

## ВПЛИВ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ НА ЕФЕКТИВНІСТЬ РОБОТИ ДИЗЕЛЯ

*Вплив стаціонарної та нестаціонарної теплопровідності на ефективність роботи дизеля. На атомно-молекулярному рівні визначено структуру складних молекул, які забезпечують процес теплопередачі. Встановлено структуру твердого тіла і адгезійного шару на при русі рідини або газу як теплоносія. Розроблено механізм передачі теплової енергії від твердого тіла до рідинного або газового теплоносія і навпаки. З'ясовано умови оптимального використання водяного і газоподібного теплоносія для забезпечення ефективного теплообміну.*

**Ключові слова:** стаціонарна і нестаціонарна теплопровідності, теплообмін, нанорівні, атомно-молекулярний рівень.

**Вступ.** При роботі теплових двигунів відбувається передача енергії твердого тіла від нагрітого газу всередині камери згоряння та охолодження твердого тіла при його розігріві. У першому випадку виникає конвективний і променевий теплообмін, а в другому – теплообмін з навколишнім середовищем реалізувати складніше. Виникають проблеми, зумовлені адсорбцією і десорбцією часток навколишнього середовища з поверхнею твердого тіла, в результаті відбувається передача енергії від нагрітого твердого тіла до навколишнього газу або до рідини із забезпеченням ефективного охолодження. У цьому випадку виникають явища, на межі переходу двох агрегатних станів. Що собою являє ця межа і який вплив чинять явища адгезії і десорбції на процеси теплообміну між твердим тілом, газом і рідиною залишається незрозумілим.

**Постановка проблеми.** Мета: створити моделі різних процесів теплопередачі на межі двох агрегатних станів з урахуванням останніх досягнень в тій області на нанорівні.

Поставлена мета може бути досягнута шляхом вирішення наступних завдань:

- на атомно-молекулярному рівні визначити структуру складних молекул, які забезпечують процес теплопередачі;
- визначити нанокластерну структуру твердого тіла і адгезійного шару в процесі взаємодії з навколишнім середовищем при наявності градієнта температури;
- розробити механізм передачі теплової енергії від твердого тіла до рідкого або газового теплоносія;
- з'ясувати умови оптимального використання рідинного або газоподібного теплоносія для забезпечення ефективного теплообміну.

Нижче розглянемо сформульовані завдання, що застосовується до працюючого дизелю. При розгляді теплообміну між твердим тілом і рідиною або газом слід розглядати два випадки: 1) коли теплоносій має температуру вище температури поверхні твердого тіла; 2) коли теплоносій має температуру менше температури поверхні твердого тіла. При аналізі процесу теплопередачі в обох випадках необхідно з'ясувати, яким чином відбувається адсорбція і десорбція часток навколишнього середовища на поверхні твердого тіла.

**Результати досліджень. 1. Адсорбція часток навколишнього середовища на поверхню твердого тіла.** Ефективність адсорбції часток навколишнього середовища на поверхні твердого тіла визначається енергією зв'язку цих часток з кластерною структурою твердого тіла. Кожна клітинка адсорбції формується числом часток, яке визначається кристалічною структурою кластерних часток або міжкластерною структурою твердого тіла. При цьому розглядається бінарна взаємодія з кожною окремою часткою тієї структури, яка являє собою осередок адсорбції. Потенціал бінарної взаємодії для ковалентного зв'язку представляється у вигляді [1]:

$$E_{\text{св.рез}} = \begin{cases} -\frac{2E_{\text{св}}R_0^6}{r^6} + \frac{E_{\text{св}}R_0^{12}}{r^{12}}, & \text{при } r \leq R_0; \\ \sum_{i=1}^3 N_i \kappa_i^2 \left[ \sum_{k=0}^3 \sum_{l=0}^3 Z_{a,k}^* Z_{b,l}^* \int_{(a)} \int_{(b)} \rho_{e,a}(\varepsilon_k) \rho_{e,l}(\varepsilon_l) \left( \frac{H_{1,1} + H_{1,2}}{1+S} \right) d\varepsilon_k d\varepsilon_l \right] & \text{при } r > R_0. \end{cases} \quad (1)$$

Тут  $R_0$  – рівноважний відстань між взаємодіючими частками;  $E_{\text{св}}$  – результуюча енергія зв'язку на рівноважному відстані;  $N_i$  – кількість частинок в  $i$ -й координаційній сфері;  $\kappa_i$  – коефіцієнт видноти;  $Z_{a,k}^*$ ,  $Z_{b,l}^*$  – ефективні заряди взаємодіючих часток;  $\rho_{e,a}(\varepsilon_k)$ ,  $\rho_{e,b}(\varepsilon_l)$  – розподіл електронної щільності навколо силових центрів взаємодіючих частинок в  $k$ -му та  $l$ -му енергостанах;  $H_{1,1}$ ,  $H_{1,2}$  та  $S$  – відповідно квантово-механічні інтеграли: кулонівський, обмінний і перекриття.

Енергію іонного зв'язку для однакових частинок визначають наступним чином:

$$E_{\text{ион}} = \Theta S \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{a,b}}, \quad (2a)$$

де  $\Theta = 2P_1 = 0,25 + 0,25 = 0,5$ .

