

УДК 519.958:537.525.7:621.762

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ С ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫМИ ВОЛОКНИСТЫМИ МАТЕРИАЛАМИ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Г.Н. Кулевцов, В.С. Желтухин, И.Ш. Абдуллин, И.В. Красина

Аннотация

С помощью метода Монте-Карло исследуется глубина проникновения ионов внутрь высокомолекулярного волокнистого материала типа натуральной кожи и меха при обработке его высокочастотной плазмой пониженного давления.

Введение

Одним из неисследованных вопросов взаимодействия неравновесной низкотемпературной плазмы с высокомолекулярными волокнистыми материалами (ВВМ), типичными представителями которых являются натуральная кожа, мех, ткани, является выяснение причина изменения свойств материала во всем объеме, так как плазма внутрь материала согласно существующим представлениям не проникает. В связи с этим нами предпринята попытка исследовать степень проникновения вглубь материала низкоэнергетических ионов, бомбардировка которыми является основной причиной модификации свойств ВВМ в высокочастотной (ВЧ) плазме пониженного давления [1–3].

Детальное исследование взаимодействия частиц высокой энергии с поверхностью элементов структуры ВВМ требует привлечения методов молекулярной динамики, что не входило в задачи настоящей работы. Поэтому процесс моделирования заключался в отслеживании траекторий бомбардирующих частиц и фиксации глубины их проникновения внутрь модели ВВМ.

Для исследования процесса инъекции заряженных частиц в капиллярно-пористый материал создана математическая модель на основе метода Монте-Карло.

Моделирование осуществлялось в два этапа. На первом этапе создавалась пространственно-геометрическая модель структуры ВВМ. На втором этапе моделировался процесс тонной бомбардировки.

1. Построение пространственно-геометрической модели

Самой малой по размеру из исследованных ВВМ является волос меха, его размеры составляют 20–50 мкм, что намного больше диаметра волокнистых элементов его внутренней структуры (от 3 до 200 нм). Размеры образцов кожи (~ 1 см, или 10^7 нм, по толщине) и элементов структуры (от 3.5 нм до 200 мкм) основного белка — коллагена — тем более несопоставимы.

Рассмотрим для определенности модель ВВМ на основе коллагена. Поскольку характеристики плазмы и свойства обрабатываемого материала однородны вдоль поверхности, то достаточно рассмотреть небольшую часть образца материала, подвергаемого обработке ВЧ-плазмой пониженного давления. Такую часть образца

называют элементарной ячейкой. В качестве элементарной ячейки образца материала выбирался параллелепипед размером $20 \times 20 \times 200$ (в условных единицах). В качестве условной единицы длины принимался средний диаметр элемента структуры.

Волокнистая структура материала моделировалась системой N случайно расположенных цилиндрических тел заданного диаметра, проходящих в заданном (случайном) направлении сквозь элементарную ячейку в трехмерной декартовой системе координат. Каждый цилиндр характеризовался группой из восьми чисел $(x_k, y_k, z_k, D_k, \alpha_k, \beta_k, \gamma_k, \xi_k)$, где k – порядковый номер цилиндра, x_k, y_k, z_k – координаты точки, через которую проходит ось цилиндра, D_k – его диаметр, $\alpha_k, \beta_k, \gamma_k$ – углы, образуемые осью цилиндра с положительными направлениями осей координат, ξ_k – максимальное значение параметра ξ при параметрическом задании пространственной прямой в виде

$$x = x_k + \xi \cos \alpha_k, \quad y = y_k + \xi \cos \beta_k, \quad z = z_k + \xi \cos \gamma_k, \quad 0 \leq \xi \leq \xi_k, \quad (1)$$

где k – номер элемента структуры, $k = 1, 2, \dots, N$.

Вначале с помощью генератора случайных чисел вычислялись пары чисел (x_k, y_k) , равномерно распределенных по поверхности элементарной ячейки на $z = 0$. Каждой паре чисел сопоставлялся центр элемента структуры на верхней поверхности ячейки, так чтобы его координатами были $(x_k, y_k, 0)$. Диаметр D_k каждого элемента структуры задавался с помощью генератора нормально распределенных случайных чисел. Определялась общая площадь поперечных сечений заданных элементов структуры, делением которой на площадь сечения элементарной ячейки находилась условная пористость модели материала P_{usl} .

Одновременно с координатами центров и диаметрами элементов структуры случайным образом определялось пространственное направление элемента структуры, задаваемое вектором направления $\mathbf{I}_k = (\cos \alpha_k, \cos \beta_k, \cos \gamma_k)$. Углы $\alpha_k, \beta_k, \gamma_k$ вычислялись с помощью генератора случайных чисел в соответствии с нормальным законом распределения.

Процесс размещения цилиндрических моделей элементов структуры прекращался по достижении заданного значения P_{usl} .

