

О. В. Воинов

О ЗАМКНИИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ СМАЧИВАНИЯ
В ОБЛАСТИ МАЛОГО МАСШТАБА

Рассматривается задача о форме свободной границы при смачивании гладкой поверхности твердого тела полимерной жидкостью с учетом возможности наличия области течения, в которой проявляется аномалия вязкости. Найдено аналитическое решение задачи для реологической модели нелинейно-вязкой жидкости в приближении тонкого слоя и проведено его сравнение с решением, справедливым при слабой зависимости вязкости от скорости сдвига. Получена формула масштаба области аномалии вязкости, инвариантная относительно степени полимеризации полимерных молекул. Показано, что учет реологии имеет смысл только при достаточно больших значениях макроскопического краевого угла. Найдены формулы для минимально допустимых динамических краевых углов и капиллярных чисел, ограничивающих применимость реологического подхода к замыканию теории в области малого масштаба.

Теория сопоставлена с экспериментом по смачиванию капилляра. Учет реологии жидкости пригоден для описания только части экспериментальной зависимости краевого угла от скорости. В той области параметров, где теория с учетом реологии пригодна, ее результаты практически совпадают с результатами, полученными для ньютоновской жидкости. Ранее такое согласие отмечалось для задачи растекания капли полимерной жидкости на твердой поверхности.

1. Динамический краевой угол нелинейно-вязкой жидкости на твердой поверхности. Рассматривается плоское стационарное течение жидкости со свободной границей S , перемещающейся со скоростью v относительно смачиваемого ею твердого тела (рис. 1). Числа Рейнольдса предполагаются малыми.

В соответствии с известной постановкой теории смачивания [1, 2] на твердом теле при $y = 0$ задано условие прилипания $v_x = -v$, $v_y = 0$, на свободной границе S — условия непротекания жидкости и отсутствия касательных напряжений

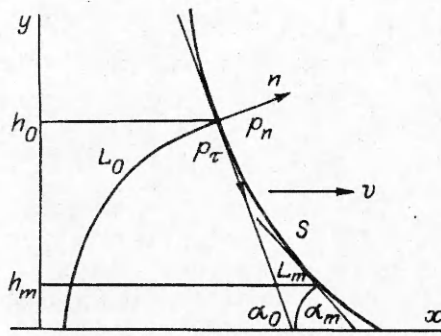
$$(vn) = 0, \quad p_t = 0$$

и равенства скачка нормального напряжения капиллярному давлению

$$p_n + p_0 = q\sigma.$$

Здесь q — кривизна поверхности S ; p_0 — давление в газе; σ — коэффициент поверхностного натяжения.

Считаем также заданными и непрерывными значения скорости v на дугах L_0 и L_m окружностей большого и малого радиуса, проходящих через точки свободной границы на расстоянии h_0 и h_m от твердой поверхности ($h_0 \gg h_m$). Причем для определенности центры этих окружностей находятся на пересечении соответствующих касательных к свободной границе S с границей твердого тела $y = 0$.



Р и с. 1

Зависимость угла α касательной к S с твердой поверхностью от расстояния h точки S от твердой поверхности определяется в промежуточной области

$$h_m \ll h \ll h_0,$$

при этом значения скорости на большой и малой граничных дугах L_0 и L_m при условии равенства этих значений по порядку величины скорости смачивания v не влияют на течение в промежуточной области значений расстояния h .

Минимальное расстояние h_m определяется [1, 2] по порядку величины как несколько размеров молекул ($h_m = 2 \div 3a$). Угол α на минимальном расстоянии h_m приравнивается статическому краевому углу смачивания:

$$(1.1) \quad \alpha = \alpha_m, \quad h = h_m.$$

Считаем малым капиллярное число $Ca = \frac{\mu_0 v}{\sigma} \ll 1$, где μ_0 — наибольшее значение вязкости жидкости. Предполагается, что кривизна q в точке h_0 свободной границы достаточно быстро убывает:

$$(1.2) \quad q(h_0) = - \left. \frac{d \cos \alpha}{dh} \right|_{h_0} \rightarrow 0.$$

Реологическое уравнение состояния жидкости берется в виде уравнения нелинейно-вязкой жидкости: напряжения p_{ij} определяются вязкостью μ , монотонно убывающей при больших скоростях сдвига $\dot{\gamma}$:

$$p_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu\epsilon_{ij}, \quad \epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad i, j = 1, 2, 3,$$

$$\mu = \mu(\dot{\gamma}), \quad \dot{\gamma} = (2\epsilon_{ij}\epsilon_{ij})^{1/2}.$$

Эти уравнения для полимерной жидкости являются модельными, так как не учитывают эффект нормальных напряжений.

Для приближенного аналитического описания решения задачи интересен класс зависимостей вязкости от скорости сдвига $\mu(\dot{\gamma})$, удовлетворяющих условию медленного изменения вязкости со скоростью сдвига [1]:

$$\mu \gg \dot{\gamma} \left| \frac{d\mu}{d\dot{\gamma}} \right|.$$

Данное неравенство выполнено, например, для степенной зависимости $\mu \sim \dot{\gamma}^{-k}$ при малых показателях степени ($k \ll 1$). Аналитическое решение возможно также в случае малых углов наклона касательной к свободной границе (тонкий слой).