Для різних частинок енергія іонного зв'язку виражається більш складно, а саме [2]:

$$E_{\text{ион},1} = \frac{P_1(1-P_2)S(1-S)e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{a,b}}; \quad (2б)$$

$$E_{\text{ион},2} = \frac{P_2(1-P_1)S(1-S)e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{a,b}}.$$

Тут враховано таку обставину. Якщо валентний електрон першої частинки перейшов до другої, то валентний електрон другої не переходить до першої зі спільною ймовірністю  $(1 - P_2)(1 - S)$ . Аналогічно відбувається перехід валентного електрона другої частинки до першої (друга формула у (2б)).

Якщо розглядати взаємодію однакових частинок, які утворюють двоатомні молекули, то енергія зв'язку точкового заряду з диполем визначається наступним виразом [1]:

$$E_{e-d} = j(1-S) \frac{ep_s}{4\pi\epsilon_0 r_e^2}, \quad (3)$$

де  $r_e$  – рівноважна відстань між центрами атомів в двоатомній молекулі. Поява члена  $(1 - S)$  в (3) обумовлено тим, що взаємодія точковий заряд–диполь не реалізується при знаходженні обох валентних електронів поблизу одного з атомів. У цьому випадку виникає іонний зв'язок і повністю виключається взаємодія точковий заряд–диполь. Якщо обидва взаємодіючі атоми володіють дипольним електричним моментом, то  $j = 2$ , а якщо один з них, то  $j = 1$ . У загальному випадку диполь–дипольну взаємодію слід визначати наступним чином:

$$E_{\text{дун-дун}} = \frac{p_{s,1}p_{s,2}\phi(\alpha_i, N_i)}{4\pi\epsilon_0 R_i^3}. \quad (4)$$

Тут  $R_i$  – відстань між взаємодіючими частинками, що визначається структурою кристала або щільністю речовини;  $\phi(\alpha_i, N_i)$  – функціональний зв'язок від взаємного розташування електричних диполів в структурі конденсованого середовища;  $p_{s,1}$  та  $p_{s,2}$  – електричні моменти взаємодіючих диполів. Для простої кубічної структури енергія зв'язку частинок визначається за формулою [1]:

$$E_{\text{дун}} = \frac{8p_s^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \left( -1 + \frac{0,5776}{2^{3/2}} - \frac{0,669}{3^{3/2}} \right). \quad (5)$$

З урахуванням будови кристала і взаємного розташування диполів один до одного в об'ємцентрованій кубічній структурі отримуємо такий вираз для визначення диполь–дипольної взаємодії всередині кристала [2]:

$$E_{\text{дун}} = \frac{8p_s^2}{4\pi\epsilon_0 R^3}. \quad (6)$$

Таким чином, складне за своєю конфігурацією електричне поле, що формується диполями в кристалічних структурах, призводить до того, що слід враховувати взаємне розташування диполів один до одного, яке визначається будовою кристала. Диполь–дипольна взаємодія послаблюється крутильними коливаннями електричних диполів у площинах  $XZ$  і  $YZ$ . Це два ступені свободи, тому  $E_{\text{дун,pez}}(1) = E_{\text{дун}} + k_B T$ . При взаємодії з другим та третім координаційними шарами додаються ще два ступені свободи, зумовлені коливаннями частинок речовини в площині, перпендикулярній радіусу, що з'єднує взаємодіючі частинки:

$$E_{\text{дун,pez}}(2,3) = E_{\text{дун}} + 2k_B T. \quad (7)$$

Корпус теплового двигуна виготовлений з жароміцної сталі, основою якої є кластерна гратчаста структура заліза. Деякі деталі теплового двигуна виготовлені з твердих сплавів алюмінію, основу яких становить кластерна гратчаста структура алюмінію. З такою кластерною структурою взаємодіють молекули повітря, а це 21 % молекул кисню і 79 % молекул азоту.

**2. Основні енергетичні параметри молекул кисню та азоту.** У валентній області молекул кисню та азоту перебувають два електрони. Для першого зовнішнього електрона енергія зв'язку є енергією іонізації. Для молекули кисню це  $\theta_i = 12,071$  эВ, а для молекули азоту –  $15,581$  эВ [3–4] с ефективним радіусом обертання відповідно  $0,957$  та  $1,04$  Å [3]. Другу кратність іонізації можна визначити, використовуючи метод, запропонований Слетером [5]. Відповідно до цього методу середнє видалення електрона в полі центральних сил представляється у вигляді:

$$\bar{r} = \frac{(2n^* + 1)n^*}{2(Z - \gamma)} a_0, \quad (8)$$

де  $n^* = \sqrt{E_H / \theta_i}$  – ефективне головне число;  $a_0$  – радіус першої орбіти Бора;  $(Z - \gamma)$  – ефективний заряд.

При визначенні радіуса обертання другого валентного електрона слід ефективний заряд збільшувати на 0,35. Тоді радіус електрона другий кратності іонізації для молекули кисню буде 0,693 Å, а для молекули азоту – 0,700 Å. Звідси друга кратність іонізації для кисню складає 37,5 еВ, а для азоту – 42,28 еВ. Окрім атоми кисню та азоту містять вбудовані електричні моменти, які в двоатомних молекулах перебувають у вигляді позитивних іонів. Для іона азоту вбудований електричний момент дорівнює  $1,19 \cdot 10^{-30}$  Кл·м, а для іона кисню  $3,202 \cdot 10^{-30}$  Кл·м [2]. Ці вбудовані дипольні електричні моменти в двоатомних молекулах під дією ковалентного зв'язку взаємно компенсуються, утворюючи нестійку рівновагу. Наявність вбудованих електричних моментів в двоатомних молекулах слід враховувати при різних взаємодіях молекул з іншими частками. Для молекул повітря  $N_2$  і  $O_2$  були виконані відповідні розрахунки і отримані значення потенціалів іонізації, розмірів орбіт обертання валентних електронів і ефективних зарядів. Ці дані наведені в таблиці 1. Ефективні радіуси цих молекул  $r_{N_2} = 0,985$  Å  $r_{O_2} = 0,962$  Å.

