

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОЙ ПЛАЗМЕННОЙ МОДИФИКАЦИИ ДРЕВЕСИНЫ

Р.Р. Сафин✉, К.В. Саерова

ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (КНИТУ),
Россия, 420015, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68

cfaby@mail.ru

Представлена математическая модель процесса высокочастотной низкотемпературной плазменной модификации поверхности древесины, основанная на синергии молекулярно-динамического моделирования и экспериментальных спектроскопических данных. Детально смоделирован механизм ионной бомбардировки поверхности целлюлозы ионами кислорода (100 эВ). Выявлены типы разрываемых связей (С-С, С-О, С-Н, О-Н) и образование макрорадикалов. Изложено теоретическое описание ключевых химических реакций между радикалами и компонентами воздушной плазмы, приводящие к формированию на поверхности полярных функциональных групп: гидроксильных (-ОН), карбонильных (-С=О) и карбоксильных (-СООН). Проведена экспериментальная верификация с помощью ИК- и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, количественно подтвердившая увеличение соотношения О:С на 82,5 % и рост содержания окисленных групп после плазменной обработки. Построена математическая модель, описывающая кинетику разрыва С-С связей в поверхностном нанослое в зависимости от мощности разряда и времени обработки. Установлена оптимальная продолжительность обработки — 10 мин. Определена высокая адаптивность модели, что позволяет подстроить ее под разные функциональные группы и компоненты древесины (лигнин, гемицеллюлоза), а также под различные технологические параметры.

Ключевые слова: научная аппаратура, космический эксперимент, перемещение и миграции животных, экипаж, грузовой корабль, Российская орбитальная станция

Ссылка для цитирования: Сафин Р.Р., Саерова К.В. Физико-химическое моделирование высокочастотной плазменной модификации древесины // Лесной вестник / Forestry Bulletin, 2025. Т. 29. № 6. С. 158–170. DOI: 10.18698/2542-1468-2025-6-158-170

Плазменная обработка поверхности материалов, включая биополимеры растительного происхождения, в частности древесину, за последние десятилетия превратилась в один из наиболее перспективных и востребованных методов функциональной модификации в рамках «зеленых» технологий. В отличие от традиционных химических методов, требующих использования растворителей, кислот, щелочей или токсичных адгезивов, плазменная обработка является сухим, бесконтактным и экологически безопасным процессом, не генерирующим жидкие отходы и не требующим последующей нейтрализации. Это делает ее особенно привлекательной для отраслей, где экологическая устойчивость и безопасность продукции становятся ключевыми критериями, в том числе в деревообработке, производстве композитов, строительных материалов и упаковки [1, 2].

Плазма как четвертое агрегатное состояние вещества, представляет собой частично или полностью ионизированный газ, в котором наряду с нейтральными атомами и молекулами присутствуют свободные электроны, положительно и отрицательно заряженные ионы, фотоны, а также возбужденные частицы в метастабильных состояниях [3, 4]. Совокупность этих компонентов создает уникальную среду, способную инициировать на поверхности твердых тел сложные физико-химические процессы: от простой адсорбции и десорбции до разрыва ковалентных связей и образования новых функциональных групп. Особенно эффективна в этом отношении низкотемпературная плазма, в которой температура тяжелых частиц (ионов, нейтралов) остается близкой к комнатной, в то время как электроны обладают высокой энергией (1...10 эВ), достаточной для инициирования химических реакций без термического разрушения подложки [5]. Именно такие условия реализуются в высокочастотных разрядах пониженного давления, широко при-

меняемых для обработки термочувствительных материалов, в том числе древесины.

Развитие плазменных технологий берет начало в середине XX в., когда после работ Ленгмюра, Тонкса и других пионеров физики плазмы [6, 7] стало возможным контролируемое создание и удержание ионизированных сред в лабораторных условиях. Однако настоящий прорыв произошел в 1960–1970 гг. с появлением термина «плазмохимия» и фундаментальных работ таких ученых, как Л.С. Полак, А.В. Радецкий, Дж. Рот и др., которые заложили основы понимания химических превращений в газовых разрядах [8]. В СССР под руководством профессора Полака была создана первая научная школа плазмохимии, которая не только разработала теоретические модели взаимодействия плазмы с полимерами, но и предложила практические решения для промышленного внедрения от плазмотронов для нанесения покрытий до установок для модификации текстиля и бумаги. К концу XX в. плазменные технологии уверенно вошли в такие отрасли, как микроэлектроника, медицина, металлургия и, наконец, деревообработка, — где их потенциал оказался востребованным для решения задач повышения адгезии, гидрофильности и биосовместимости поверхности.

Современные исследования [7, 9, 10] убедительно демонстрируют, что воздействие низкотемпературной плазмы на древесину приводит к значительным и контролируемым изменениям ее поверхностных свойств. Наиболее выраженные изменения включают в себя следующие эффекты:

- повышение смачиваемости (снижение краевого угла контакта с водой и полярными жидкостями на 30...70 %);
- усиление адгезионной способности (увеличение прочности сцепления с полимерными связующими — эпоксидными, фенольными, полиолефиновыми — на 40...200 %);
- улучшение сорбционной способности (повышение скорости и глубины проникновения водных растворов, клеев и пропиток).

Эти изменения обусловлены прежде всего увеличением полярной составляющей поверхностной энергии, что напрямую связано с химической модификацией верхнего нанометрового слоя материала. Под действием активных частиц плазмы (ионов, атомарного кислорода, озона, радикалов) на поверхности древесины происходит окисление основных биополимеров — целлюлозы, гемицеллюлозы и лигнина [11–13]. В результате формируются новые функциональные группы: гидроксильные ($-\text{OH}$), карбонильные ($\text{C}=\text{O}$), карбоксильные

($-\text{COOH}$), а также пероксидные и эпоксидные структуры. Эти группы обладают высокой реакционной способностью и способны образовывать водородные связи, донорно-акцепторные взаимодействия и даже ковалентные связи с функциональными группами связующих, что кардинально улучшает совместимость древесины с синтетическими полимерами.

Особую научную и технологическую актуальность приобретает комбинированная обработка древесины, сочетающая термическую модификацию и последующую плазменную активацию. Термическая модификация, проводимая при температуре 160...240 °C в инертной атмосфере, эффективно повышает гидрофобность, биостойкость и размерную стабильность древесины за счет деструкции гемицеллюлоз и конденсации лигнина. Однако этот же процесс приводит к снижению концентрации полярных групп на поверхности, что ухудшает адгезию к клеям и покрытиям — главный недостаток термически модифицированной древесины при производстве композитов. Плазменная обработка позволяет «реанимировать» поверхность. Не затрагивая объемных гидрофобных свойств, она селективно восстанавливает химическую активность верхнего слоя, компенсируя потерю адгезии. Это открывает принципиально новый путь к созданию высококачественных древесных композитов без использования традиционных грунтовок и адгезионных промоторов, часто токсичных и дорогостоящих [14].

Несмотря на значительное количество экспериментальных работ, посвященных макроскопическим эффектам плазменной модификации (изменению угла смачивания, адгезионной прочности, элементного состава по данным фотоэлектронной спектроскопии — XPS, *X-ray photoelectron spectroscopy*), механизмы взаимодействия активных частиц плазмы с биополимерами древесины на атомарном уровне слабо изучены. Большинство существующих моделей носят эмпирический или полумэмпирический характер и не позволяют предсказать поведение системы при изменении условий. Например, до сих пор не существует четкого понимания того, какие именно связи в макромолекулах целлюлозы или лигнина разрываются первыми при ионной бомбардировке, какие радикалы образуются, какова их локализация и время жизни, какие реакции протекают с наибольшей вероятностью в зависимости от состава плазмы. Без этого понимания оптимизация технологических параметров (мощность, давление, состав газа, время обработки) остается делом проб и ошибок, что неэффективно с экономической и экологической точек зрения.

