

Э. Ф. Вознесенский, И. Ш. Абдуллин, И. В. Красина,
А. Д. Дмитриева, А. Г. Белозеров

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ФОКУСИРОВКИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧНОГО ИОННОГО ПОТОКА НА ПОВЕРХНОСТИ КЕРАТИНСОДЕРЖАЩЕГО МАТЕРИАЛА ПРИ МОДИФИКАЦИИ В ВЫСОКОЧАСТОТНОМ ГАЗОВОМ РАЗРЯДЕ

Ключевые слова: модификация, высокочастотный газовый разряд, шерсть, волос, кутикула, травление, модель, ионная бомбардировка, рельеф, траектория.

Статья посвящена моделированию распределения низкоэнергетических ионов на поверхности материала при модификации шерстяных волокон в высокочастотном газовом разряде. Рассчитана траектория низкоэнергетических ионов к рельефной поверхности шерстяного волокна. Установлено, что ионный поток фокусируется в окрестности выступов кутикулы, что приводит к повышению плотности ионного потока на выступе на 100–150 %.

Keywords: modification, radio-frequency discharge, wool, hair, cuticle, etching, model, ionic bombardment, relief, trajectory.

Article describes the model of distribution of low-energetic ions on a material surface during modification of woollen fibres in the radio-frequency gas discharge. The trajectory of low-energetic ions to a relief surface of a woollen fibre is calculated. It is established, that the ionic stream is focused in a vicinity of ledges of cuticle, that leads to increase of density of an ionic stream on a ledge up to 100-150 %.

Введение

Модификация шерстяных волокон в высокочастотном газовом разряде приводит к улучшению технологических свойств: улучшается их окрашиваемость, ускоряется осветление и др. Эксперименты проводились на образцах волосного покрова овчины. Обработка проводилась в высокочастотном газовом разряде при частоте 13,56 МГц, давлении 26,6 Па, расходе аргона 0,04 г/с, плотности ионного потока 0,3–0,6 А/м², энергии ионов 30–90 эВ.

Изменения в структуре кутикулы волоса под действием модификации в высокочастотном газовом разряде наглядно демонстрируют данные РЭМ [1–3]. При рассмотрении образцов исходного и модифицированного с возрастающей интенсивностью модификации наблюдается накопление дефектов кутикулы. Данные дефекты затрагивают, преимущественно, выступающие края кутикулярных клеток и проявляются:

- 1 режим – в отслоении от матрикса и небольшом повреждении верхнего края кутикулярных клеток;
- 2 режим – в значительном отслоении и утонении верхних краев кутикулярных клеток;
- 3 режим – верхние края кутикулы покрыты сколами и отогнуты наружу.

После обработки в аргоновой плазме в ряде режимов наблюдается нарушение целостности кутикулы, происходит удаление эпикутикулы и большей части экзокутикулы.

Экспериментальные исследования влияния газоразрядной модификации волосного покрова на проведение жидкостных обработок свидетельствуют о повышении активности и проницаемости волоса для обрабатывающих сред.

На рис. 1 представлена схема продольного строения кутикулы образцов, показано деление клетки на экзо и эндокутикулу.

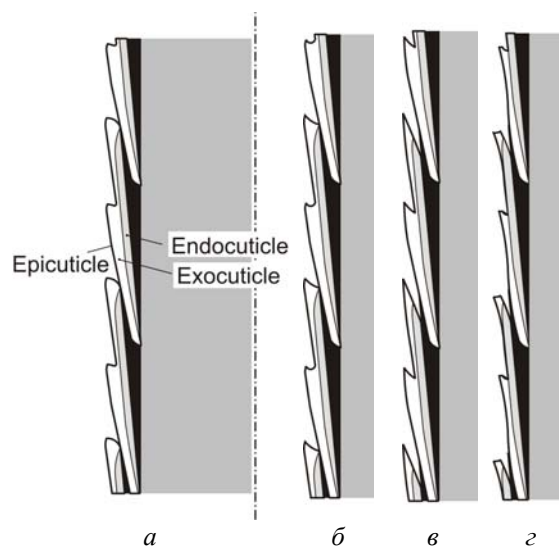


Рис. 1 - Схема продольного строения кутикулы волосного покрова меха: а – исходный образец; б – 1 режим; в – 2 режим; г – 3 режим

Как видно из схем (рис. 1), кутикула волокна подвергается существенным изменениям при модификации в высокочастотном разряде пониженного давления. Повышение проницаемости волокон связано с удалением естественных инертных барьеров (эпи- и экзокутикулы), повышением доступности кутикулярного матрикса. Данные изменения связаны с ионным травлением поверхности, при этом воздействие низкоэнергетического ионного потока фокусируется в области выступов кутикулы.