Медленное изменение вязкости со скоростью сдвига позволяет привлекать решение задачи о течении внутри угла α жидкости с постоянной вязкостью, которое можно использовать для решения нелинейной задачи о форме свободной границы, если угол α касательной медленно изменяется с расстоянием h :

$$\alpha \gg h |d\alpha/dh|.$$

Это неравенство может выполняться благодаря малости капиллярного числа ($Ca \ll 1$).

Если ввести характерную скорость сдвига в области течения масштаба h расстояний от твердой поверхности

$$(1.3) \quad \dot{\gamma} = \kappa \frac{v}{h},$$

то можно определить значение вязкости μ в этой области и рассчитать из задачи течения в угле разность нормальных напряжений на границе. Затем, согласно методу [1], из дифференциального уравнения для угла α , которое дает выражение кривизны, получается асимптотическая зависимость α от h . Для $\alpha < 145 \div 150^\circ$ эта зависимость может быть описана приближенной формулой

$$(1.4) \quad \alpha^3 = \alpha_m^3 + \frac{9v}{\sigma} \int_{h_m}^h \mu \left(\kappa \frac{v}{h} \right) \frac{dh}{h}.$$

Характерное значение κ в (1.3) и (1.4) достаточно определить по порядку величины, так как по предположению вязкость μ слабо зависит от $\dot{\gamma}$. Хорошая аппроксимация достигается при $\kappa = 2$, как показывает приведенный ниже анализ задачи смачивания поверхности тонким слоем жидкости. В [1] значение κ отличается добавочным множителем α^{-1} .

Необходимо указать на более общую асимптотическую формулу, из которой следует формула (1.4):

$$(1.5) \quad \int_{\alpha_m}^{\alpha} \left(\frac{\beta}{\sin \beta} - \cos \beta \right) d\beta = \frac{2v}{\sigma} \int_{h_m}^h \mu \left(\kappa \frac{v}{h} \right) \frac{dh}{h}.$$

Применение этой формулы ограничено требованием умеренности значений угла наклона ($\alpha \ll \pi/2$) в области тех значений расстояний h , при которых проявляется аномалия вязкости. Причина такого ограничения заключена в том, что при больших значениях α , сравнимых с π , величина $\dot{\gamma}$ (1.3) при $\kappa = \text{const}$ не является характерной скоростью сдвига в области с масштабом расстояний от поверхности, равным h .

Очевидно, интегралы по h в (1.4), (1.5) сходятся при $h_m = 0$, если вязкость μ достаточно быстро убывает при больших скоростях сдвига ($\dot{\gamma} \rightarrow \infty$) [3—5]. Случай $h_m = 0$ соответствует общей схеме непрерывного замыкания задачи при $h = 0$ аналогично известным подходам [6, 7]. Однако далее показано, что предельный переход $h_m \rightarrow 0$, вообще говоря, недопустим.

Для конкретизации зависимости вязкости от скорости сдвига полезно указать на эксперименты для силоксановых полимерных жидкостей [8, 9], которые можно приближенно описать степенными зависимостями вязкости μ от скорости сдвига при ее значениях, больших критического значения $\dot{\gamma}_*$:

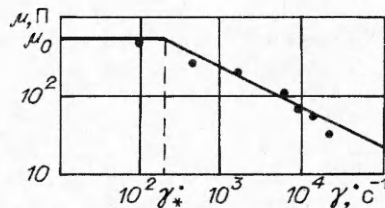
$$(1.6) \quad \mu = \mu_0 = \text{const}, \quad \dot{\gamma} \leq \dot{\gamma}_*, \quad \mu = \mu_0 (\dot{\gamma}_*/\dot{\gamma})^k, \quad \dot{\gamma} > \dot{\gamma}_*.$$

Для примера на рис. 2 дано сопоставление аппроксимационной зависимости (1.6) с экспериментом [9] для силоксановой жидкости с $\mu_0 = 600$ П, при этом параметры в (1.6) следующие: $k = 0,5$, $\dot{\gamma}_* = 200 \text{ с}^{-1}$.

Преобразуем формулу (1.4) с учетом (1.6) для $h \geq h_*$:

$$(1.7) \quad \alpha^3 = \alpha_m^3 + \frac{9\mu_0 v}{\sigma} \left(\ln \frac{h}{h_*} + \Gamma \right), \quad \Gamma = \frac{1}{k} \left(1 - \left(\frac{h_m}{h_*} \right)^{1-k} \right), \quad h_* = \kappa \frac{v}{\dot{\gamma}_*}.$$

Важным ограничением корректности формул учета реологии жидкости вне малой области масштаба h_m по формулам (1.4), (1.5) и (1.7) является условие, что масштаб области аномалии вязкости значительно превосходит величину молекулярного масштаба ($h_* \gg h_m$). Отметим, что выражение Γ в (1.7) позволяет оценивать порядок величины вклада условий течения на минимальном масштабе $h \sim h_m$. Формальный предельный переход $h_m/h_* \rightarrow 0$ мог бы позволить получить замкнутое решение на основе замыкающего соотношения при $h = 0$ без использования условий при $h = h_m$. Однако такой предел не имеет места, напри-



Р и с. 2

мер, при относительно малой скорости смачивания ($v \rightarrow 0$), когда $h_* \rightarrow 0$. Поэтому важно найти условия справедливости неравенства $h_* \gg h_m$, которые являются условиями применимости реологического подхода к замыканию задачи в области малого масштаба. Для этого полезно определить решения при малых углах наклона касательной к свободной границе.