2. Моделирование процесса взаимодействия плазмы с ВВМ

Процесс моделирования бомбардировки поверхности ВВМ ионами заключался в следующем. Задавались координаты падающих частиц (X, Y, Z) , причем значения X и Y вычислялись с помощью генератора случайных чисел в соответствии с равномерным законом распределения, а значение Z полагалось равным нулю (частица падает на верхнюю грань элементарной ячейки, которая лежит в плоскости $z = 0$). Затем определялась координата Z_c , в которой траектория падающей частицы пересекалась с моделью элемента структуры ВВМ.

Для этого производился последовательный перебор моделей элементов структуры и проверялось выполнение условия:

$$[X - (x_k + \xi \cos \alpha_k)]^2 + [Y - (y_k + \xi \cos \beta_k)]^2 \leq \frac{D_k^2}{4}, \quad (2)$$

$$0 \leq \xi \leq \xi_k, \quad k = 1, 2, \dots, N.$$

Выполнение этого условия означает, что траектория налетающей частицы пересекалась с одним из элементов структуры. По значению ξ , при котором неравенство (2) превращается в равенство, с помощью соотношений (1) определялась координата $Z = Z_c$ – глубина, на которой произошло столкновение частицы с поверхностью

элемента структуры. Поскольку таких пересечений априори может быть несколько, то из них выбиралось наименьшее значение. Это значение принималось в качестве глубины проникновения иона внутрь ВВМ.

При столкновении заряженной частицы с поверхностью элемента структуры ВВМ возможны несколько взаимоисключающих событий:

1) отражение в некотором направлении, если в точке столкновения на поверхности находится аминокислотный остаток либо адсорбированная молекула одного знака с налетающей частицей. При этом возможна потеря части энергии налетающей частицы и возбуждение поверхностных атомов элемента структуры;

2) отражение заряженной частицы от нейтрального участка поверхности, если угол падения достаточно мал. При этом в месте столкновения возможно наведение заряда одинакового знака;

3) рекомбинация иона или электрона, если на поверхности находятся аминокислотный остаток или адсорбированная молекула, заряженные противоположно заряду налетающей частицы;

4) перезарядка, когда налетающий ион забирает электрон у поверхностного атома, а поверхностный атом ионизируется. При этом ион превращается в атом, обладающий высокой кинетической энергией, который может потом отразиться от поверхности или проникнуть вглубь ее;

5) проникновение иона внутрь материала в более мелкую пору.

В последних двух случаях принималось, что частица остается в месте столкновения с поверхностью элемента структуры ВВМ. В связи с недостаточностью информации об особенностях взаимодействия ионов и электронов с ВВМ в процессе бомбардировки принималось, что перечисленные события равновероятны.

Для достижения статистической достоверности результатов при моделировании рассматривалось взаимодействие с ВВМ не менее 10 000 ионов, обладающих энергией 70–100 эВ. Подсчитывалось количество частиц попадающих на определенную глубину, после чего строилась гистограмма их распределения.

В результате проведенных расчетов установлено, что распределение ионов по глубине ВВМ близко к экспоненциальному. Около 10% ионов достигают координат $Z_c \geq 150$.

С учетом размеров пор исследуемых ВВМ [2, 3] это означает, что ионы плазмы могут проникать в открытые микropоры кожи на глубину $\sim 150-200$ мкм, внутрь волоса меха – на $\sim 0.15-0.2$ мкм. Следовательно, бомбардировка ВВМ в процессе ВЧ плазменной обработки низкоэнергетичными ионами вряд ли может являться непосредственной причиной объемной модификации этих материалов, хотя вполне может инициировать иные механизмы воздействия на их внутреннюю структуру.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 07-01-00674а).

Summary

G.N. Kulevsov, V.S. Zheltukhin, I.Sh. Abdullin, I.V. Krasina. Simulation of interaction between low temperature plasmas and high molecular fibrous materials.

Penetration of ions into high molecular fibrous material like natural leather or fur at low pressure RF plasma processing was studied.

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. – 348 с.

2. *Абдуллин И.Ш., Абуталипова Л.Н., Желтухин В.С., Красина И.В.* Высоочастотная плазменная обработка в динамическом вакууме капиллярно-пористых материалов. Теория и практика применения. – Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2004. – 348 с.
3. *Вознесенский Э.Ф., Дресвянников А.Ф., Красина И.В., Кулевцов Г.Н.* Структурные изменения кожевенных материалов под воздействием высокочастотной плазмы пониженного давления // Вестн. Казан. технол. ун-та. – Казань: КГТУ, 2005. – № 2, Ч. II. – С. 265–269.

Поступила в редакцию
02.11.07

Кулевцов Геннадий Николаевич – кандидат технических наук, доцент кафедры плазмохимических и нанотехнологий высокомолекулярных материалов Казанского государственного технологического университета.

E-mail: *tkim1@kstu.ru*

Желтухин Виктор Семенович – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой математической статистики Казанского государственного университета.

E-mail: *victor.zheltukin@ksu.ru*

Абдуллин Ильдар Шаукатович – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой плазмохимических и нанотехнологий высокомолекулярных материалов Казанского государственного технологического университета.

E-mail: *abdullin_i@kstu.ru*

Красина Ирина Владимировна – доктор технических наук, профессор кафедры методологии инженерной деятельности Казанского государственного технологического университета.