В связи с изложенным выше появилась необходимость создания фундаментальной физико-химической модели процесса высокочастотной плазменной модификации древесины, основанной на трех уровнях описания:

1) атомарном — с использованием метода молекулярной динамики для моделирования первичных актов ионной бомбардировки;

2) химическом — с теоретическим описанием цепочек реакций между макрорадикалами и компонентами плазмы;

3) макроскопическом — с построением параметрической математической модели, верифицированной количественными спектроскопическими данными (XPS, FTIR — *Fourier Transform Infrared Spectroscopy*, инфракрасная спектроскопия с преобразованием Фурье).

Такой многоуровневый подход позволяет не просто описывать наблюдаемые явления, но и предсказывать поведение системы, адаптировать модель под разные породы древесины, различную степень термической модификации и состав плазмы, а также рассчитывать оптимальные режимы обработки с минимальными энергозатратами. Это выводит плазменную технологию из разряда эмпирических методов в категорию научно обоснованных, управляемых и масштабируемых процессов, что является важным шагом на пути к ее широкому внедрению в промышленность.

Цель работы

Цель работы — создание комплексной физико-математической модели процесса высокочастотной низкотемпературной плазменной обработки древесины, основанной на результатах молекулярно-динамического моделирования и экспериментальных данных спектроскопии.

Материалы и методы

В качестве исходного материала для исследования была выбрана древесная мука березы (*Betula pendula*) — наиболее распространеного и технологически релевантного древесного наполнителя в производстве композиционных материалов.

Для моделирования промышленных условий и создания образцов с контролируемой степенью гидрофобности все образцы древесной муки березы подвергались предварительной термической модификации методом конвективного продувания через слой. Этот метод был выбран как наиболее эффективный для равномерного прогрева дисперсного материала и минимизации термических градиентов внутри частиц.

Термическая обработка проводилась на экспериментальной установке термического модифицирования методом конвективного продувания через бункерную камеру, систему циркуляции инертного газа (азота), нагревательный узел, циклон для улавливания уносимых частиц и газоанализатор для контроля содержания кислорода. Перед началом обработки материал загружался в бункер, после чего система продувалась азотом до снижения концентрации кислорода ниже 10 % — это исключало окислительные процессы и обеспечивало строго пиролитическую деструкцию гемицеллюлоз.

Температурные режимы термической модификации (180, 210 и 240 °C при выдержке 5 ч) были обоснованы на основе предварительных экспериментальных исследований [15] и выбраны для наглядного моделирования легкой, средней и глубокой степеней термического воздействия на древесину. После завершения обработки образцы подвергались охлаждению в инертной атмосфере, затем их герметично упаковывали для дальнейшей плазменной обработки и анализа.

Термически модифицированные образцы далее подвергались высокочастотной низкотемпературной плазменной обработке в целях «реанимации» их адгезионных свойств, утраченных в результате термолиза гемицеллюлоз и дегидратации функциональных групп.

Плазменная обработка осуществлялась на опытно-промышленной установке емкостного высокочастотного разряда пониженного давления, оснащенной генератором ВЧГ6-80 (частота 13,56 МГц) и вакуумной камерой УВМ-16М. В качестве плазмообразующего газа использовался воздух, что соответствует условиям наиболее экономичного и экологически безопасного промышленного применения.

Перед обработкой камера откачивалась до остаточного давления 1,33...133 Па, после чего подавался воздух до рабочего давления $20 \pm 0,4$ Па. Мощность разряда фиксировалась на уровне 2 кВт, температура в камере поддерживалась в диапазоне 25...32 °C (низкотемпературный режим), а продолжительность обработки варьировалась от 10 до 20 мин. для оценки кинетики модификации.

Такой двухступенчатый подход — термическая модификация и плазменная активация — позволил не только смоделировать реальные производственные условия, но и получить сопоставимые данные по изменению химического состава, поверхностной энергии и адгезионных свойств, что стало основой для построения математической модели.

Для моделирования взаимодействия частиц плазмы с древесиной был выбран метод молекулярной динамики, основанный на численном решении классических уравнений движения Ньютона для системы взаимодействующих атомов, что позволяло отслеживать эволюцию системы на фемтосекундном масштабе времени и атомарном уровне пространственного разрешения [16, 17].

В качестве модельного объекта была выбрана молекула целлюлозы — основного (40...50 %) и наиболее реакционноспособного компонента древесины. Целлюлоза представляет собой линейный полимер, состоящий из остатков β -D-глюкозы, соединенных $\beta(1 \rightarrow 4)$ -гликозидными связями. Моделировался процесс бомбардировки фрагмента макромолекулы целлюлозы ионом кислорода (O^+) с начальной кинетической энергией 100 эВ, что соответствовало типичному диапазону энергии ионов (30...100 эВ) в высокочастотном разряде [18].

Для проведения молекулярно-динамического моделирования взаимодействия ионов кислорода с поверхностью целлюлозы был использован универсальный программный пакет LAMMPS, обеспечивающий численное решение уравнений движения Ньютона для многокомпонентных атомных систем. Визуализация и анализ траекторий атомов, а также пространственной эволюции структуры в ходе симуляции осуществлялись с применением специализированного программного обеспечения VMD и с помощью инструмента Atomify [19, 20], что позволило наглядно отследить динамику разрыва химических связей и образование макрорадикалов. Для корректного описания реакционной способности системы, включая разрыв и образование ковалентных связей в реальном времени, был задействован реактивный силовой потенциал ReaxFF [21], который адаптивно пересчитывает топологию связей на каждом шаге интегрирования, что критически важно для моделирования плазмохимических процессов. Расчеты проводились в периодических граничных условиях для исключения поверхностных эффектов на краях моделируемой ячейки, размер которой составил $2,0 \times 2,9 \times 2,3$ нм³, включая 130 атомов, что обеспечило достаточное разрешение для детального изучения локальных изменений в структуре целлюлозного фрагмента под воздействием ионной бомбардировки.

Для подтверждения результатов молекулярно-динамического моделирования были проведены следующие эксперименты:

— *ИК-спектроскопия (FTIR)*: анализ изменения химического состава поверхности образцов древесины до и после плазменной обработки;

измерения проводились в диапазоне волновых чисел 1200...2000 см⁻¹, наиболее информативном для выявления окисленных групп [22–24];

— *рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS)*: количественный и качественный анализ элементного состава и химического состояния атомов (в частности, 1s-состояние атома углерода C) на поверхности образцов термически модифицированной древесины березы до и после высокочастотной плазменной обработки, что позволило определить соотношение O:C и процентное содержание различных функциональных групп (C-C:C-H, C-O, C=O, O-C=O) [25].

Были приняты следующие допущения:

1) в молекулярно-динамических расчетах принимается во внимание только целлюлоза, хотя древесина является композитом, что оправдано ее наибольшей массовой долей и ключевым значением в адгезионных процессах;

2) в математической модели моделирование и последующие расчеты проводятся для поверхностного нанослоя толщиной 1 нм, что подтверждается литературными данными [26–28] о поверхностном характере плазменной модификации;

3) в молекулярно-динамическом моделировании используется фиксированная энергия иона (100 эВ), в то время как в реальном плазменном разряде существует спектр энергий, — упрощение, необходимое для получения управляемой и интерпретируемой модели;

4) в теоретическом описании химических реакций рассматриваются только основные, наиболее вероятные пути взаимодействия макрорадикалов с кислородом и водой, игнорируя менее значимые реакции с азотом и другими компонентами воздуха.

