Иследование взаимодействия низкоэнергетичного потока ионов со сверхвысокомолекулярным полиэтиленом [[1]](#footnote-1)\*)

1,2Желтухин В.С., 2Бородаев И.А.

1Казанский национальный исследовательский технологический университет, [vzheltukhin@gmail.com](mailto:vzheltukhin@gmail.com)   
2Казанский (Приволжский) федеральный университет, [igor-borodaev@yandex.ru](mailto:igor-borodaev@yandex.ru)

Сверхвысокомолекулярный полиэтилен (СВМПЭ) широко используется в качестве наполнителя высокопрочных композиционных материалов. Для увеличения адгезии наполнителя и матрицы СВМПЭ модифицируют различными методами, в том числе обработкой в ВЧ плазме пониженного давления (13,3-133 Па) [1-2]. Основным воздействующим фактором в этом процессе является бомбардировка ионами плазмообразующего газа (Ar), обладающими энергией 50-100 эВ при плотности ионного тока на поверхность 0,5-1,0 А/м2 [3]. Для более детального исследования механизма взаимодействия слабоинтенсивного потока низкоэнергетичных ионов с поверхностью полимерных материалов, разработана молекулярно-динамическая модель.

В связи с явно выраженной анизотропией кристаллита СВМПЭ рассматривалась элементарная ячейка размером 9х11х17,6 нм3. Использована полноатомная модель. Взаимодействие ионов с полиэтиленом в данной модели описывается системой уравнений движения:

Кулоновское взаимодействие налетающей частицы с атомами ПЭ в расчете не учитывалось. Силовое поле частиц в полиэтилене моделировалось, используя парный потенциал Леннард-Джонса, и многочастичные потенциалы ReaxxFF и AIREBO-M. Для решения системы уравнений движения частиц использован алгоритм Верле. Численное интегрирование проводилось с шагом по времени фc в пакете LAMMPS. Визуализация результатов расчета проводилась в пакете VMD.

Наиболее реалистичные результаты получены при использовании потенциала AIREBO-М. Глубина проникновения быстрого атома Аr в кристаллит ПЭ составляет *h*=0,85 нм при энергии *W*=10 эВ, *h*=1,81 нм при *W*=50 эВ и *h*=2,81 нм при *W*=100 эВ. При энергии бомбардирующего атома *W*=10 эВ существенных изменений структуры не происходит. При *W*=50 и 100 эВ в центре мишени образуется разрежение, молекулы полиэтилена в окрестности трека разрываются, образуются короткие алкеновые радикалы. Температура атомов в этой области существенно повышается, что качественно совпадает с моделью термоупругого пика.

Работа поддержана РНФ, проект № 19-71-10055 и совместным грантом РФФИ и АН РТ, проект 18-48-160056.

Литература

1. Kudinov, V.V. et al. The effect of the bonding between the HPPE fiber and the matrix on the properties and the fracture mode of the polymeric composite materials // 18th Intern. Conf. on Composite Materials, ICCM-18, Jeju Island, S. Korea.– August 21-26, 2011. - Seoul: Ed. by Korean society of composite materials, 2011. - Paper AF 253 (USB).
2. Сергеева Е.А., и др. Модификация синтетических волокнистых материалов и изделий неравновесной низкотемпературной плазмой. Ч. 1. Теория, модели, методы. – Казань: Изд-во Казан. гос. технол. ун-та, 2011. - 252 с.
3. Абдуллин И.Ш., и др. Высокочастотная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях: Теория и практика применения. – Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2000. – 348 с.

1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLVII/Cm/en/KG-Zheltukhin_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)