аргона [2].

Для детального исследования механизма модификации поверхности полиэтилена в ВЧ-плазме пониженного давления создана математическая модель на основе метода молекулярной динамики. Модель взаимодействия ионов с полимерным материалом описывается системой уравнений классической молекулярной механики

$$\frac{d\mathbf{v}_k}{dt} = \frac{1}{m_k} \sum_{l \neq k} \mathbf{F}_{kl}, \quad \frac{d\mathbf{r}_k}{dt} = \mathbf{v}_k, \quad \mathbf{F}_{kl} = -\text{grad } U_{kl} \quad (1)$$

$$\mathbf{v}_k(0) = 0, \quad \mathbf{r}_k(0) = \mathbf{r}_{k0}, \quad k, l = 1, \dots, N. \quad (2)$$

Здесь $\mathbf{v}_k$ – вектор скорости k -ой частицы, $\mathbf{r}_k$ – ее радиус-вектор, $\mathbf{r}_{k0}$ – координаты начального положения частиц, $\mathbf{F}_{kl}$ – 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 9x7.6x75 Å с энергиями ионов 10, 50 и 100 эВ. Силовое поле моделировалось с помощью потенциалов Lennard-Jones 6-12, AIREBO-M и REAXFF.

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.

Литература

- [1]. Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Кашапов Н.Ф. (2000) *Высокочастотная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях: Теория и практика применения*. - Казань: Изд-во Казан. ун-та.
- [2]. Abdullin I.S. et al. (2023) *High Energy Chemistry* 57, Suppl 1. P. 132-136.

^{*)} DOI – тезисы на английском