Экспериментальная часть. Молекулярно-динамическое моделирование позволило визуализировать и детально описать процесс ионной бомбардировки поверхности целлюлозы. На рис. 1 представлены фото из анимации взаимодействия иона кислорода (розовый) с фрагментом макромолекулы целлюлозы в различные моменты времени ($t = 0, 10, 50, 100$ фс).

Анализ траекторий движения атомов, полученных в ходе молекулярно-динамического моделирования, показал, что при столкновении иона кислорода с поверхностью целлюлозы происходит передача его кинетической энергии атомам полимерной цепи, что приводит к локальной деструкции структуры, сопровождающейся разрывом ковалентных связей. Разрушаются преимущественно связи C-C и C-O в основной цепи макромолекулы, а также связи C-H и O-H в функциональных боковых

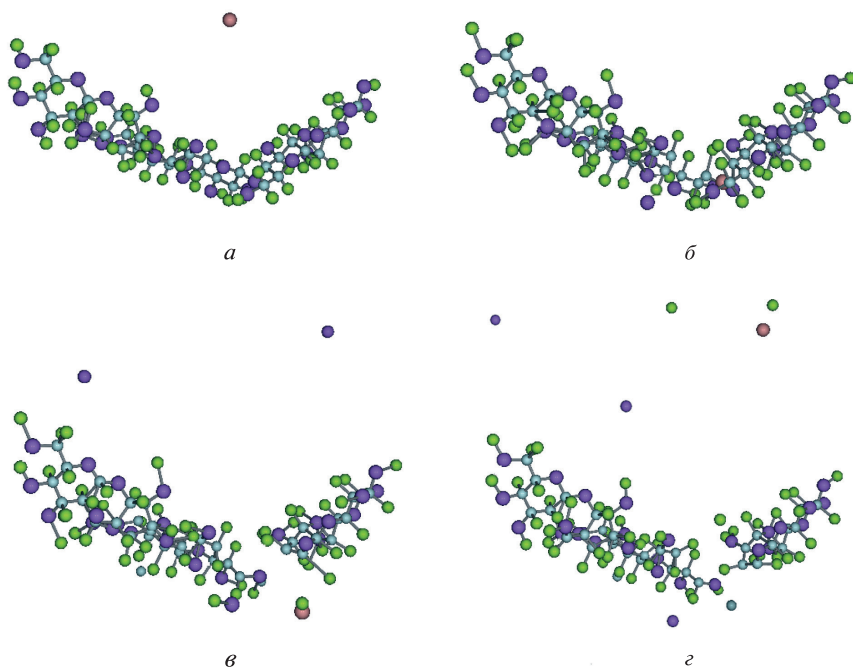


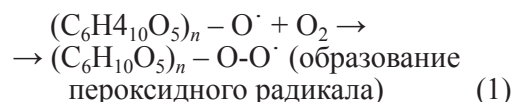
Рис. 1. Изображение фрагмента макромолекулы целлюлозы (С — голубой, О — фиолетовый, Н — зеленый) при взаимодействии с ионом кислорода (розовый), обладающего кинетической энергией 100 эВ, в высокочастотной плазме пониженного давления в моменты времени: $t = 0$ фс (а); $t = 10$ фс (б); $t = 50$ фс (е); $t = 100$ фс (з)

Fig. 1. Image of a cellulose macromolecule fragment (C — blue, O — purple, H — green) interacting with an oxygen ion (pink) with a kinetic energy of 100 eV in a low-pressure HF plasma at time: $t = 0$ fs (a); $t = 10$ fs (b); $t = 50$ fs (e); $t = 100$ fs (z)

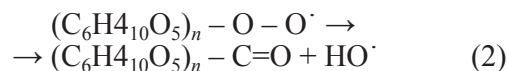
группах. В результате такого воздействия происходит выброс отдельных атомов углерода, кислорода и водорода, который фиксируется как вторичная эмиссия частиц.

В результате разрыва связей образуются нестабильные макрорадикальные фрагменты — молекулярные остатки с неспаренными электронами, локализованными на атомах углерода или кислорода. Эти радикалы обладают высокой реакционной способностью и короткой продолжительностью жизни, что обуславливает их дальнейшее участие в химических превращениях с компонентами плазмы. Типичные структуры образующихся макрорадикалов приведены на рис. 2, что позволяет определить основные центры реакционной активности на поверхности модифицируемого материала.

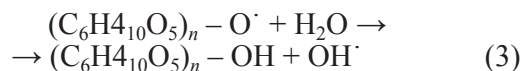
Образовавшиеся макрорадикалы крайне реакционноспособны и мгновенно вступают во взаимодействие с компонентами плазмы. Основным реагентом в воздушной плазме является молекулярный кислород (O_2). Ниже представлены ключевые химические реакции (1)–(4), описывающие механизм образования полярных функциональных групп.



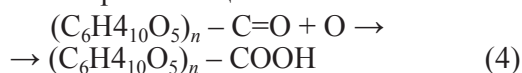
Далее пероксидный радикал может стабилизироваться, приводя к формированию карбонильных (кето-) групп



Кроме того, в процессе плазменной обработки может происходить взаимодействие с водяным паром или прямое образование гидроксильных групп на месте разорванных связей



В дальнейшем карбонильные и другие окисленные структуры подвергаются дальнейшему окислению с образованием карбоксильных групп, что сопровождается повышением кислотности поверхности целлюлозы



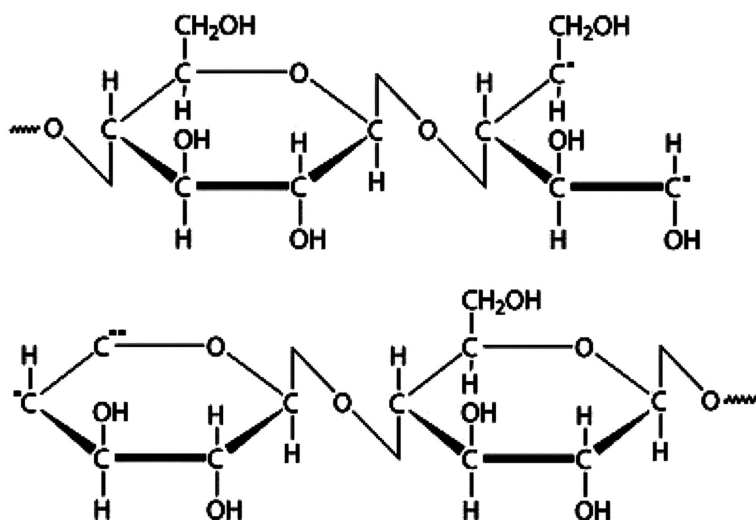


Рис. 2. Состав макрорадикалов целлюлозы, образованных в результате ионной бомбардировки целлюлозы ионом кислорода в высокочастотной плазме пониженного давления

Fig. 2. Composition of cellulose macroradicals formed as a result of ion bombardment of cellulose with oxygen ion in low-pressure HF plasma

