

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧНОЙ ИОННОЙ ОБРАБОТКИ ПОЛИЭТИЛЕНА

A MATHEMATICAL MODEL OF LOW ENERGY ION TREATMENT OF POLYETHYLENE

В.С. Желтухин, И.А. Бородаев, А.А. Шахыров

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Россия, ул. К.Маркса, 68, Казань, vzheltukhin@gmail.com

Для изучения низкоэнергетичной (до 100 эВ) ионной обработки полиэтилена разработана молекулярно-динамическая модель.

Molecular dynamics simulations were used to study low energy (up to 100 eV) ion treatment of polyethylene surface.

Воздействие плазмы высокочастотного (ВЧ) разряда пониженного (1,33-133 Па) давления является эффективным методом гидрофилизации поверхности полиэтилена [1]. Поверхность материала модифицируется за счет воздействия потока низкоэнергетичных (30-100 эВ) ионов с плотности ионного тока 0,3-1,5 А/м². Для детального исследования механизма модификации поверхности полиэтилена в ВЧ-плазме пониженного давления создана математическая модель на основе метода молекулярной динамики [2].

Модель реализована с помощью пакета LAMMPS [3]. Использована модель объединенного атома, в которой звено -CH₂- рассматривается как одна частица. Межатомное силовое поле в полиэтилене моделировалось, используя потенциал Дрейдинга [4-6]. Взаимодействие атомов аргона с макромолекулами полиэтилена моделировалось с помощью потенциала Леннард-Джонса [7, 8]. 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.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 15-41-02672.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kudinov, V.V., Korneeva, N.V., and Abdullin, I.Sh. *18th Intern. Conf. on Composite Materials, ICCM-18*, Jeju Island, S. Korea August 21-26, 2011.
2. Rapaport, D. C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, 2004.
3. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. – URL: <http://lammmps.sandia.gov/>
4. Jorgensen, W. L., Madura, J. D., and Swenson, C. J. *J. Am. Chem. Soc.* **106** (1984) 813.
5. Mayo, S.L., Olafson, B.D., and W.A. Goddard III *J. Phys. Chem.* **94** (1990), 8897.
6. Martin, M.G. and Siepmann, J.I. *J. Phys. Chem. B* **102** (1998) 2569
7. Sumpter, B. G., Noid, D. W., and Wunderlich, B. *Macromolecules* **25** (1992) 7247.
8. Rozas, R. and Kraska, T. *J. Phys. Chem. C*, **111** 43 (2007) 15784