Молекулярно-динамическое Моделирование ионной обработки в ВЧ-плазме пониженного давления высокомолекулярных материалов случайно-неоднородной структуры  
 (на примере полиэтилена)

В.С. Желтухин, И.А. Бородаев

Казанский национальный исследовательский технологический университет

Стремительно развивающаяся отрасль нанотехнологий предъявляет с каждым годом все более высокие требования к свойствам органических материалов, что делает задачу придания им качественно новых свойств актуальной. Одним из наиболее эффективных способов модификации наноструктур материалов является их обработка в струе плазмы высокочастотного (ВЧ) разряда пониженного давления (1,33-133 Па) [1].

Для детального исследования процесса проникновения атомов плазмообразующего газа в образец при обработке полиэтилена в ВЧ-плазме пониженного давления создана математическая модель на основе метода молекулярной динамики.

Моделирование проводится для элементарной ячейки полимера, размеры которой составляют 10х10х10 нм3, что подобрано, исходя из структуры полимера. Такой размер элементарной ячейки соответствует возможному размеру области кристаллической фазы полиэтилена. Степень кристалличности в ячейке принимается за 100%. Структура полиэтилена представляется в виде строго упорядоченных атомов углерода и водорода.

Математическая модель взаимодействия плазменного иона с образцом полиэтилена описывается системой уравнений движения каждой из взаимодействующих частиц:



Здесь **vi, ri** - вектор скорости и радиус-вектор *i*-й частицы (атома или иона), **ri0** - координаты начального положения частиц, **Fi,j** - сила, действующая на *i*-ую частицу со стороны *j*-й частицы, *mi* - масса *i*-й частицы, *t* - время, *N* - количество атомов в элементарной ячейке. Частица с индексом *N*+1 соответствует налетающему иону плазмообразующего газа. Силы взаимодействия атомов **Fi,j** рассчитываются с помощью потенциалов: **Fi,j** = - grad *U*i,j. Здесь *U*i,j рассчитывается как сумма потенциалов валентных и невалентных взаимодействий.

Наиболее употребительные потенциальные функции, применяемые в молекулярно-динамических расчетах и итерационный процесс вычисления классических траекторий отдельных атомов и полимерных цепей приведены в работе [2].

Такая механистическая модель далека от идеала, но она достаточно адекватно описывает движения молекулярных структур, если достаточно точно вычислены силовые константы и шаг интегрирования не слишком велик [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты №№ 13-01-00908, 14-01-00755), Минобрнауки РФ (госзадание № 2196 от 01.02.2014).

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.технол. ун-та, 2000.
2. Холмуродов Х.Т., Алтайский М.В., Дардин Т., Филатов Ф.П. // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2003. 34. №3. С.474-515.
3. Желтухин В.С., Бородаев И.А., Ананьев К.В. //Материалы Десятой Международной конференции «Сеточные методы для краевых задач и приложения». Казань. 2014. C. 285-290.