2. Ход эксперимента

Для установления механизма воздействия потока низкоэнергетических ионов, формируемого в ВЧ разряде пониженного давления, на волосной покров меха разработана математическая модель

низкоэнергетичной ионной бомбардировки поверхности.

На первом этапе моделирования построена пространственная геометрическая модель волоса. Стержень волокна моделировался эллиптическим цилиндром с соотношением полуосей 2:3 и максимальным поперечным размером 40 мкм. Кутикула построена с помощью поверхностей, описываемых тригонометрическими функциями (формула (1))

$$\begin{cases} z = h \cdot (\cos(t) + 1); \\ x = a / b \cdot z \cdot \operatorname{tg}(\alpha) \cdot \sin(t); \\ y = z \cdot \operatorname{tg}(\alpha) \cdot \cos(t), \end{cases} \quad (1)$$

где t – угловой параметр; h – длина клетки; a, b – полуоси эллипса; α – угол наклона клетки к оси волокна.

Клетки кутикулы представляют собой набор поверхностей с заданным шагом по высоте и углу поворота вокруг оси волокна (90°) (рис. 2). Задается высота верхнего и нижнего сечения.

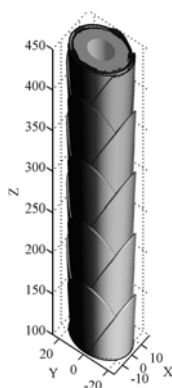


Рис. 2 - Пространственная геометрическая модель кутикулы волоса

На втором этапе моделирования проведен теоретический эксперимент исследования влияния геометрии кутикулы на траекторию бомбардирующих низкоэнергетичных ионов при ВЧ плазменной модификации волосяного покрова меховой овчины. За основу взята модель взаимодействия низкоэнергетичного потока ионов с рельефной поверхностью плоского материала [4]. На моделируемой поверхности задано равномерное распределение отрицательного заряда – $25 e^-$ на 1 мкм^2 .

Определены координаты точек на расстоянии 70 мкм от поверхности геометрической модели – стартовые положения частиц. Заряд налетающей частицы – e^+ . С момента старта на частицу действуют электростатические силы, распределенного отрицательного потенциала мишени. Траектория частицы определяется суперпозицией действующих на нее сил – формула (2).

$$\vec{F} = \sum_i^N k \frac{q_1 \cdot q_i}{r^2} \cdot \vec{e}, \quad (2)$$

где q_1 – положительный заряд налетающего иона, q_i – отрицательный заряд одной из N элементарных площадок мишени, $\vec{e}$ – единичный вектор,

направленный от заряда q_1 к заряду q_i , k – коэффициент пропорциональности.

В ходе моделирования стартовая скорость частиц принята равной нулю. Траектории движения регулируются электростатическим воздействием мишени. Рассчитанные траектории движения частиц к заряженной поверхности волоса приведены на рис. 3.

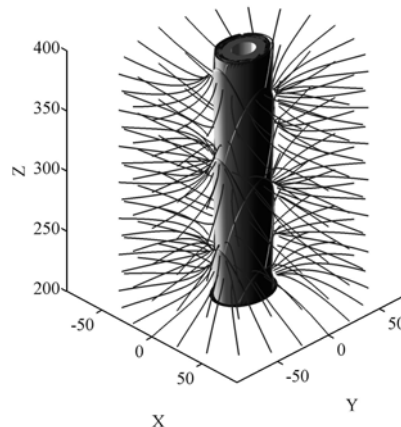


Рис. 3 - Траектории частиц к заряженной поверхности волоса

Как видно из рис. 3 искривление всех траекторий наблюдается в области выступающих краев кутикулярных клеток.

Для численной оценки процесса проведен теоретический эксперимент на основе метода Монте-Карло. Моделировалось движение к заряженной поверхности геометрической модели 50 000 ионов, фиксировалось конечное положение траектории. Поверхность геометрической модели маркировалась параметром плотности ионного потока (рис. 4).