Таблиця 1

Значення потенціалів іонізації, розмірів орбіт обертання, ефективних зарядів та міжядерної відстані молекул азоту і кисню

Молекула	Основні параметри					
	$\theta_{i,1}$ , еВ	$\theta_{i,2}$ , еВ	$r_1$ , Å	$r_2$ , Å	$Z_1^*$	$Z_2^* r_{e_1}$ , Å
$N_2$	15,58	41,19	1,020	0,736	1,103	2,103
$O_2$	12,08	37,02	0,952	0,700	0,797	1,207

Молекули кисню та азоту взаємодіють між собою і один з одним. Максимальна енергія бінарної взаємодії реалізується, коли розташування цих молекул одна відносно одної буде таке, яке наведено на рисунку 1. При такому розташуванні двоатомних молекул результуюча енергія зв'язку:

$$E_{св.} = E_{ков.} + E_{ион.} + E_{e-d} + E_{d-d}. \quad (9)$$

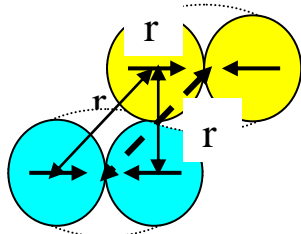


Рис. 1. Розміщення двоатомних молекул при їх взаємодії

Конкретний розрахунок всіх видів взаємодій, виконаний за (1)–(8) з урахуванням ефективних радіусів молекул, наведено в таблиці 2. Оскільки енергія зв'язку між двоатомними молекулами в повітрі досить велика, то виходить дивна картина. Виходить, що в повітрі як азот, так і кисень повинні перебувати у вигляді кластерних утворень, що складаються з 13 молекул (рис. 2). Такі кластери в повітрі повинні формуватися переважно в зоні тіні, тобто вночі, а вдень під дією сонячного світла вони розпадаються на молекули, внаслідок поглинання оптичного випромінювання починаючи з ближнього інфрачервоного діапазону. Тому в шахтах і в печерах повітря повинне бути зовсім інше. Воно досить насичене кластерами двоатомних молекул. Ситуація цікава і досить складна.

При надходженні повітря в камеру згорання двигуна починають утворюватися кластери двоатомних молекул. Концентрація частинок різко падає, що призводить до зміни тиску в замкнутому об'ємі. На підставі даних таблиць 1 і 2 можливо провести розрахунок енергій фізичної адгезії молекул азоту і кисню на поверхні різних металів. Але для цього необхідно знати будову кластерної ґраткової структури, якою володіє той чи інший метал.

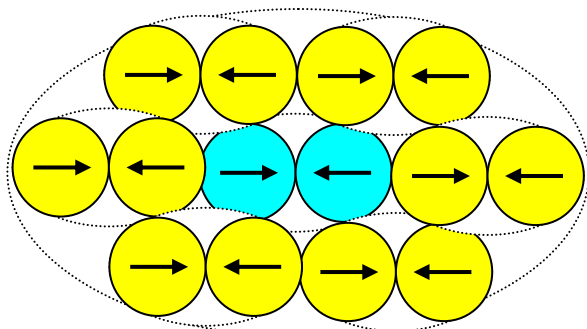


Рис. 2. Структура кластера з двоатомних молекул в горизонтальній площині

**3. Кластерна гратчаста структура алюмінію і заліза.** Кластери заліза володіють об'ємноцентрованою структурою, а кластери алюмінію – гранецентрованою структурою [4]. Структура кластерів алюмінію зображена на рисунку 3, а, а для заліза – на рисунку 3, б. Енергія бінарного зв'язку атомів в основному кластері заліза і алюмінію мають відповідно 1,437 та 1,708 эВ. Дипольний електричний момент іонів стрижня кластерів алюмінію та заліза визначений за методикою, викладеною в [2] і дорівнює відповідно  $1,342 \cdot 10^{-30}$  й  $6,996 \cdot 10^{-30}$  Кл·м.

Таблиця 2

Енергія зв'язку та ковалентні радіуси взаємодіючих молекул

Молекули	Радіуси атомів, Å		Енергія зв'язку, эВ				Результуюча, эВ
	$r_{ков.,1}$	$r_{ков.,2}$	ков.	ион.	$e-\delta$	$\delta-\delta$	
$N_2 - N_2$	0,71	0,71	0,762	0,458	-	0,0067	1,227
$O_2 - O_2$	0,66	0,66	0,799	0,468	-	0,039	1,306
$N_2 - O_2$	0,71	0,66	1,092	0,423	-	0,037	1,552

Зі структури кластерів випливає, що результуючий дипольний електричний момент утворень для алюмінію складає  $13,42 \cdot 10^{-30}$  Кл·м, а для заліза –  $46,6 \cdot 10^{-30}$  Кл·м.