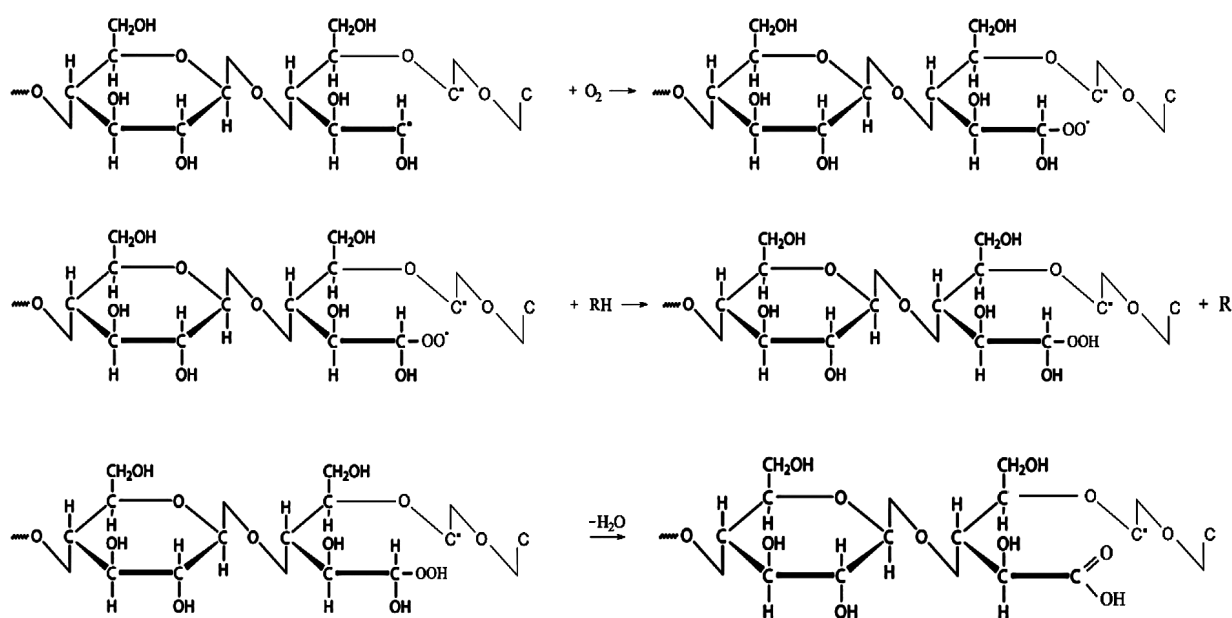


Рис. 3. Механизмы образования полярных функциональных групп в результате взаимодействия макрорадикалов целлюлозы с компонентами плазмообразующего газа воздуха

Fig. 3. Mechanisms of polar functional groups formation as a result of interaction of cellulose macroradicals with components of plasma-forming gas of air

Наглядное представление последовательности химических превращений, приводящих к образованию полярных функциональных групп, представлено на рис. 3. На схеме отражены ключевые стадии взаимодействия макрорадикалов целлюлозы с активными компонентами воздушной плазмы в первую очередь с атомарным и молекулярным кислородом.

В совокупности данные реакции способствуют значительному увеличению поверхностной концентрации гидроксильных, карбонильных и карбоксильных групп. Это приводит к росту полярной составляющей поверхностной энергии, что непосредственно усиливает адгезионную способность материала.

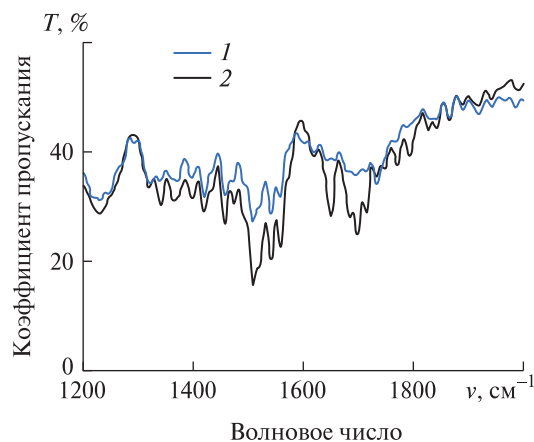


Рис. 4. Фрагменты ИК-спектров образцов древесины: исходного (синий) и модифицированного в высокочастотной плазме воздуха (черный)

Fig. 4. Fragments of the IR spectra of wood samples: the original (blue) and modified in HF plasma air (black)

Экспериментальные данные, полученные методом ИК-спектроскопии (рис. 4), полностью согласуются с прогнозами, сделанными на основе молекулярно-динамического моделирования, и подтверждают как факт образования указанных функциональных групп, так и их количественное накопление на поверхности.

При анализе целлюлозы и ее производных с помощью ИК-спектроскопии с преобразованием Фурье наиболее значимые спектральные изменения, связанные с процессами окисления, фиксируются в области волновых чисел 1200...2000 cm^{-1} [22, 23]. В результате сравнения спектров образца, обработанного в высокочастотной плазме воздуха, с исходным немодифицированным образцом было выявлено увеличение интенсивности полос, соответствующих деформационным колебаниям гидроксильных групп (-OH): внеплоскостным при $\sim 1225 \text{ cm}^{-1}$ и плоскостным в диапазоне 1335...1340 cm^{-1} . Помимо этого в спектре плазменно-модифицированного образца появились новые характерные полосы: в области 1690...1710 cm^{-1} валентные колебания карбонильных групп (-C=O), включая те, что входят в сопряженные системы -C=C-C=O (1640...1660 cm^{-1}) [24], а также в диапазоне 1770...1790 cm^{-1} валентные колебания карбоксильных групп (-COOH).

Эти изменения спектра являются прямым доказательством окисления поверхности и образования новых функциональных групп.

Анализ XPS-спектров (рис. 5) позволяет не только подтвердить факт окисления, но и провести количественную оценку изменений.

Содержание функциональных групп на поверхности древесины до и после плазменной обработки, выраженное в процентах, приведено в таблице.

Данные XPS-спектра показывают, что плазменная обработка приводит к резкому увеличению соотношения O:C (на 82,5 %), что свидетельствует об интенсивном окислении поверхности. Наблюдается значительное уменьшение доли неполярных связей C-C:C-H (на 42,8 %) и рост доли всех окисленных групп: C-O (+20,5 %), C=O:O-C-O (+42,3 %) и особенно O=C-O (+127,9 %). Это количественно подтверждает механизм, предложенный на основе молекулярно-динамических расчетов.

Таким образом, по результатам рентгеновской спектроскопии выявлено, что наибольшее уменьшение энергии наблюдается у C-C связей. В связи с этим представленная ниже математическая модель основана на определении общего количества разорвавшихся связей именно для C-C-связей.

Общее количество связей C-C (γ) в объеме с площадью поверхности $S_{\text{мат}}$ и толщиной 1 нм вычислялось по формуле

$$\gamma = 4n \cdot v \quad (5)$$

где 4 — количество C-C связей в одном звене молекулы целлюлозы;

n — число звеньев в молекуле целлюлозы,

v — количество молекул целлюлозы в поверхностном объеме древесины [8].

Для расчета количества разорвавшихся связей необходимо рассчитать количество бомбардируемых поверхность древесины частиц (Н) при плазменной обработке, которая зависит от плотности ионного тока, поступающего на материал (J_i), которая является функцией от мощности разряда.

Для определения плотности ионного тока составим полиномиальное уравнение аппроксимации шестой степени экспериментальных данных [29], полученное путем определения зависимости плотности ионного тока J_i от мощности разряда W_p . Получим уравнение

$$J_i = 0,0521 W_p^6 - 0,247 W_p^5 + 0,0781 W_p^4 + 1,4948 W_p^3 - 3,41 W_p^2 + 2,9759 W_p - 0,1211. \quad (6)$$

Величина достоверности аппроксимации $R^2 = 0,9989$.