2. Уравнения капиллярного движения тонкого слоя с учетом аномалии вязкости. Скорость v_x внутри тонкого слоя жидкости удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial v_x}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial x},$$

где x — координата вдоль слоя, y — поперек него. Условия на границах слоя с твердым телом и газом следующие:

$$v_x = 0, \quad y = 0; \quad \frac{\partial v_x}{\partial y} = 0, \quad y = h.$$

Поток жидкости через сечение пленки для степенной зависимости вязкости от скорости сдвига (1.6) имеет вид

$$(2.1) \quad Q = \int_0^h v_x dy = \frac{\gamma_* h^2}{3-2k} \left[(1-k) \zeta^{1/(1-k)} + \frac{k}{3} \frac{1}{\zeta^2} \right], \quad \zeta > 1,$$

$$Q = \frac{1}{3} \gamma_* h^2 \zeta, \quad \zeta \leq 1;$$

$$(2.2) \quad \zeta = -\frac{h}{\mu_0 \gamma_*} \frac{\partial p}{\partial x}.$$

Можно получить более удобную форму записи уравнений (2.1), сохраняя приемлемую точность. Рассмотрим аппроксимацию (2.1) в виде

$$(2.3) \quad Q = \frac{1-k}{3-2k} \gamma_* h^2 \zeta^{1/(1-k)}, \quad \zeta > \zeta_*,$$

$$Q = \frac{1}{3} \gamma_* h^2 \zeta, \quad \zeta < \zeta_*.$$

Параметр ζ_* определяется из условия непрерывности потока Q при $\zeta = \zeta_*$:

$$(2.4) \quad \zeta_* = \left(\frac{1-2k/3}{1-k} \right)^{1/k-1}.$$

Уравнение профиля пленки, стационарно движущейся со скоростью v , следует из уравнения неразрывности в интегральной форме и формулы капиллярного давления:

$$(2.5) \quad Q = hv, \quad p - p_0 = -\sigma \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}.$$

Формулы (2.2) — (2.5) позволяют найти

$$(2.6) \quad \frac{d^3 h}{dx^3} = \frac{3\mu_0 v}{\sigma h^2}, \quad h > h_*, \quad \frac{d^3 h}{dx^3} = \frac{3\mu_0 v}{\sigma h^2} \left(\frac{h}{h_*} \right)^k, \quad h \leq h_*,$$

$$h_* = \chi v / \gamma_*, \quad \chi = 3/\zeta_*, \quad \chi = 2,15 \div 2,25, \quad k = 0 \div 0,5.$$

Относительная погрешность Δ приближенного вычисления правой части дифференциального уравнения (2.6) по формулам (2.3), (2.4) по сравнению с расчетом по (2.1) пренебрежимо мала, если мал показатель степени k . В подтверждение на рис. 3 приведены графики погрешности Δ для $k = 0,25; 0,5$ (линии 1, 2). При $k = 0,5$ максимальное значение $\Delta = 6,6\%$. При этом ошибка вычисления h по приближенным уравнениям (2.6) не превышает 1%, что связано с достаточно быстрым убыванием Δ при удалении h от h_* .

Используя обозначения

$$(2.7) \quad h = yh_*, \quad x = h_* \left(\frac{\sigma}{3\mu_0 v} \right)^{1/3} \xi,$$

можно переписать уравнения (2.6) в виде

$$(2.8) \quad \begin{aligned} y^2 y'''' &= 1, & y \geq 1, \\ y^{2-k} y'''' &= 1, & y < 1. \end{aligned}$$

Для тонкого слоя

$$\alpha = -dh/dx$$

и граничные условия (1.1), (1.2) примут вид

$$(2.9) \quad y'' \rightarrow 0, \quad y \rightarrow \infty, \quad y' = -\alpha_m \left(\frac{\sigma}{3\mu_0 v} \right)^{1/3}, \quad y = \frac{h_m}{h_*}.$$

Далее рассматривается предел $h_* \gg h_m$, и поэтому второе граничное условие (2.9) ставится при $y = 0$.