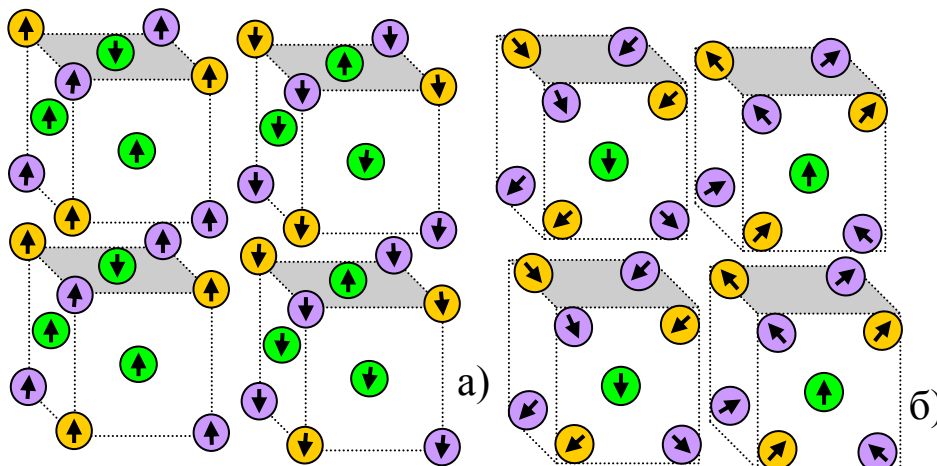


Рис. 3. Гратчаста структура кластерів:

а) гранецентрована для алюмінію; б) об'ємноцентрована для заліза

Розміри кластерів становлять більше одного нанометра. Тому ковалентним і іонним зв'язками можна знехтувати. Тоді міжкластерний зв'язок формується лише електрон-дипольною і диполь-дипольною взаємодією. Електрон-дипольна взаємодія взаємокомпенсується, а енергія диполь-дипольної взаємодії максимально можлива для гранецентрованої структури алюмінію складає:

$$E_{св.,кл.,1} = \frac{p_{\delta}^2}{4\pi\epsilon_0(2r_a)^3} (11,983 - 6,211 + 15,204 - 3,643 + 1,254) = 0,0804 \text{ эВ}, \quad (10)$$

а для об'ємноцентрованої структури заліза –

$$E_{св.,кл.,2} = \frac{4p_{\delta}^2}{4\pi\epsilon_0(2r_a)^3} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{16}\right) = 0,158 \text{ эВ}. \quad (11)$$

Температура, за якої буде ефективно руйнуватися такий зв'язок, для алюмінію становить 932,4 К, а для заліза – 1833 К. За таких температур міжкластерний зв'язок повністю руйнується і не виникає ниткоподібних формувань, як у деяких кераміках. В роботі [1] було показано, що при температурі плавлення в міжкластерних об'ємах багатьох металів формуються двоатомні молекули. Це призводить до різкого зменшення обмінної енергії зв'язку і загального зменшення енергії зв'язку міжкластерної взаємодії стрибкоподібно. При цьому виникає перетворення твердого тіла в рідкий стан, тобто

відбувається плавлення. Щоб таке явище мало місце максимальна енергія диполь–дипольної взаємодії між кластерами не повинна перевищувати енергію теплового руху. Експериментальні дані по температурі плавлення для алюмінію 933 К і для заліза – 1812 К. Збіг з експериментальними даними цілком переконливе і тому, при температурі плавлення в металах повинен відбуватися повний розрив зв'язку між кластерами. Виходить, що плавлення металів виникає не лише коли в міжкластерних об'ємах формуються двоатомні молекули даного металу на підставі [1], але й при цьому максимальна енергія диполь–дипольної взаємодії між кластерами та їх енергія зв'язку повинна приблизно дорівнювати енергії теплового руху. На підставі отриманих результатів зробимо розрахунок енергії зв'язку фізичної адгезії молекул азоту і кисню на кластерах заліза і алюмінію.

**4. Фізична адгезія молекул азоту і кисню на кластерній ґратковій структурі алюмінію і заліза.** Кластери металів розташовуються на поверхні так, щоб енергія зв'язку латеральної взаємодії була максимальною. Фізична адгезія інших часток реалізується в осередках адгезії, які формуються в міжкластерному просторі, як це показано на рисунку 4 для гранецентрованих і об'ємоцентрованих структур. Очевидно, що при такому розташуванні адсорбованих частинок у вигляді двоатомних молекул енергія фізичної адгезії буде максимальною.

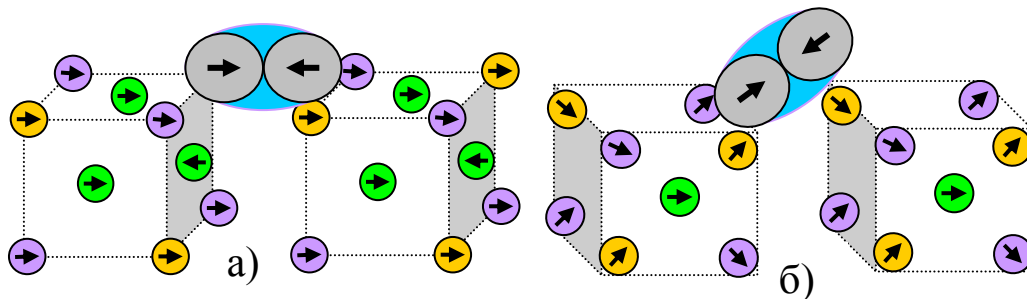


Рис. 4. Розташування двоатомних молекул на поверхні металу:  
а) для алюмінію; б) для заліза