С помощью метода полиномиальной аппроксимации, примененного к экспериментальным данным [29], было установлено аналитическое соотношение, связывающее энергию ионов W_i с мощностью плазменного разряда W_p с высокой степенью достоверности ($R^2 = 0,9989$)

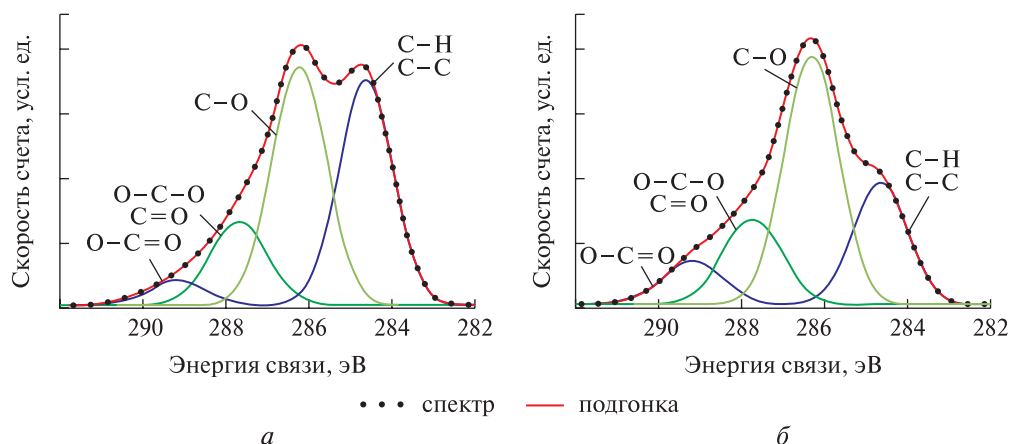


Рис. 5. XPS-спектр 1s-состояния атома углерода С и его пиковое разложение: *a* — термодревесина березы; *б* — термодревесина березы после высокочастотной плазменной обработки
Fig. 5. XPS spectrum of the C 1s-state of carbon and its peak deconvolution: *a* — thermally modified birch wood; *б* — thermally modified birch wood after high-frequency plasma treatment

**Процентное содержание функциональных групп
на поверхности древесины до и после плазменной обработки**
**Percentage content of functional groups on the wood surface before
and after plasma treatment**

Параметры обработки	$x_c/c_{\text{итог}}$				
	O:C	C-C C-H	C-O	O-C-O C=O	O=C-O
Термическая модификация 210 °С	0,40	43	39	13	4,3
Высокочастотная плазма + Термическая модификация 210°С	0,73	24,7	47	18,5	9,8
Процентная разница содержания связей, %	82,5	–42,8	20,5	42,3	127,9
<i>Примечание.</i> x_c — атомный процент (или относительное содержание) конкретной функциональной группы углерода; $c_{\text{итог}}$ — суммарное содержание всех форм углерода, обнаруженных в спектре С 1s.					

$$W_i = 203,8W_p^6 - 1689,5W_p^5 + 5637,7W_p^4 - 9603,7W_p^3 + 8668,9W_p^2 - 3801,5W_p + 651,61. \quad (7)$$

Согласно данным, представленным в работе [8], мощность плазменного разряда W_p находится в функциональной зависимости от потребляемой электрической мощности $W_{\text{потр}}$. На основании аппроксимации экспериментальных данных из работы [29] данная зависимость была выражена в виде полинома третьей степени

$$W_p = -0,0006W_{\text{потр}}^3 + 0,016W_{\text{потр}}^2 + 0,0356W_{\text{потр}} + 0,1489. \quad (8)$$

Величина достоверности аппроксимации $R^2 = 1$.

Модификация поверхности пористых материалов в высокочастотной плазме пониженного давления обусловлена совокупным влиянием трех основных параметров разряда: мощности плазменного разряда W_p , плотности ионного

потока J_i и энергии ионов W_i . Физическая суть процесса заключается в направленном ионном воздействии на поверхностный слой материала. Экспериментально подтверждено [8], что энергетические характеристики ионов W_i коррелируют с величиной W_p . С учетом этой зависимости количество ионов, взаимодействующих с поверхностью древесины в единицу времени H , определяется выражением

$$\text{H} = J_i \cdot 6,24 \cdot 10^{18} \cdot S_{\text{мат}}, \quad (9)$$

где J_i — плотность ионного тока, поступающего на материал, $\text{A}/\text{м}^2$;

$S_{\text{мат}}$ — площадь бомбардируемой поверхности материала, м^2 .

Как установлено в работе [30], при обработке в высокочастотной плазме низкого давления плотность ионного тока находится в пределах $0,3 \dots 1,5 \text{ A}/\text{м}^2$, что соответствует поверхностной плотности ионного потока $2^{-10} \text{ ион}/\text{нм}^2 \cdot \text{с}$.

Эта величина служит основой для вывода дифференциального уравнения, описывающего изменения количества С-С связей в материале

$$\frac{dy}{d\tau} = -\frac{W_i H}{W_{cb}} \cdot h_y \quad (10)$$

где W_{cb} — энергия связей С-С, эВ;

W_i — энергия ионов, эВ;

h_y — вероятность попадания ионов С-С связи в молекулу целлюлозы, которая определяется выражением

$$h_y = (\gamma / H) \eta \cdot \eta, \quad (11)$$

где η — эмпирический коэффициент, учитывающий возможное поверхностное загрязнение, пусковой момент, время релаксации и т. д.;

η — доля содержания С-С связей в материале в процессе высокочастотной низкотемпературной плазменной обработки, определяемая по рис. 6.

В качестве начального условия при решении дифференциального уравнения (10) принимается исходное количество связей С-С в поверхностном слое материала, определяемое выражением

$$\gamma(\tau = 0) = \gamma_{нач}, \quad (12)$$

Количество оставшихся С-С связей рассчитаем по формуле

$$\gamma^k = \gamma^{k-1} - \Delta\gamma, \quad (13)$$

где k — момент времени.

Таким образом, на основе молекулярно-динамического моделирования и спектроскопических исследований был установлен механизм плазменной модификации поверхности термически обработанной древесины, а также получены количественные данные, необходимые для построения математической модели кинетики разрыва химических связей.

Результаты и обсуждение

Расчеты проводились для типичных параметров: $W_p = 2$ кВт, $W_i = 75$ эВ, $J_i = 0,83$ А/м². На рис. 7 представлена зависимость количества оставшихся С-С связей от времени обработки для образцов с различной степенью термической модификации.

На графике (см. рис. 7) видны кинетические кривые изменения количества С-С связей в зависимости от времени обработки. По оси абсцисс отложено время обработки в секундах (от 0 до 1400), по оси ординат — количество оставшихся связей С-С.

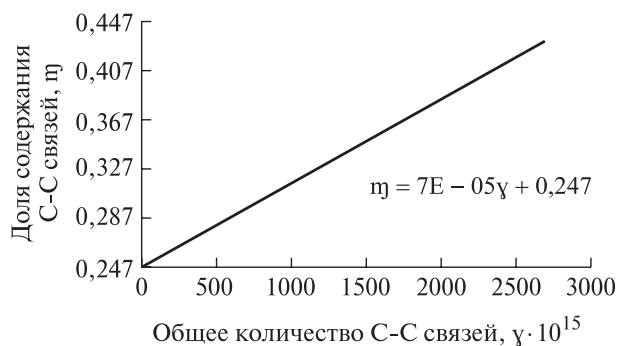


Рис. 6. Доля С-С связей в зависимости от общего количества С-С связей на площади поверхности S_{mat}

Fig. 6. The proportion of C-C bonds as a function of the total number of C-C bonds on the S_{mat} surface area