Приближенное решение (1.7) можно переписать с учетом (2.9):

$$(2.10) \quad -y' = (b^3 + 3\Gamma + \ln y)^{1/3}, \quad y \geq 1, \quad b^3 = \frac{\alpha_m^3 \sigma}{3\mu_0 v}.$$

3. Аналитическое решение краевой задачи при больших скоростях смачивания. В случае достаточно больших скоростей ($\alpha_m^3 \sigma \ll 3\mu_0 v$) или полного смачивания в статике, когда краевой угол $\alpha_m = 0$, второе условие (2.9) дает

$$y' = 0, \quad y = 0.$$

Рассмотрим асимптотику решения уравнения (2.8) при $y > 1$ [2]:

$$(3.1) \quad y' = -(3z)^{1/3} \left(1 - \frac{\ln |z|}{9z} + \dots \right), \quad z = C + \ln y \rightarrow \infty$$

(C — параметр). Обозначая через θ неизвестную пока величину угла (в переменных y, ξ) на границе области аномалии вязкости

$$(3.2) \quad y' = -\theta, \quad y = 1,$$

из (3.1) можно найти

$$(3.3) \quad y'' = \frac{1}{\theta} \left(1 - \frac{1}{\theta^3} + \dots \right), \quad y = 1.$$

Обозначим индексом (+) решение при $y > 1$. Тогда, согласно (3.3), при учете одного или двух слагаемых соответственно запишем

$$(3.4) \quad y''_{(+1)} = \frac{1}{\theta}, \quad y''_{(+2)} = \frac{1}{\theta} \left(1 - \frac{1}{\theta^3} \right).$$

Обратимся теперь к области $y < 1$, в которой уравнение (2.8) удобно переписать в форме

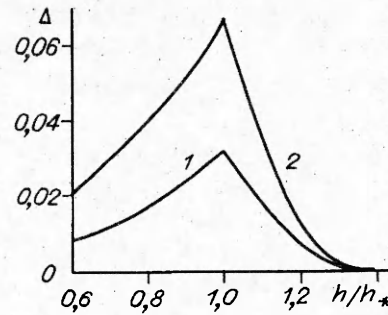
$$(3.5) \quad u^{1/2} u'' = -2y^{k-2}, \quad u = (y')^2.$$

Уравнение (3.5) с условием $y' = 0$ при $y = 0$ имеет точное решение

$$(3.6) \quad u_0 = c_0^2 y^{2k/3}, \quad c_0 = \left(\frac{9}{k(3-2k)} \right)^{1/3}.$$

Приближенное решение можно искать в окрестности u_0 в форме ряда

$$(3.7) \quad u = u_0 + u_1 + u_2 + \dots \quad u_0 \gg |u_1| \gg |u_2|.$$



Р и с. 3

Два первых члена ряда с точностью до произвольной постоянной A имеют вид

$$(3.8) \quad u_1 = Ay^{k_1}, \quad u_2 = -\frac{A^2}{2c_0^2} \frac{k_1(k_1-1)y^{k_2}}{\frac{1}{3}k\left(\frac{2}{3}k-1\right) + k_2(k_2-1)},$$

$$k_1 = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{k}{3}\left(1 - \frac{2k}{3}\right)}, \quad k_2 = 2k_1 - \frac{2}{3}k.$$

Удобно обозначить

$$(3.9) \quad y'_{(-)i} = -\left(\sum_{i=0}^{i-1} u_i\right)^{1/2}.$$

В соответствии с (3.4) и (3.9) неизвестные постоянные θ и A в (3.1) и (3.6)–(3.8) находятся из двух уравнений — условий непрерывности производных:

$$(3.10) \quad y'_{(-)i} = y'_{(+)j}, \quad y = 1, \quad y''_{(-)i} = y''_{(+)j}.$$

Обозначим y' в (3.10) через $-\theta_y$. Расчеты при $k = 1/2$ показывают, что θ_{22} отличается от $\theta_{32} = 1,955$ ($\Gamma = 2,492$) на величину порядка 0,015 %, т. е. учет третьего слагаемого в (3.7) дает слишком высокую точность.

Учет только одного члена асимптотики (3.1) дает значение $\theta_{21} = 1,983$ ($\Gamma = 2,6$), отличающееся от θ_{22} всего на 1,4 %. Следовательно, один член асимптотики (3.1) позволяет с удовлетворительной точностью решать краевую задачу для уравнения (2.8) и правильно описывать решение при $y > 1$.

Особо интересно значение θ_{11} , которое определяется без учета второго уравнения (3.10), по первому слагаемому (3.7) — точному решению u_0 , причем независимо от решения при $y > 1$

$$(3.11) \quad \theta_{11} = \left(\frac{3}{k(1-2k/3)}\right)^{1/3}.$$

При $k = 0,5$ погрешность решения $\theta_{11} = 2,08$ составляет всего 6,3 %.

Интересна оценка эффективности решения (1.7) $\theta^3 = 3/k$. При $k = 1/2$ погрешность значения $\theta = 1,82$, соответствующего (1.7), по сравнению с точным расчетом составляет всего 7 %. При меньших k ошибка еще меньше. Таким образом, при $k \leq 1/2$ пригодны оба решения (1.7) и (3.11), причем точное значение угла θ лежит примерно посередине между ними.

4. Асимптотическое обоснование приближенных аналитических решений при $k \rightarrow 0$. Полученные выше аналитические решения можно подкрепить рассмотрением асимптотики решения краевой задачи (2.8), (2.9) в пределе малых значений k ($k \rightarrow 0$), которая находится из (3.1)–(3.10) в следующем точном виде:

$$(4.1) \quad \theta = \left(\frac{3}{k(1-2k/3)}\right)^{1/3} \left(1 - \frac{1}{3}k^2 + o(k^2)\right), \quad k \rightarrow 0, \quad \theta = -y'|_{y=1}.$$

Главный член асимптотики (4.1) соответствует приближенному решению для Γ при $h_m = 0$ в (1.7), полученному на основе принципа медленного изменения угла с расстоянием h [1] и малости значения k ($k \ll 1$).