Для гранецентрованої структури енергія адсорбції:

$$E_{\text{адс.}} = \frac{2p_{3,1}p_{3,2}}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{(a+b)^3} - \frac{\cos^2 \left( \arctg \frac{\sqrt{(a+b)^2 - a^2}}{a} \right)}{(a+b)^3} - \frac{2 \cos^2 \left( \arctg \frac{a+b}{\sqrt{5}a} \right)}{\left( \sqrt{(a+b)^2 + 5a^2} \right)^3} \right. \\ \left. + \frac{\cos^2 \left( \arctg \frac{a+b}{2a-r_e} \right)}{\left( \sqrt{(a+b)^2 + (2a-r_e)^2} \right)^3} + \frac{2 \cos^2 \left( \arctg \frac{a+b}{\sqrt{(4a-r_e)^2}} \right)}{\sqrt{r'^2 + (a+b)^2}} \right\}; \quad (12)$$

Аналогічно для об'ємоцентрованої структури маємо:

$$E_{\text{адс.}} = \frac{2p_{3,1}p_{3,2}}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{\cos 45^\circ}{(a+b)^3} - \frac{\cos 45^\circ}{(a+b+r_e)^3} + \frac{\cos \left( \arctg \frac{1}{\sqrt{2}} \right)}{\left( \sqrt{(2a+b)^2 + a^2} \right)^3} - \frac{\cos \left( \arctg \frac{1}{\sqrt{2}} \right)}{\left( \sqrt{(2a+b+r_e)^2 + a^2} \right)^3} \right\}. \quad (13)$$

Тут  $a$  і  $b$  – радіуси взаємодіючих атомів,  $r_e$  – міжядерна відстань в двоатомній молекулі,  $r' = \sqrt{(4a+r_e)^2 + a^2}$  та  $p_{3,1}$ ,  $p_{3,2}$  – відповідно дипольні електричні моменти взаємодіючих іонів.

Виконаний розрахунок енергій фізичної адгезії при розташуванні молекул на кластерних структурах різних твердих тіл за (12) і (13) наведено в таблиці 3. Отже, в процесі зіткнення молекул повітря з нанокластерними структурами різних конструкційних матеріалів при температурі поверхні менше 1000 К будуть адсорбуватися молекули азоту і кисню, а при температурі поверхні більше 1000 К – переважно молекули кисню.

Таблиця 3

Енергія фізичної адгезії молекул азоту та кисню  
на різноманітних поверхнях твердого тіла

Молекули	ГЦК структура Al	ОЦК структура Fe	Структура углерода		
			молекула C <sub>2</sub>	графіт	алмаз
N <sub>2</sub>	0,149	0,090	0,719	0,242	0,139
O <sub>2</sub>	0,422	0,271	2,108	0,690	0,393

Знаючи енергію адсорбції молекул азоту і кисню на поверхні твердого тіла, розглянемо як відбувається процес переносу енергії нагрітим газом до твердого тіла і, навпаки, від нагрітого твердого тіла до холодного газу. У першому випадку процес теплообміну призводить до розігрівання твердого тіла, а в другому випадку навпаки теплопередача призводить до охолодження твердого тіла.

**5. Процес теплопередачі від нагрітого газу до твердого тіла.** Процес теплопередачі від нагрітого газу до твердого тіла в двигуні внутрішнього згоряння виникає всередині камери згоряння. Оскільки внутрішня поверхня камери згоряння виконана з жароміцних сталей (основа залізо), а температура завжди більше 1000 K [7], то адсорбція частинок навколишнього нагрітого газу реалізується налипанням тільки молекул кисню при їх бомбардуванні внутрішньої поверхні камери згоряння внаслідок хаотичного температурного руху молекул повітря. Потік молекул кисню з їх адсорбцією на внутрішню поверхню камери згоряння складає:

$$\dot{N}_{O_2} = \frac{1}{4} W_{O_2} n_0 \bar{v} \chi_{O_2}. \quad (14)$$

Тут  $W_{O_2} = 0,21$  – ймовірність того, що падаюча частка є молекулою кисню;  $n_0 = P/k_B T$  – загальна концентрація частинок в газі;  $\bar{v} = \sqrt{8k_B T / \pi m_a}$  – середньохаотична швидкість руху молекул газу всередині камери згоряння;  $\chi_{O_2} = 1 - \exp(-E_{cv,1} / k_B T)$  – коефіцієнт акомодатії, тобто коефіцієнт фізичної адсорбції молекул кисню на внутрішній поверхні камери згоряння. коефіцієнт  $1/4$  обумовлений тим, що в заданому напрямку нормально до поверхні рухається тільки 1/6 частина молекул газу, а з урахуванням зіткнень під різними кутами цей коефіцієнт зростає до  $1/4$ .

Якщо вираз (14) помножити на час між двома послідовними зіткненнями  $\tau_1 = \lambda_a / \bar{v}$  ( $\lambda_a = 1 / \sqrt{2} \cdot 0,21 n_0 \pi \bar{d}^2$  – довжина вільного пробігу при зіткненні молекул кисню один з одним і  $\bar{d}$  – середній діаметр частинок усередині газу), то отримаємо загальну кількість адсорбованих молекул кисню на одиницю площі внутрішньої поверхні камери згоряння. Загальна кількість місць адсорбції, відповідно до рисунку 4, знаходиться за значенням розміру кристалічної решітки матеріалу камери згоряння, тобто  $\delta_m = (1/2a)^2$ . Тоді ймовірність того, що дане місце адсорбції зайнято молекулою кисню визначиться таким чином:

$$\varphi_1 = \frac{\dot{N}_{O_2} \tau_1}{\delta_m}. \quad (15)$$

Для чотирициліндрового чотиритактного двигуна потік енергії від нагрітого газу на внутрішні стінки камери згоряння складає:

$$\dot{Q} = \frac{1}{4} \left( \frac{P}{k_B T} \right) \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m_a}} [0,21 \cdot (1 - \varphi_1) E_{cv,1} + \varphi_1 k_B (T - T_0) + \theta (1 - \varphi_1) k_B T]. \quad (16)$$