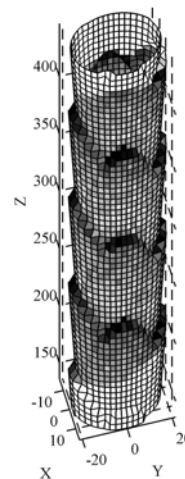


Рис. 4 - Распределение плотности ионного потока по поверхности волоса

3. Результаты и обсуждение

Как видно из рис. 4, плотность низкоэнергетичного ионного потока на поверхность волоса концентрируется в области выступающих краев кутикулярных клеток, что подтверждает экспериментально установленный механизм травления и истончения выступов кутикулы. При этом распределение плотности ионов на поверхности модели варьируется от 0 до 172 усл. ед. на

элементарную площадку, для выступов кутикулы характерна плотность распределения ионов от 40–50 усл. ед. до 172 усл. ед. на элементарную площадку; на оставшейся поверхности модели ионы распределяются с плотностью от 0 до 50 усл. ед..

На рис. 5 приведена гистограмма распределения плотности ионов на поверхности образца, что позволяет определить плотность ионного потока на максимальной доле поверхности модели и в окрестности выступов.

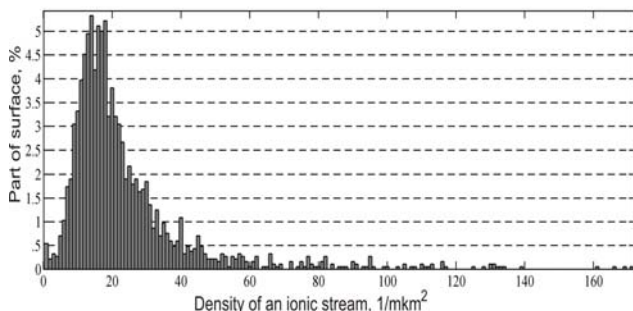


Рис. 5 - Гистограммы распределения ионов на элементарной площадке поверхности

4. Выводы

Таким образом, в ходе моделирования установлено, что распределение низкоэнергетичного ионного потока на поверхности в ходе ВЧ газоразрядной модификации волосяного покрова меха неравномерно. Ионный поток фокусируется в окрестности выступающих краев кутикулы волоса, что составляет 25–30 % суммарной обрабатываемой поверхности, при этом плотность ионного потока в окрестности выступов в 1,5–2 раза выше (около 0,55–1,12 А/м²). Поверхность непосредственно выступов составляет около 4 % суммарной поверхности модели, плотность ионного потока на выступе превышает среднюю плотность ионного потока в 2,5–3,5 раза (около 0,93–1,68 А/м²).

Значительный рост плотности ионного потока при неизменной энергии ионов (30–90 эВ) обеспечивает избирательное воздействие ВЧ разряда на выступы кутикулы, благодаря чему реализуются процессы травления, также возможной причиной изгиба краев кутикулы является наличие эффектов локализованного термического воздействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы по соглашению 14.B37.21.2061 от 14 ноября 2012г.

Литература

1. Абдуллин, И.Ш. Модификация поверхности волокон шерсти в низкотемпературной плазме ВЧ разряда / И.Ш. Абдуллин и др. // Известия высших учебных заведений. Технология легкой промышленности. – 2010. – № 2. – С. 11–14.
2. Вознесенский, Э.Ф. Исследование эффектов ВЧ-плазменной модификации волосяного покрова меха методом СЗМ-микроскопии / Э.Ф. Вознесенский, Ф.С. Шарифуллин, И.Ш. Абдуллин, В.С. Желтухин, И.В. Красина // Вестник Казанского технологического университета. – 2011, № 15. – С. 328–331.
3. Вознесенский, Э.Ф. Структурные аспекты модификации натурального кератинсодержащего материала в плазме ВЧ-разряда пониженного давления / Э.Ф. Вознесенский, Ф.С. Шарифуллин, И.В. Красина, И.Ш. Абдуллин // Вестник Казанского технологического университета. – 2009, № 5. – С. 426–429.
4. Сагбиев, И.Р. Струйный высокочастотный разряд пониженного давления в процессах модификации поверхностных нанослоев конструкционных материалов: дис. ...докт. техн. наук – И.Р. Сагбиев. – Казань., 2009. – 332 с.

© Э. Ф. Вознесенский – д-р техн. наук, доц. каф. плазмохимических и нанотехнологий высокомолекулярных материалов КНИТУ; И. Ш. Абдуллин – д-р техн. наук, проф., зав. каф. плазмохимических и нанотехнологий высокомолекулярных материалов КНИТУ, abdullin_i@kstu.ru; И. В. Красина – д-р техн. наук, зав. каф. технологии химических, натуральных волокон и изделий КНИТУ, irina_krasina@mail.ru; А. Д. Дмитриева – магистр Ивановского госуд. химико-технол. ун-та; А. Г. Белозеров – магистр Ивановского госуд. химико-технол. ун-та.