В пренебрежении слагаемым $(1/3)k^2$ в (4.1) получается формула (3.11), которая асимптотически точнее главного члена формулы (4.1).

Можно заключить из приведенного сравнения, что эффективность приближенных аналитических решений задачи о значении угла на границе области аномалии вязкости с областью постоянной вязкости обусловлена их совпадением с одним или двумя членами асимптотики (4.1).

5. Решение краевой задачи при малых скоростях смачивания. В случае больших значений параметра

$$b^3 = \frac{\alpha_m \sigma}{3\mu_0 v} \gg 1$$

асимптотика решения уравнения (2.8) для $y \ll 1$ с учетом (3.5) может быть найдена в форме

$$(5.1) \quad y' = -b \left(1 + \frac{2}{b^2(1-k)k} y^k + c_1 y + \dots \right)^{1/2},$$

где c_1 — произвольная постоянная. Условие применимости формулы (5.1) при $y \leq 1$ и $c_1 \ll 1$ имеет вид

$$b^3 \gg \frac{1}{k(1-k)}.$$

Асимптотическое решение краевой задачи (2.8), (2.9) при $b \rightarrow \infty$ с учетом (3.1), (3.2), (5.1) позволяет найти угол θ и значение Γ в (2.10):

$$(5.2) \quad \Gamma = \frac{1}{3} \theta^3 = \frac{k+1}{k}, \quad b \rightarrow \infty.$$

Важно, что формула (5.2) пригодна для любых k . Интересно сравнить ее с (3.11), справедливой при $b = 0$, и с (1.7). Ясно, что формулы совпадают при $k \rightarrow 0$. Сравнение указанных формул при конечных k дано на рис. 4, откуда видно, что формулы (3.11) и (5.2) дают для θ практически одинаковые результаты, различающиеся не более чем на 1,3 % при $k \leq 1/2$. В случае (1.7) погрешность значений $\alpha(h_*)$ не превышает 14,5 %. Следовательно, формула (3.11), полученная для малых значений параметра b , хорошо работает и при больших его значениях. Естественно ожидать поэтому ее применимости и при промежуточных значениях параметра $b \sim 1$, т. е. всюду.

Отметим, что справедливые при произвольных значениях параметра b и $k \leq 1/2$ формулы (1.7) и (3.11) дают оценки угла α сверху и снизу соответственно, причем эти оценки близки.

Полученные результаты подтверждают эффективность формулы (1.7), которая была выведена не только для малых значений углов, но и для их конечных значений.

6. Формулы масштаба области аномалии вязкости и границы применимости реологического подхода. В экспериментах используются полимерные жидкости существенно различных молекулярных весов. В связи с этим интересно оценить зависимость масштаба аномалии вязкости от молекулярного веса полимера или от степени полимеризации (числа звеньев в цепной молекуле) N .

Известно [8, 10], что наибольшее время релаксации полимерной жидкости τ ведет себя с увеличением степени полимеризации N так же, как наибольшая вязкость:

$$\tau \sim N^{3,4}, \quad \mu_0 \sim N^{3,4}.$$

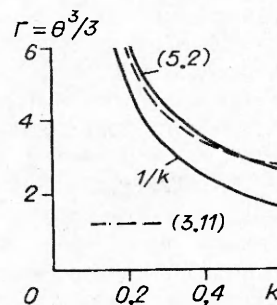
Характерная критическая скорость сдвига $\dot{\gamma}_* \sim 1/\tau$, поэтому критическое напряжение p_* не зависит от степени полимеризации N :

$$(6.1) \quad \mu_0 \dot{\gamma}_* = p_* = \text{const}.$$

Запишем на основании (2.6) зависимость критического масштаба h_* от капиллярного числа $Ca = \mu_0 v / \sigma$:

$$(6.2) \quad h_* = \frac{\kappa \sigma}{p_*} Ca = \beta Ca.$$

Коэффициент поверхностного натяжения σ не зависит от степени полимеризации N , поэтому в силу (6.1) коэффициент пропорциональности β в формуле (6.2) также не зависит от степени полимеризации N . Этот принципиальный факт можно назвать теоремой инвариантности формулы масштаба области аномалии вязкости $h_* = \beta Ca$ относительно степени полимеризации N или молекулярного веса полимера.



Р и с. 4

Масштаб h_* удобно также выразить через макроскопический угол α_0 , рассчитанный приближенно без учета аномалии вязкости по формуле (1.7) для случая статически полного смачивания:

$$(6.3) \quad h_* = \alpha_0^2 H, \quad H = \frac{\sigma}{4\mu_0 \gamma_* \ln(h_0/h_m)}$$

Формулы (6.2) и (6.3) позволяют найти границы применимости реологического подхода, вытекающие из ограничений макроскопического описания. Укажем сначала аналогичные ограничения для случая ньютоновской жидкости.