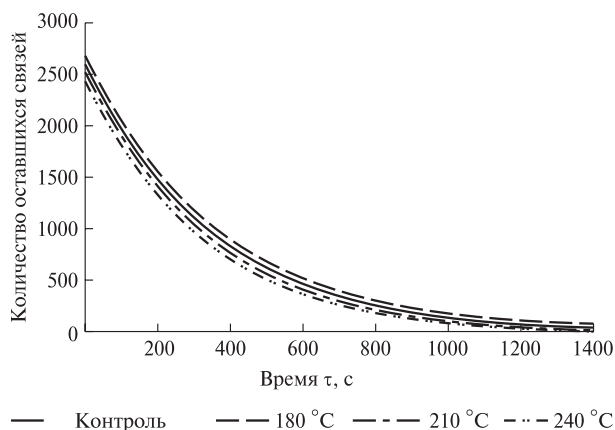


Рис. 7. Зависимость количества оставшихся связей С-С в поверхностном нанослое древесины березы от времени высокочастотной плазменной обработки, где Контроль — контрольный (необработанный) образец, где 180, 210, 240 °C — температура термической модификации

Fig. 7. Dependence of the number of remaining C-C bonds in the surface nanolayer of birch wood on high-frequency plasma treatment time, where Control denotes the untreated (reference) sample and 180, 210, 240 °C — indicate the thermal modification temperatures

Анализ рис. 7 показывает, что во всех случаях происходит интенсивное разрушение связей С-С в первые 10 мин (600 с), после чего скорость процесса резко замедляется и кривые выходят на плато. Это указывает на то, что наиболее эффективная модификация поверхности происходит в начальный период обработки. Причем видно, что температура предварительной термической модификации не оказывает существенного влияния на общую тенденцию изменения количества связей, что подтверждает универсальность математической модели для различных режимов термомеханической обработки.

Полученные результаты отражают синергетический подход к исследованию, объединяющий атомарное моделирование, спектроскопический анализ и инженерное математическое моделирование. Молекулярно-динамические расчеты впервые детально показали механизм первичного взаимодействия ионов плазмы с биополимером и позволили выявить, что даже ионы с энергией 100 эВ способны эффективно разрывать прочные ковалентные связи С-С и С-О в целлюлозе.

Экспериментальные данные ИК- и XPS-спектроскопии не только подтвердили данные о формировании полярных групп, но и предоставили количественные параметры, необходимые для построения математической модели.

Результаты рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS), представленные в настоящей работе, предоставляют количественные данные по динамике изменения не только С-С связей, но и всех основных функциональных групп на поверхности: С-О, С=О, О-С=О, что позволяет при необходимости адаптировать модель для расчета кинетики образования или разрушения любой из этих групп. Например, если целью обработки является максимизация именно карбоксильных (-COOH) групп для улучшения химического сродства к определенному связующему, модель может быть перенастроена под расчет разрыва связей, предшествующих образованию именно этих групп, с соответствующей корректировкой энергетических и вероятностных параметров.

Более того, модель не привязана исключительно к целлюлозе. Поскольку XPS-анализ дает элементный и функциональный состав *всей* поверхности древесины (включая лигнин и гемицеллюлозу), полученные экспериментальные зависимости (например, изменение соотношения О:С или процентного содержания групп при разной температуре термообработки) могут быть использованы для калибровки модели под другие компоненты древесного композита. Это особенно актуально для термически модифицированной древесины, где доля лигнина возрастает и его вклад в формирование поверхности становится доминирующим.

Установленный режим обработки 10 мин является важным практическим результатом, позволяющим минимизировать энергозатраты и повысить производительность.

Выводы

На основе молекулярно-динамического моделирования и спектроскопических данных разработана физико-химическая модель высокока-

стотной плазменной модификации термически обработанной древесины. Установлено, что ионная бомбардировка разрывает связи С-С, С-О, С-Н и О-Н с образованием макрорадикалов, которые в реакциях с компонентами воздушной плазмы формируют полярные функциональные группы (-ОН, -С=О, -COOH). Это подтверждается увеличением соотношения О:С на 82,5 % по данным рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Построенная математическая модель кинетики разрыва С-С связей показала, что оптимальное время обработки составляет 10 мин. Модель обладает высокой адаптивностью и применима для различных компонентов древесины и технологических режимов.

Список литературы

- [1] Wascher R., Kühn C., Avramidis G. Plywood made from plasma-treated veneers: melamine uptake, dimensional stability, and mechanical properties // *J. Wood Sci.*, 2017, v. 63, pp. 338–349. <https://doi.org/10.1007/s10086-017-1632-5>
- [2] Huang Y., Wang J., Zhan X., Mei C., Li W., Deng Y., Wang X. Effect of plasma treatment on the surface characteristics and adhesive penetration performance of heat-treated wood // *Holzforschung*, 2022, v. 76, no. 10, pp. 941–953. <https://doi.org/10.1515/hf-2022-0031>
- [3] Lekobou W.P. Influence of atmospheric pressure plasma treatments on the surface properties of ligno-cellulosic substrates // *Holzforschung*, 2016, v. 70, no. 1, pp. 55–61.
- [4] Sun F. Experimental and numerical assessment of the orthotropic imbibition dynamics of wood // *Wood Material Science & Engineering*, 2023, v. 18, no. 2, pp. 607–617.
- [5] Talviste R., Galmiz O., Stupavská M. Effect of DCSBD plasma treatment distance on surface characteristics of wood and thermally modified wood // *Wood Sci. Technol*, 2020, v. 54, pp. 651–665. <https://doi.org/10.1007/s00226-020-01175-4>
- [6] Peng X., Zhang Z. Research of polypropylene (PP) decorative board surface painting used for wood product decoration and the paint film adhesion improvement by plasma // *J. Adhes Sci. Technol*, 2020, v. 34, no. 1, pp. 246–262.
- [7] Сергеева Е.А., Илюшина С.В. Влияние низкотемпературной плазмы на физико-механические свойства высокомолекулярных полиэтиленовых волокон // *ИзВУЗ Технология легкой промышленности*, 2011. Т. 12. № 2. С. 14–16.
- [8] Саерова К.В. Высокочастотная низкотемпературная плазменная обработка термомодифицированного древесного наполнителя в производстве композиционных материалов: дис. ... канд. техн. наук : 05.21.03. Казань, 2024. 143 с.
- [9] Гильман А.Б. Воздействие низкотемпературной плазмы как эффективный метод модификации поверхности полимерных материалов // *Химия высоких энергий*, 2003. Т. 37. № 1. С. 20–26.
- [10] Callum A.S.H. *Wood Modification — Chemical, Thermal and Other Processes*. Chichester: John Wiley & Sons, 2006, 260 p.

