

Для идентификации химических связей изучалась тонкая структура спектров РФЭС в области энергетических уровней C_{1s} , Mo_{3d} снятых на глубинах $\sim 12,5$ нм, $\sim 22,5$ нм, $\sim 42,5$ нм. Послойное ионное травление модифицированных образцов графита нанесением Mo в условиях ассистирования ионами Mo^+ позволило на разных глубинах оценить количественное соотношение между Mo и MoO_2 , которое изменяется по всей исследуемой глубине. Наличие оксида Mo приводит к существенному затруднению при идентификации карбида из-за наложения спектральных линий.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бобрович О.Г., Ташлыков И.С., Тульев В.В. Влияние параметров ионно-ассистируемого осаждения на формирование Me/Si структур // Труды БГТУ. 2014. № 6: Физ.-мат. науки и информатика. С. 74–76.
2. Бобрович О.Г., Ташлыков И.С. Формирование на графите металлсодержащих покрытий в условиях ионного ассистирования // Взаимодействие излучений с твердым телом: материалы 5-й Междунар. конф., Минск, 6–9 окт. 2003 г., Минск, 2003. С. 326–328.
3. Deposition of metal layers on carbon assisted with the same metal's ion radiation / I. S. Tashlykov [at all.] // Surface and Coatings Technology. 1995. Vol. 74–75. P. 945–948.

УДК 519.6

С.А. Зайцев, асп. (ВГУИТ, Воронеж, Россия)

СПОСОБ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ РАДИОЛИЗА ПОЛИМЕРОВ

Одним из способов дальнейшего развития технологических процессов обработки и переработки полимеров является включение радиационного и комбинированного радиационно-термомеханического воздействий в производственные циклы. Однако реакции, протекающие в полимерных материалах при этих воздействиях, в настоящее время не достаточно теоретически обоснованы, что обуславливает необходимость их изучения в том числе и с помощью средств компьютерного моделирования. В рамках данной работы рассмотрена возможность решения данной задачи с использованием подхода имитационного моделирования, что позволяет следить за эндогенными параметрами процесса на различных этапах его функционирования. Построение пространственной модели молекулярной структуры полимеров описано авторами в работе [1].

Теоретическая часть. Внутренние параметры модели выбраны таким образом, чтобы в ходе функционирования модели можно было связать их с физическими параметрами полимера и эксплуатационными характеристиками изделий из него, в качестве которых выбраны ММР (молекулярно-массовое распределение), количество и отношение разных типов химических связей в веществе. ММР описывает распределение длин молекул в изучаемом полимере. Помимо углерод-углеродных связей в полимерных изделиях присутствуют так называемые “слабые” связи, их возникновение можно объяснить силами Ван-дер-Ваальса. Несмотря на то, что их энергетические показатели значительно слабее основных, их конечное влияние на физические свойства полимера невозможно недооценить. Так как при радиолизе обрабатываемого материала преимущественно протекают процессы деструкции полимерной матрицы, воздействие ионизирующего излучения обусловлено двумя физическими явлениями, а именно, во-первых, рассеянием частицы излучения на ядрах атомов облучаемого вещества, которое описывается формулой Резерфорда [2]:

$$d\sigma = \left(\frac{Ze^2}{2E} \right)^2 * \frac{d\Omega}{\sin^4(\theta/2)}, \quad (1)$$

где величина $d\sigma$ – дифференциальное сечение ядра для рассеивания частиц в телесный угол $d\Omega$, Ze – заряд ядра атома, E – кинетическая энергия частицы, θ – угол рассеяния.

Во-вторых, потерями энергии на ионизацию и разрыв химических связей, если частица излучения исчерпала свой ионизационный потенциал, ее необходимо исключить из модели, для решения данной задачи использована формула Бете-Блоха [3]:

$$-\left(\frac{dT}{dX} \right) = \frac{4\pi n_e z^2 e^4}{m_e v^2} \left[\ln \frac{2m_e v^2}{I} - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 - \delta - U \right], \quad (2)$$

где T – кинетическая энергия частицы, X – пройденный путь, n_e – плотность электронов в среде, v – скорость частицы, $I = (13.5Z) * 1.6 * 10^{-12}$ – средний ионизационный потенциал атомов поглощающего вещества (эрг).