Тут у квадратних дужках перший член відповідає передачі енергії при адсорбції молекул кисню на вільне місце адсорбції, другий – передачі енергії при зіткненні всіх частинок нагрітого газу з адсорбованою молекулою кисню і третій член – передачі енергії при пружному зіткненні всіх частинок нагрітого газу з кластером матеріалу, з якого виготовлена камера згоряння. У свою чергу,  $T$  – температура газу в камері згоряння,  $T_0$  – температура стінки камери згоряння і  $\theta = 4m_a M_{кл.} / (m_a + M_{кл.})$  – коефіцієнт передачі енергії при пружному зіткненні молекул повітря з кластером матеріалу камери згоряння.

За час робочого циклу на внутрішню поверхню камери згоряння буде перенесена енергія:

$$J_{adc.} = \int_0^{1/4f} \dot{Q} S(t) dt, \quad (17)$$

де  $f$  – частота обертання колінчатого валу;  $S(t)$  – внутрішня площа камери згоряння.

Зворотному процесу адсорбції відповідає випаровування. Потік часток з нагрітої поверхні визначено в [7]. Враховуючи це, з внутрішньої поверхні камери згоряння за час робочого ходу поршня буде перенесена енергія:

$$J_{usc.} = \int_0^{1/4f} \dot{N}_{usc.} (E_{cv,1} + k_B T) S(t) dt, \quad (18)$$

де потік випаровування  $\dot{N}_{исп.}$  визначається наступним чином [7]:

$$\dot{N}_{исп.} = \frac{\sqrt{8}}{3\sqrt{\pi m_a}} \frac{1}{d^3} \frac{1}{k_B T_0} \int_{E_{св.}}^{\infty} \left(1 - \frac{E_{св.}}{E}\right)^{1/2} E \exp\left(-\frac{E}{k_B T_0}\right) dE, \text{ 1/м}^2\text{с.} \quad (19)$$

Результуюча енергія, перенесена за час проходження робочого циклу всередині камери згорання, складає:

$$J = J_{адс.} - J_{исп.} \quad (20)$$

Під дією такого потоку енергії в нестационарних умовах безперервно підтримується температура монокластерного шару, що дорівнює температурі навколишнього нагрітого газу. За час  $dT$  монокластерний шар нагріється до температури:

$$dT = J / c_0 \rho S(t) \bar{d}dt, \quad (21)$$

$c_0$  – теплоємність матеріалу, з якого виготовлений двигун;  $\rho$  – його щільність.

Якщо не відбирати від двигуна тепло, то він буде безупинно нагріватися в процесі його роботи. Отже, необхідно двигун охолоджувати. У цьому випадку відбувається теплопередача від твердого тіла до навколишнього газу.

**6. Теплопередача від нагрітого твердого тіла до холодного газу.** Теплопередача від нагрітого твердого тіла до холодного газу має місце для зовнішньої поверхні двигуна внутрішнього згорання. Його зовнішня поверхня має температуру завжди менше 1000 К. Тому на цій поверхні будуть адсорбуватися як молекули кисню, так і молекули азоту.

Адсорбовані молекули кисню та азоту з нагрітої поверхні твердого тіла випаровуються при температурі  $T' = T_{\infty} + \Delta T$ , де  $T_{\infty}$  – температура оточуючого середовища і  $\Delta T$  – різниця температур між нагрітим тілом і навколишньою атмосферою. Згодом поблизу поверхні твердого тіла молекули повітря нерухомої атмосфери досягнуть насичення, і процес випаровування припиниться. Щоб забезпечити безперервний процес випаровування, необхідно створити різниця тисків між поверхнею твердого тіла і оточуючим газом і безперервно цю різницю тиску підтримувати. Для цього можна використовувати закон Бернуллі. Тоді необхідно створювати потік повітря відносно нагрітої поверхні. Розглянемо цю можливість детальніше.

На рисунку 5 показана модель безперервного теплообміну між нагрітим твердим тілом і рухомих потоком повітря. Внаслідок хаотичного руху молекул повітря зовнішня поверхня працюючого двигуна бомбардується молекулами азоту і кисню. Потік молекул кисню визначається за (14) за температури  $T'$ , а молекул азоту

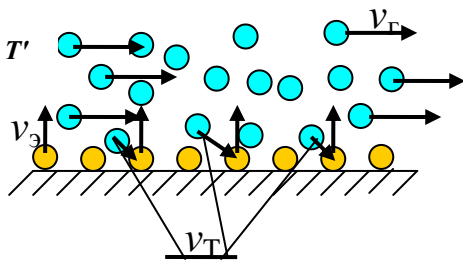


Рис. 5. Модель обміну енергією між нагрітим твердим тілом і рухомих газом

$$\dot{N}_{N_2} = \frac{1}{4} W_{N_2} n_0 \bar{v} \chi_{N_2}. \quad (22)$$

Усі величини, що входять до (22), аналогічні, як для молекули кисню, але зі своїми значеннями ймовірності того, що падаюча молекула є азотом, середньохаотична швидкість і коефіцієнт акомодатції розраховуються для молекул азоту. Примножуючи формулу (14) на час між послідовними зіткненнями молекул кисню, а формулу (22) на час між послідовними зіткненнями молекул азоту, отримуємо значення кількості місць адсорбції, зайнятих молекулами кисню та азоту. Потім за формулою (15) визначаємо ймовірність того, що дане місце адсорбції зайнято азотом, припускаючи його вільним від молекули кисню:

$$\varphi_2 = (1 - \varphi_1) \frac{\dot{N}_{N_2} \tau_2}{\delta_m}. \quad (23)$$