- [11] Calvini P., Goassini A. FTIR — Deconvolution Spectra of Paper Documents // *Restaurator*, 2002, v. 23, no. 1, pp. 48–66.
- [12] Гамова И.А., Каменков С.Д. Теплоизоляционные материалы на основе древесных опилок и высокозольного сапропеля // *Деревообрабатывающая промышленность*, 2000. № 5. С. 15–16.
- [13] Голант В.Е. Сверхвысокочастотные методы исследования плазмы. М.: Наука, 1968. 327 с.
- [14] Абдуллин И.Ш., Аминов И.Х., Аминов Л.И. Модификация древесных опилок высокочастотным разрядом пониженного давления для создания древесно-композиционных материалов // *Вестник Казанского технологического университета*, 2002. № 1–2. С. 63–68.
- [15] Острякова В.А., Ермолин В.Н., Баяндин М.А. Влияние геометрических характеристик наполнителя на свойства древесного композита // *Лесной вестник / Forestry Bulletin*, 2024. Т. 28. № 1. С. 139–148. DOI: 10.18698/2542-1468-2024-1-139-148
- [16] Саерова К.В., Сафин Р.Р., Галяветдинов Н.Р. Высокочастотная низкотемпературная плазменная обработка термомодифицированного древесного наполнителя и ее влияние на свойства наполненных полимеров // *Fibre Chemistry*, 2025. <https://doi.org/10.1007/s10692-025-10582-x>
- [17] Kowalik M., Ashraf C., Damirchi B., Akbarian D., Rajabpour S., van Duin A.C.T. Atomistic Scale Analysis of the Carbonization Process for C/H/O/N-Based Polymers with the ReaxFF Reactive Force Field // *J. Phys. Chem. B.*, 2019, v. 123, no. 25, pp. 5357–5367.
- [18] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammps.sandia.gov/> (дата обращения 01.04.2025).
- [19] Paul W., Ohlmeyer M., Leithoff H., Boonstra M.J., Pizzi A. Optimising the properties of OSB by a one-step heat pre-treatment process // *Holz Roh Werkst*, 2006, v. 64, pp. 227–234.
- [20] Schwar H., Schlegel H. Metalek — leben und Clasa-serverstarkte Kunststoffe in der Technik. 3 Aufl. Berlin: VEB Verlag Technik, 1964, 225 p.
- [21] Sekino N., Inouse M., Irle M., Adcock T. The mechanisms behind the improved dimensional stability of particleboards made from steam-pretreated particles // *Holzforschung*, 1999, v. 53, pp. 435–440.
- [22] Sharnina L.V. Low-temperature plasma as the basis for creation of modern textile chemical technologies // *Fibre Chemistry*, 2004, v. 36, no. 6, pp. 431–436.
- [23] Stanciu M., Gall R., Orbok Z., Stan T. Acoustic and elastic properties of wood used for musical instruments // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2022, art. 012059. DOI: 10.1088/1757-899X/1262/1/012059
- [24] Timoshina Y.A., Voznesensky E.F., Teptina A.I., Zhelonkin Y.O. Model of the interaction of reactive gases with polymer materials in low-pressure radio-frequency plasma // *High Energy Chemistry*, 2023, v. 57, no. 1, pp. 234–237.
- [25] Timoshina Y.A., Voznesensky E.F., Teptina A.I., Zhelonkin Y.O. Plasmachemical modification of polymeric materials // *High Energy Chemistry*, 2023, v. 57, no. 1, pp. 256–259.
- [26] Park Byung-Dae. Dynamic Mechanical Analysis of Urea-Formaldehyde Resin Adhesives with Different Formaldehyde-to-Urea Molar Ratios // *J. of Applied Polymer Science*, 2008, v. 108, pp. 2045–2051.
- [27] Материалы VII Международной конференции предприятий фанерной промышленности: тезисы и доклады. СПб.: ООО «ЦНИИФ», 2013. 316 с.
- [28] Ebnesajjad S. Surface Treatment of Materials for Adhesive Bonding. Amsterdam: William Andrew, 2014, 337 p.
- [29] Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *J. Comp Phys*, 1995, v. 117, no. 1, pp. 1–19.
- [30] Вознесенский Э.Ф., Дресвянников А.Ф., Мухаметшин А.М. Влияние плазменной обработки на качество проведения процессов выработки натуральной кожи // *Вестник Казанского технологического университета*, 2005. № 2. С. 269–273.
- [31] Абдуллин И.Ш., Желтухин В.С., Кашапов Н.Ф. Высокочастотная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях: теория и практика применения. Казань: Изд-во КГТУ, 2000. 348 с.

Сведения об авторах

Сафин Руслан Рушанович✉ — д-р техн. наук, профессор, зав. кафедрой «Архитектура и дизайн изделий из древесины», ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», sfaby@mail.ru

Саерова Ксения Вячеславовна — канд. техн. наук, доцент, ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», senya97@inbox.ru

Поступила в редакцию 16.04.2025.

Одобрено после рецензирования 23.09.2025.

Принята к публикации 16.10.2025.

PHYSICO-CHEMICAL MODELING OF HIGH-FREQUENCY PLASMA MODIFICATION OF WOOD: FROM ATOMIC MECHANISMS TO ENGINEERING PROCESS OPTIMIZATION

R.R. Safin✉, K.V. Saerova

Kazan National Research Technological University, 68, Karl Marx st., 420015, Kazan, Republic of Tatarstan, Russia

cfaby@mail.ru

A mathematical model of high-frequency low-temperature plasma surface modification of wood is presented, developed through the synergistic integration of molecular dynamics simulations and experimental spectroscopic data. The mechanism of oxygen ion (100 eV) bombardment of the cellulose surface has been simulated in detail, revealing the specific types of cleaved bonds — C-C, C-O, C-H, and OH — and the subsequent formation of macroradicals. A theoretical description of the key chemical reactions between these radicals and air plasma components is provided, explaining the formation of polar functional groups on the surface, namely hydroxyl (-OH), carbonyl (-C=O), and carboxyl (-COOH) groups. Experimental verification was carried out using FTIR and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), which quantitatively confirmed an 82,5 % increase in the O:C atomic ratio and a significant rise in oxidized functional groups following plasma treatment. A mathematical model describing the kinetics of C-C bond cleavage within the surface nanolayer as a function of discharge power and treatment time was developed. The optimal treatment duration was determined to be 10 minutes, beyond which the modification process plateaus. The model demonstrates high adaptability, enabling its recalibration for different functional groups and wood constituents (e.g., lignin, hemicellulose) as well as various technological parameters.

Keywords: molecular dynamics, plasma treatment, wood, mathematical model, XPS spectroscopy, functional groups, thermal modification

Suggested citation: Safin R.R., Saerova K.V. *Fiziko-khimicheskoe modelirovanie vysokochastotnoy plazmennoy modifikatsii drevesiny* [Physico-chemical modeling of high-frequency plasma modification of wood: from atomic mechanisms to engineering process optimization]. *Lesnoy vestnik / Forestry Bulletin*, 2025, vol. 29, no. 6, pp. 158–170. DOI: 10.18698/2542-1468-2025-6-158-170