В методе асимптотического решения задачи о динамическом краевом угле смачивания, основанном на неравенстве $\ln(h_0/h_m) \gg 1$, т. е. наличии большого параметра в задаче, допускается [2] возможность значительных ошибок, порядка 100 %, в описании течения вблизи границы $h = h_m$, однако эти ошибки асимптотически мало сказываются на решении в области $h \rightarrow \infty$, которое подлежит определению. В частности, изменение значения минимальной высоты h_m свободной поверхности в e раз слабо сказывается на решении $\alpha(h)$ при $h/h_m \rightarrow \infty$, так как приводит к изменению угла α всего лишь на малый множитель порядка $1/(3 \ln(h/h_m)) \ll 1$. Отметим также, что в этом методе из задачи исключается область масштаба нескольких размеров молекул, течение в ней принципиально не может рассматриваться.

Отсюда ясно, что трудно надеяться на точность макроскопического описания лучше, чем 100 %, в случае течения неньютоновской жидкости в области масштаба нескольких размеров молекул. В пользу такой оценки для задачи со свободной границей говорит и формула (1.7).

Из существования минимального значения масштаба области аномалии вязкости h_* в силу (6.3) вытекает существование критического минимального угла α_{\min} , при котором и меньше которого отсутствует возможность макроскопического описания области аномалии вязкости:

$$(6.4) \quad \alpha_{\min} = \alpha_0, \quad h_* = \min h_* = 4a.$$

Здесь принято значение $4a$, потому что при этом характерное среднее значение толщины «клина», в котором рассматривается течение, равно только двум размерам молекул, так как среднее значение (масштаб) толщины малой области равно примерно половине максимальной толщины, т. е. $0,5h_*$.

В соответствии с формулами (6.3), (6.4) минимально допустимый угол

$$(6.5) \quad \alpha_{\min} = (4a/H)^{1/3}.$$

При минимальном значении угла $\alpha_0 = \alpha_{\min}$ реологический подход имеет меньше смысла, чем исключение из рассмотрения течения в малой микроскопической области масштаба 2—3 молекул. И только при достаточно больших значениях угла можно ожидать пригодности реологического подхода к замыканию теории на малом масштабе.

Рассмотренный эффект проявления реологии полимерной жидкости только при больших значениях динамического угла α_0 противоположен эффекту влияния сил Ван-дер-Ваальса, которые оказывают существенное влияние на угол α_0 только лишь при его предельно малых значениях ($\alpha_0 \ll 1$) [2]. Последний вывод получен в [2] на основании асимптотических формул, которые хорошо согласуются с численными расчетами [11].

Отметим, что вывод о возможности применения реологического подхода только при достаточно больших углах не ограничен конкретным реологическим уравнением состояния и имеет общий характер.

7. Сравнение теории с экспериментом. Представляет интерес определить влияние учета аномалии вязкости на теоретическую кривую зависимости краевого угла от скорости для случая движения границы раздела газ — жидкость в круглом капилляре, которая без учета реологии, как известно [1, 12], согласуется с экспериментом для полимерных жидкостей [13] и для низкомолекулярных жидкостей [14].

В динамике смачивания полностью смачивающей жидкостью ($\alpha_m = 0$) круглого капилляра радиуса h_k краевой угол α_0 в случае постоянной вязкости $\mu = \text{const}$ на основе (1.5) определяется формулами

$$(7.1) \quad \alpha_0^3 = \frac{9\mu_0\nu}{\sigma} f, \quad \alpha_0 \leq 145^\circ,$$

$$(\pi - \alpha_0)^3 + \frac{9\pi}{4} \ln \frac{1 - \cos \alpha_0}{1 + \cos \alpha_0} = \frac{9\mu_0\nu}{\sigma} f, \quad \alpha_0 > 145^\circ,$$

$$f = \ln(h_0/h_m), \quad h_0 = (1/2) \alpha_0^2 h_k, \quad \alpha_0 < 32^\circ; \quad h_0 = 0,16h_k, \quad \alpha_0 \geq 32^\circ.$$

Значение постоянной 0,16 найдено приближенным расчетом в [1] для $\alpha_0 \sim \pi/2$.

В варианте теории с учетом реологии коэффициент f в (7.1) определяется другой формулой

$$(7.2) \quad f = \Gamma + \ln \frac{h_0}{h_*},$$

где h_* определено (6.2) и $\Gamma = 2,5$ при $k = 1/2$. Заметим, что для $\alpha_0 > (3/4)\pi$ значения Γ и h_* в (7.2) имеют смысл экстраполяционных, так как значения угла в малой области аномалии вязкости $\alpha(h_*) \sim \pi/2$ не малы.

Необходимую для расчета h_m величину диаметра a молекулы можно оценить по диаметру сферы эквивалентного объема:

$$(7.3) \quad a = \left(\frac{6m}{\rho} \right)^{1/3}.$$

Здесь ρ — плотность жидкости; m — масса молекулы. Молекулярный вес силоксановой жидкости вязкости $\mu_0 = 988$ П, применяемой в [13], $M = 1,2 \cdot 10^5$ ($N = 1620$), при $\mu_0 = 9,58$ П $M = 18500$ ($N = 250$). При этом характерный молекулярный размер по (7.3) соответственно

$$(7.4) \quad a = 72 \cdot 10^{-8} \text{ см}, \quad a = 39 \cdot 10^{-8} \text{ см}.$$

Характерное значение диаметра молекулы (7.3) близко к среднему значению расстояния между центрами тяжестей соседних молекул, которое не зависит от степени переплетения полимерных молекул между собой в отличие от истинного размера молекулы.