Потік енергії з боку холодного газу на зовнішню поверхню чотирициліндрового двигуна внутрішнього згорання становить:

$$\dot{Q}' = \frac{1}{4} \left( \frac{P}{k_B T_{\infty}} \right) \sqrt{\frac{8k_B T_{\infty}}{\pi m_a}} \left[ (1 - \varphi_1)(1 - \varphi_2)(0,21 \cdot E_{св.,1} + 0,79 \cdot E_{св.,2}) + (\varphi_1 + \varphi_2)k_B T_{\infty} + \theta(2 - \varphi_1 - \varphi_2)k_B T_{\infty} \right], \quad (24)$$

а загальний потік енергії, який переносять частинки повітря на зовнішню поверхню двигуна, дорівнює:

$$J'_{адс.} = \int_0^{1/4f} \dot{Q}' S_{внеш.}(t) dt. \quad (25)$$

При термоемісії адсорбованих молекул азоту і кисню відбувається охолодження поверхні твердого тіла. Потік часток в цьому випадку:

$$\dot{N}_{исп.1(2)} = \frac{\sqrt{8}}{3\sqrt{\pi m_a}} \frac{1}{d^3} \frac{1}{k_B T'} \int_{E_{св.}}^{\infty} \left(1 - \frac{E_{св.1(2)}}{E}\right)^{1/2} E \exp\left(-\frac{E}{k_B T'}\right) dE, \quad (26)$$

а загальний потік енергії:

$$J'_{исп.} = \int_0^{1/4f} [\dot{N}_{исп.1}(E_{св.1} + k_B T') + \dot{N}_{исп.2}(E_{св.2} + k_B T)] S_{внеш.}(t) dt. \quad (27)$$

Температура, до якої охолотитися зовнішній монокластерний шар працюючого двигуна внутрішнього згоряння, становить:

$$dT' = (J'_{исп.} - \dot{Q}') / c_a \rho S_{внеш.} dt. \quad (28)$$

У стаціонарних умовах, відповідно до закону перетворення енергії, отримуємо наступне рівняння:

$$(J_{адс.} - J_{исп.}) S(t) = (J'_{исп.} - \dot{Q}') S_{внеш.}. \quad (29)$$

З цієї умови визначається температура зовнішнього монокластерного шару в кожен момент часу в процесі виконання робочого циклу, тобто:

$$T(t) = (J_{адс.} - J_{исп.}) \frac{S(t)}{S_{внеш.}} \frac{1}{k_B}. \quad (30)$$

За такої температури швидкість потоку емісії:

$$\bar{v}_3 = \frac{1}{2} \left( W_{N_2} \int_{E_{св.2}}^{\infty} v f(v) dv + W_{O_2} \int_{E_{св.1}}^{\infty} v f(v) dv \right). \quad (31)$$

Тут  $f(v)$  – функція розподілу Максвелла за швидкостями.

Рухаючись нормально до поверхні, що емітується, частинки зіштовхуються з молекулами повітря, які рухаються уздовж поверхні. Повне їх гальмування відбудеться після трьох і більше зіткнень. Щоб не відбувся їх зворотний рух, слід емітовані з поверхні частинки відносити потоком повітря, створюваного вентилятором. У цьому випадку:

$$t = \frac{3\lambda_a}{\bar{v}_3} = \frac{L}{v}. \quad (32)$$

Звідси швидкість потоку повітря уздовж зовнішньої поверхні двигуна:

$$v = \bar{v}_3 \frac{L}{3\lambda_a}, \quad (33)$$

де  $L$  – характерний розмір розглянутого двигуна.

Знаючи, яку необхідно забезпечити швидкість руху повітря, обирається вентилятор відповідної потужності. Зробимо конкретний розрахунок теплових втрат, що виникають при роботі дизеля Д-245. Параметри двигуна дані в технічному описі [8].

**7. Порівняння теоретичних розрахунків з експериментальними даними.** Двигун Д-245 з турбонаддувом має експлуатаційну потужність 74 кВт при питомій витраті палива 0,229 кг/(кВт.год.) [8]. В результаті за одну годину роботи двигуна буде витрачено палива 16,946 кг. При повному згорянні палива з теплотворною здатністю 10 600 ккал/кг реалізується виділення теплової потужності 208,8 кВт. ККД двигуна 35,4 %. Гранично можливий коефіцієнт корисної дії не може перевищувати 33,3 % для поршневих теплових двигунів. Незначне збільшення ККД обумовлено тим, що не все враховано в запропонованій моделі. Наприклад, яка кількість масла додатково до палива потрапляє в камеру згоряння. Потужність теплових втрат для двигуна Д-245 складає 134,8 кВт.