References

- [1] Wascher R., Kühn C., Avramidis G. Plywood made from plasma-treated veneers: melamine uptake, dimensional stability, and mechanical properties. *J. Wood Sci.*, 2017, v. 63, pp. 338–349. <https://doi.org/10.1007/s10086-017-1632-5>
- [2] Huang Y., Wang J., Zhan X., Mei C., Li W., Deng Y., Wang X. Effect of plasma treatment on the surface characteristics and adhesive penetration performance of heat-treated wood. *Holzforschung*, 2022, v. 76, no. 10, pp. 941–953. <https://doi.org/10.1515/hf-2022-0031>
- [3] Lekobou W.P. Influence of atmospheric pressure plasma treatments on the surface properties of ligno-cellulosic substrates. *Holzforschung*, 2016, v. 70, no. 1, pp. 55–61.
- [4] Sun F. Experimental and numerical assessment of the orthotropic imbibition dynamics of wood. *Wood Material Science & Engineering*, 2023, v. 18, no. 2, pp. 607–617.
- [5] Talviste R., Galmiz O., Stupavská M. Effect of DCSBD plasma treatment distance on surface characteristics of wood and thermally modified wood. *Wood Sci Technol*, 2020, v. 54, pp. 651–665. <https://doi.org/10.1007/s00226-020-01175-4>
- [6] Peng X., Zhang Z. Research of polypropylene (PP) decorative board surface painting used for wood product decoration and the paint film adhesion improvement by plasma. *J. Adhes Sci Technol*, 2020, v. 34, no. 1, pp. 246–262.
- [7] Sergeeva E.A., Ilyushina S.V. *Vliyaniye nizkotemperaturnoy plazmy na fiziko-mekhanicheskie svoystva vysokomodul'nykh polietilenovykh volokon* [Effect of low-temperature plasma on the physical and mechanical properties of high-modulus polyethylene fibers]. *IzVUZ Tekhnologiya legkoy promyshlennosti* [Bulletin of the Higher Educational Institution. Technology of Light Industry], 2011, v. 12, no. 2, pp. 14–16.
- [8] Saerova K.V. *Vysokochastotnaya nizkotemperaturnaya plazmennaya obrabotka termomodifitsirovannogo drevesnogo napolnitelya v proizvodstve kompozitsionnykh materialov* [High-frequency low-temperature plasma treatment of thermally modified wood filler in the production of composite materials]. *Dis. Cand. Sci. (Tech.)*, 05.21.03. Kazan, 2024, 143 p.
- [9] Gil'man A.B. *Vozdeystvie nizkotemperaturnoy plazmy kak effektivnyy metod modifikatsii poverkhnosti polimernykh materialov* [Effect of low-temperature plasma as an effective method for modifying the surface of polymeric materials]. *Khimiya vysokikh energiy* [High Energy Chemistry], 2003, v. 37, no. 1, pp. 20–26.
- [10] Callum A.S.H. *Wood Modification — Chemical, Thermal and Other Processes*. Chichester: John Wiley & Sons, 2006, 260 p.
- [11] Calvini P., Goassini A. FTIR — Deconvolution Spectra of Paper Documents. *Restaurator*, 2002, v. 23, no. 1, pp. 48–66.
- [12] Gamova I.A., Kamenkov S.D. *Teploizolyatsionnye materialy na osnove drevesnykh opilok i vysokozol'nogo sapropelya* [Thermal insulation materials based on sawdust and high-ash sapropel]. *Derevoobrabatyvayushchaya promyshlennost'* [Woodworking industry], 2000, no. 5, pp. 15–16.

- [13] Golant V.E. *Sverkhvysokochastotnye metody issledovaniya plazmy* [Microwave methods for studying plasma]. Moscow: Nauka, 1968, 327 p.
- [14] Abdullin I.Sh., Aminov I.Kh., Aminov L.I. *Modifikatsiya drevesnykh opilok vysokochastotnym razryadom ponizhenno-davleniya dlya sozdaniya drevesno-kompozitsionnykh materialov* [Modification of wood sawdust by low-pressure high-frequency discharge to create wood-composite materials]. *Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta* [Bulletin of Kazan Technological University], 2002, no. 1–2, pp. 63–68.
- [15] Ostryakova V.A., Ermolin V.N., Bayandin M.A. *Vliyanie geometricheskikh kharakteristik napolnitelya na svoystva drevesnogo kompozita* [Influence of filler geometrical characteristics on wood composite properties]. *Lesnoy vestnik / Forestry Bulletin*, 2024, vol. 28, no. 1, pp. 139–148. DOI: 10.18698/2542-1468-2024-1-139-148
- [16] Saerova K.V., Safin R.R., Galyavetdinov N.R. *Vysokochastotnaya nizkotemperaturnaya plazmennaya obrabotka termomodifitsirovannogo drevesnogo napolnitelya i ee vliyanie na svoystva napolnennykh polimerov* [High-frequency low-temperature plasma treatment of thermally modified wood filler and its effect on the properties of filled polymers]. *Fibre Chemistry* [Fibre Chemistry], 2025. <https://doi.org/10.1007/s10692-025-10582-x>
- [17] Kowalik M., Ashraf C., Damirchi B., Akbarian D., Rajabpour S., van Duin A.C.T. Atomistic Scale Analysis of the Carbonization Process for C/H/O/N-Based Polymers with the ReaxFF Reactive Force Field. *J. Phys. Chem. B.*, 2019, v. 123, no. 25, pp. 5357–5367.
- [18] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <http://lammps.sandia.gov/> (дата обращения 01.04.2025).
- [19] Paul W., Ohlmeyer M., Leithoff H., Boonstra M.J., Pizzi A. Optimising the properties of OSB by a one-step heat pre-treatment process. *Holz Roh Werkst*, 2006, v. 64, pp. 227–234.
- [20] Schwar H., Schlegel H. *Metalek — leben und Claseserverstärkte Kunststoffe in der Technik*. 3 Aufl. Berlin: VEB Verlag Technik, 1964, 225 p.
- [21] Sekino N., Inouse M., Irle M., Adcock T. The mechanisms behind the improved dimensional stability of particleboards made from steam-pretreated particles. *Holzforschung*, 1999, v. 53, pp. 435–440.
- [22] Sharnina L.V. Low-temperature plasma as the basis for creation of modern textile chemical technologies. *Fibre Chemistry*, 2004, v. 36, no. 6, pp. 431–436.
- [23] Stanciu M., Gall R., Orbok Z., Stan T. Acoustic and elastic properties of wood used for musical instruments. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2022, art. 012059. DOI: 10.1088/1757-899X/1262/1/012059
- [24] Timoshina Y.A., Voznesensky E.F., Teptina A.I., Zhelonkin Y.O. Model of the interaction of reactive gases with polymer materials in low-pressure radio-frequency plasma. *High Energy Chemistry*, 2023, v. 57, no. 1, pp. 234–237.
- [25] Timoshina Y.A., Voznesensky E.F., Teptina A.I., Zhelonkin Y.O. Plasmachemical modification of polymeric materials. *High Energy Chemistry*, 2023, v. 57, no. 1, pp. 256–259.
- [26] Park Byung-Dae. Dynamic Mechanical Analysis of Urea-Formaldehyde Resin Adhesives with Different Formaldehyde-to-Urea Molar Ratios. *J. of Applied Polymer Science*, 2008, v. 108, pp. 2045–2051.
- [27] *Materialy VII Mezhdunarodnoy konferentsii predpriyatiy fanerroy promyshlennosti. Tezisy i doklady* [Proceedings of the VII International Conference of Plywood Industry Enterprises. Abstracts and Reports]. St. Petersburg: OOO TsNIIF, 2013, 316 p.
- [28] Ebnesajjad S. *Surface Treatment of Materials for Adhesive Bonding*. Amsterdam: William Andrew, 2014, 337 p.
- [29] Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *J Comp Phys*, 1995, v. 117, no. 1, pp. 1–19.
- [30] Voznesenskiy E.F., Dresvyannikov A.F., Mukhametshin A.M. *Vliyanie plazmennoy obrabotki na kachestvo provedeniya protsessov vyrabotki natural'noy kozhi* [Effect of plasma treatment on the quality of natural leather production processes]. *Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta* [Bulletin of Kazan Technological University], 2005, no. 2, pp. 269–273.
- [31] Abdullin I.Sh., Zheltukhin V.S., Kashapov N.F. *Vysokochastotnaya plazmenno-struynaya obrabotka materialov pri ponizhennykh davleniyakh: teoriya i praktika primeneniya* [High-frequency plasma-jet processing of materials at low pressures: theory and application practice]. Kazan: KSTU, 2000, 348 p.

Authors' information

Safin Ruslan Rushanovich✉ — Dr. Sci. (Tech.), Professor, Head of the Department of Architecture and Design of Wood Products of the Kazan National Research Technological University, cfaby@mail.ru
Saerova Ksenia Vyacheslavovna — Cand. Sci. (Tech.), Associate Professor of the Kazan National Research Technological University, senya97@inbox.ru

Received 16.04.2025.

Approved after review 23.09.2025.

Accepted for publication 16.10.2025.

Вклад авторов: все авторы в равной доле участвовали в написании статьи
Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов
Authors' Contribution: All authors contributed equally to the writing of the article
The authors declare that there is no conflict of interest