Можно рассмотреть оценки размера полимерных молекул по статистической теории [10]. В предположении свободного движения цепной молекулы (без учета ее взаимодействия с соседними) средний квадрат расстояния между ее концами

$$\langle r^2 \rangle = 2c_\infty l^2 N,$$

причем длина связи $l = 1,64 \cdot 10^{-8}$ см, а постоянная $c_\infty = 6,43$ в случае полидиметилсилоксана [10]. Если сопоставить приближенно $a^2 \approx \langle r^2 \rangle$, то получим следующие оценки:

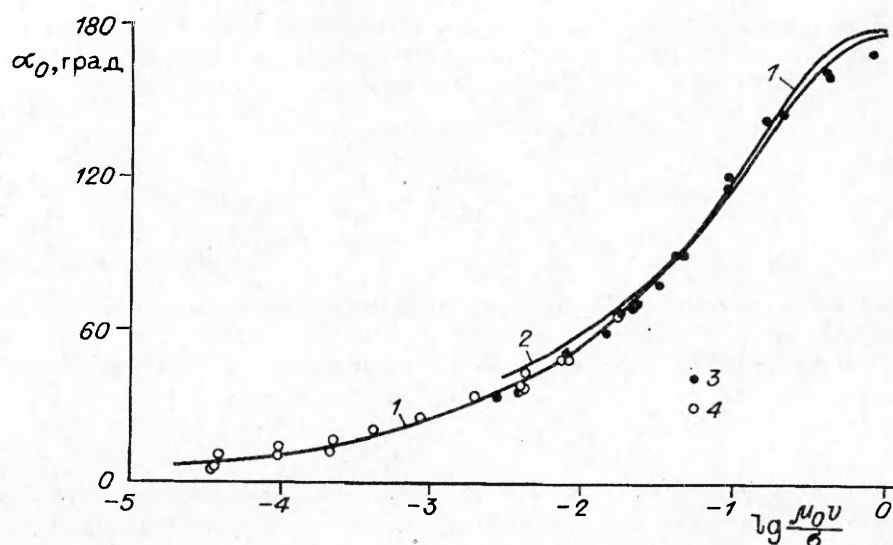
$$a \leq 90 \cdot 10^{-8} \text{ см}, \quad N = 250; \quad a \leq 230 \cdot 10^{-8} \text{ см}, \quad N = 1620.$$

По-видимому, это завышенные оценки, но они не сильно, всего в 2—3 раза, отличаются от (7.4).

Если определить значение $h_m = 2a$ по (7.4), то $h_m = 0,8 \cdot 10^{-6}$ и $1,4 \cdot 10^{-6}$ см, что дает некоторое расслоение теоретических кривых. Однако это расслоение мало и за величину h_m принято среднее значение $h_m = 10^{-6}$ см [12], что обоснованно, потому что изменение величины h_m в 1,4 раза приводит к изменению расчетного значения угла α_0 не более чем на 1 %, а это не превышает допустимую погрешность вычислений.

Используя приведенные значения коэффициентов, можно определить значения параметров β и H в формулах масштаба области аномалии вязкости (6.2), (6.3), которые в рассматриваемом случае экспериментов [13] при $\mu_0 = 988$ П, $\sigma = 21,7$ дин/см, $\gamma_* \sim 150$ с⁻¹, $h_k = 10^{-1}$ см имеют вид

$$\beta = 3,3 \cdot 10^{-4} \text{ см}, \quad H = 3,8 \cdot 10^{-6} \text{ см}.$$



Р и с. 5

С учетом этих значений из формулы (6.5) при $N = 1620$ находим величину минимально допустимого угла $\alpha_{\min} = 52^\circ$. При этом расчеты области минимального масштаба по реологическим формулам имеют смысл для несколько больших значений углов ($\alpha_0 \geq 90^\circ$) [4]. Если увеличивать степень полимеризации N , то значение минимально допустимого угла будет медленно возрастать.

Для случая силоксановой жидкости относительно малой вязкости ($\mu_0 = 9,58$ П ($N = 250$)) значение критического угла $\alpha_{\min} \sim 35^\circ$ и соответственно реологический подход имеет смысл при $\alpha_0 > 50^\circ$. Заметим, однако, что в случае $N = 250$ модель степенной зависимости вязкости от скорости сдвига плохо применима.

На рис. 5 дано сопоставление теории, справедливой в рамках ньютоновской жидкости с условием замыкания при минимальном масштабе $h = h_m$ [1] (формулы (7.1) — кривая 1), с теорией, учитывающей реологию (формулы (7.1), (7.2) — кривая 2), и экспериментом [13] (точки 3, 4 — $\mu_0 = 988$ и $9,58$ П). Из приведенных данных видно, что реологический метод непрерывного замыкания при $h = 0$ согласуется там, где он пригоден, с методом, предполагающим постоянство вязкости ($\mu = \text{const}$). Этот результат соответствует аналогичному выводу о согласии результатов расчетов с учетом реологии и расчетов в предположении $\mu = \text{const}$ в случае задачи самопроизвольного растекания капли на твердой поверхности [1].