Потік тепла на внутрішню поверхню камери згоряння:

$$\dot{Q}_1 = \frac{1}{8} \theta n m_a \bar{v}^3 \chi S, \quad (34)$$

де  $\theta$  – частка енергії, що передається при пружному зіткненні молекул повітря з кластерами оксиду заліза, яка визначена в (16);  $n$  – концентрація молекул повітря в камері згоряння;  $\bar{v} = \sqrt{8k_B T / \pi m_a}$  – середньохаотична швидкість руху молекул повітря;  $\chi = r_a^2 / r_{кл.}^2$  – частка місць адсорбції молекул повітря на поверхні заліза. Протягом робочого ходу поршня потужність за (35), витрачається на розігрів корпусу двигуна становить 108,6 кВт. Потік тепла, що викидається в атмосферу:

$$\dot{Q}_2 = n m_a \bar{v}^2 V / f. \quad (35)$$

Тут  $V$  – робочий об'єм одного циліндра і  $f$  – частота обертання колінчастого вала. Оцінювання за (35) дає значення 14,5 кВт. Отже, паливо в двигуні Д-245 згоряє неповністю. За одну годину роботи двигуна у навколишнє середовище викидається у вигляді незгорілої сажі майже один кілограм. Це відомий експериментальний факт. Дійсно, працюючий дизель скидає в атмосферу сажеві хмари, яка спостерігається візуально.

У двигуні Д-245 застосовано рідинне охолодження. Температура охолоджуючої рідини підтримується в межах 85–95 °С. Тоді різниця температур щодо навколишнього середовища з



температурою 295 К складає 60–70°. Щоб забезпечити потужність тепловідведення від двигуна 108,6 кВт при різниці температур щодо навколишнього середовища в 60–70 °С, необхідно реалізувати площа радіатора з трубками діаметром 6 мм  $\approx 4,38\text{--}3,76\text{ м}^2$ . Якщо площа радіатора  $0,5 \times 0,6\text{ м}^2$  з відстанню між трубопроводами в шарі і між шарами 2 мм, то товщина радіатора повинна бути 4,96–4,25 см, що відповідає його реальній конструкції.

**Висновки.** На підставі проведених досліджень отримані наступні результати:

1. Обґрунтована кластерна структура твердого тіла і адгезійного шару, коли тверде тіло перебуває в рідинному або в газоподібному середовищі.
2. Розроблено теоретичні основи механізму теплообміну між твердим тілом і рідиною або газоподібним середовищем з урахуванням утворення адгезійного шару на поверхні твердого тіла.
3. З'ясовано оптимальні умови ефективного теплообміну між твердим тілом і рухомих потоком рідини або газу.

#### Список використаної літератури:

1. *Гречихин Л.І.* Наночастки та нанотехнології / *Л.І. Гречихин.* – Мн. : Право і економіка, 2008. – 406 с.
2. *Гречихин Л.І.* Нанорівень обґрунтування ОКГ конденсованих середовищ / *Л.І. Гречихин, Ю.Шмермбекк.* – Мн. : ТОВ «Право та економіка», 2010. – 73 с.
3. *Радциг А.А.* Довідник з атомної і молекулярної фізики / *А.А. Радциг, Б.М. Смирнов.* – М. : Атоміздат, 1980. – 240 с.
4. Довідник хіміка : в 6 т. Т. 1. Загальні відомості : Будова речовини, властивості найважливіших речовин, лабораторна техніка. – М.–Л. : Хімія, 1971. – 1072 с.
5. Фізичні величини : довідник / *А.П. Бабічев, Н.А. Бабушкіна А.М. Братковський та ін.* ; за ред. *І.С. Григор'єва, Е.З. Мейліхова.* – М. : Вища школа, 1991. – 1232 с.
6. *Гомбаи П.* Проблема багатьох часток в квантовій механіці / *П.Гомбаи.* – М. : ІЛ, 1952. – 279 с.
7. *Гречихин Л.І.* Двигуни внутрішнього згоряння. Фізичні основи технічної діагностики та оптимального управління / *Л.І. Гречихин.* – Мн. : Наука і техніка, 1995. – 270 с.
8. Дизелі Д-243, Д-245 та їх модифікації. Керівництво по експлуатації 243-0000100PE. – Мн. : ВАТ «Мінський моторний завод», 2009. – 50 с.

КУЦЬ Надія Григорівна – кандидат технічних наук, доцент кафедри автомобілів та транспортних технологій Луцького національного технічного університету.

Наукові інтереси:

– двигуни та енергосистеми на транспорті.

Тел.: 066–082–12–28.

E-mail: kuts\_n@mail.ru.

Стаття надійшла до редакції 13.08.2014

Куць Н.Г. Вплив теплопровідності на ефективність роботи дизеля  
Куць Н.Г. Влияние теплопроводности на эффективность работы дизеля  
Kuts N.G. Influence heat conduction on the performance of diesel

УДК 621.436

**Влияние теплопроводности на эффективность работы дизеля / Н.Г. Куць**

На атомно-молекулярном уровне определена структура сложных молекул, обеспечивающих процесс теплопередачи. Установлена структура твердого тела и адгезионного слоя на наноуровне при движении жидкости или газа как теплоносителя. Разработан механизм передачи тепловой энергии от твердого тела к водяному или газовому теплоносителю и наоборот. Выяснены условия оптимального использования водяного и газообразного теплоносителя для обеспечения эффективного теплообмена.

**Ключевые слова:** стационарная и нестационарная теплопроводности, теплообмен, наноуровни, атомно-молекулярный уровень.

УДК 621.436

**Influence heat conduction on the performance of diesel / N.G. Kuts**

At the atomic and molecular level, the structure of complex molecules that provide process heat. The structure of a rigid body and an adhesive layer on the nanoscale in the motion of a liquid or gas as a coolant. The mechanism of transfer of heat from solid to liquid or gas coolant and vice versa. The conditions for optimum use of water and a gaseous coolant to ensure efficient heat transfer.

**Keywords:** stationary and nonstationary heat conduction, heat transfer, the nanoscale, atomic and molecular level.