Экспериментальная часть. Модель, реализующая вышеописанный алгоритм создана с использованием языка Python. Количество мономеров задано числом $5 * 10^4$. Исходное ММР ансамбля сдвинуто в область короткоцепных молекул, длины которых описаны по закону равномерного распределения. Вероятность образования слабой химической связи представлена как вероятность, зависящая в экспоненциальной форме от расстояния между элементами ансамбля, потенциально образующими связь. Визуализация ММР ансамбля с учетом слабых

связей представлена на рисунке 1 на левом графике. Характерно, что в этом случае ансамбль образует одну глобальную макромолекулу, или же стремится к ней, за исключением небольшого количества коротких молекулярных цепей. Изменения в ММР ансамбля, произошедшие после воздействия ионизирующего излучения, представлены на рис. 1 (на правом графике). Большая часть объема теперь представлена короткими сегментами некогда единой структуры.

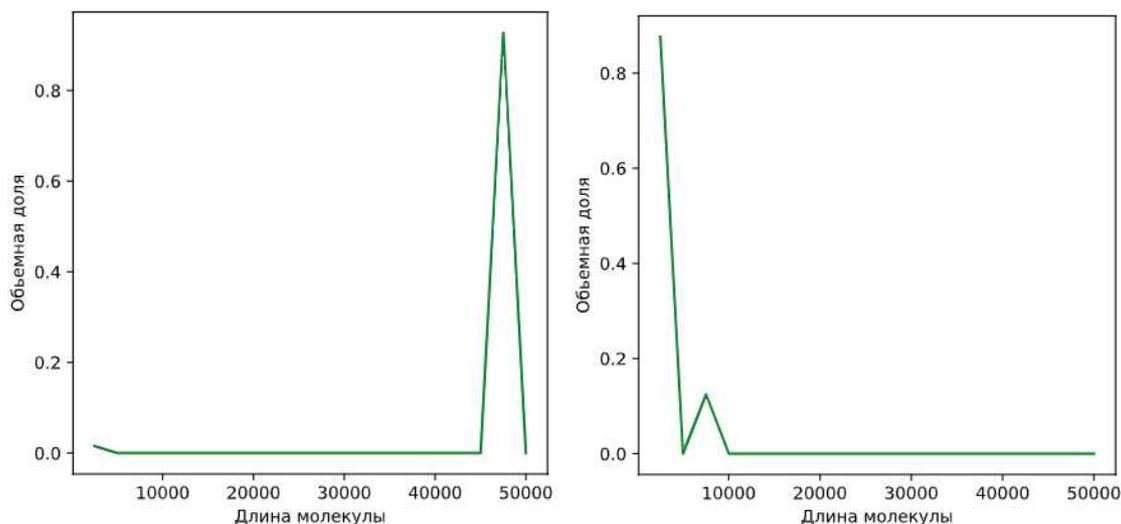


Рисунок 1 – ММР ансамбля после сшивки и после облучения

Изменилось и отношение первичных и слабых связей, логично предположить, что в связи с меньшей энергетической характеристикой, слабые связи больше подвержены распаду, что и подтвердилось в ходе эксперимента.

ЛИТЕРАТУРА

1. S.A. Zaitsev, M.E. Semenov, P.A. Meleshenko, S.G. Tikhomirov and A.P. Chernyaev. Digital model of polymer molecules / S.A. Zaitsev, M.E. Semenov, P.A. Meleshenko, S.G. Tikhomirov and A.P. Chernyaev // 2021 J. Phys.: Conf. Ser. 1745 012095
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т.1. Механика. / Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц – 5-е изд., стереот. – М.: Физматлит, 2004. – 224с.
3. Bethe, Hans A., and Julius Ashkin. "Experimental nuclear physics." / Bethe, Hans A., and Julius Ashkin. Wiley, New York (1953).