Экстраполяция формул реологического подхода в область краевых углов, сравнимых с π , дает результаты, несколько лучше согласующиеся с экспериментом, чем по теории $\mu = \text{const}$, как это видно из рис. 5.

В случае полимерной жидкости [13] с наибольшей вязкостью ($\mu_0 = 988$ П) большое значение граничного минимального краевого угла ($\alpha_{\min} = 52^\circ$) и обоснованность реологического подхода при еще больших значениях угла ($\alpha_0 \geq 90^\circ$) делают невозможным теоретическое описание существенной части экспериментальных точек из [13] при помощи реологического подхода. В случае полимерной жидкости [13] с $\mu_0 = 9,58$ П большая часть экспериментальных данных остается вне области применимости метода замыкания теории с учетом реологии на основе постановки условия непосредственно на твердой поверхности при $h = 0$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Воинов О. В. Гидродинамика смачивания // Изв. АН СССР. МЖГ.— 1976.— № 5.— С. 76—84.
2. Воинов О. В. Об углах наклона границы в движущихся жидких слоях // ПМТФ.— 1977.— № 2.— С. 92—99.

3. Воинов О. В. Нелинейная теория динамики вязкой жидкости со свободной границей в процессах смачивания твердого тела // Межд. конф. «Задачи со свободными границами в механике сплошной среды». — Новосибирск, 1991.
4. Voinov O. V. Nonlinear theory of dynamics of a viscous fluid with a free boundary in the process of a solid body wetting // Int. Ser. Numer. Math.— Basel: Birkhäuser Verlag, 1992.— V. 106.— P. 351—358.
5. Воинов О. В. Гидромеханика капиллярных явлений при движении контакта трех фаз по твердой поверхности // VIII Всесоюз. съезд по теорет. и прикл. механике.— М., 1991.
6. Dussan V. E. B. On the spreading of liquids on a solid surfaces: static and dynamic contact lines // Ann. Rev. Fluid Mech.— 1979.— V. 11.— P. 371—400.
7. Пухначев В. В., Солонников В. А. К вопросу о динамическом краевом угле // ПММ.— 1982.— Т. 46, вып. 6.— С. 961—971.
8. Миддлман С. Течение полимеров.— М.: Мир, 1971.
9. Johnson G. C. Flow characteristics of linear, end — blocked dimethylpolysiloxane fluids // J. Chem. Eng. Data.— 1961.— V. 6, N 2.— P. 275.
10. Флори П. Статистическая механика цепных молекул.— М.: Мир, 1971.
11. Воинов О. В. Гидродинамическая теория смачивания.— Новосибирск, 1988.— (Препр./ИТ СО АН СССР; № 179—88).
12. Воинов О. В. Асимптотика свободной поверхности вязкой жидкости при ползущем движении и зависимость краевого угла смачивания от скорости // ДАН СССР.— 1978.— Т. 243, № 6.— С. 1422—1425.
13. Hoffman R. L. A study of advancing interface. I. Interface shape in liquid-gas systems // J. Colloid and Interface Sci.— 1975.— V. 50.— P. 228.
14. Железный Б. В. Экспериментальное исследование динамического гистерезиса краевого угла // ДАН СССР.— 1972.— Т. 207, № 3.— С. 647—650.

г. Тюмень

Поступила 8/II 1993 г.

УДК 537.525

В. А. Швейгерт, М. И. Жиляев, И. В. Швейгерт

МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНОСИЛАНОВОЙ ПЛАЗМЫ ВЧ-РАЗРЯДА

Численными методами исследуется моносилановая плазма ВЧ-разряда. Проводится сравнение результатов расчетов кинетики электронов методом Монте-Карло и расчетов в гидродинамическом приближении. Показано, что гидродинамическая модель хорошо работает во всем диапазоне параметров плазмохимического реактора, используемого для осаждения пленок аморфного кремния. В рамках гидродинамического приближения исследуются зависимости от мощности разряда и давления в реакторе важных для осаждения параметров плазмы, таких как частота диссоциации моносилана, энергия и поток ионов на электроды.

1. Введение. Интерес к моносилановой (SiH_4) плазме тлеющего разряда, возникающей в плазмохимических реакторах низкого давления при осаждении тонких пленок гидрогенизированного аморфного кремния ($\alpha\text{-Si:H}$), определяется широким применением этих пленок в качестве технологического материала в микроэлектронике. Для организации стимулированного плазмой осаждения из газовой фазы (PECVD) тонких пленок $\alpha\text{-Si:H}$ чаще всего используют планарные плазмохимические реакторы с двумя параллельными электродами (diode geometry [1]). Смесь газов подается обычно через отверстие в верхнем электроде, пластина располагается на нижнем (заземленном) электроде. Характерные параметры существующих установок: частота приложенного напряжения $f = 13,6$ МГц, давление газа $p = 13,3\text{—}133,3$ Па, межэлектродное рас-