

УДК 621.436

Л.И.Гречихин¹, Н.Г.Куць²¹ Минский государственный высший авиационный колледж² Луцкий национальный технический университет**ВОДЯНОЕ ОХЛАЖДЕНИЕ ДВИГАТЕЛЯ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ**

На атомно-молекулярном уровне определена структура сложных молекул, которые обеспечивают процесс теплопередачи. Установлена структура твердого тела и адгезионного слоя жидкости на наноуровне. Разработан механизм передачи тепловой энергии от твердого тела к теплоносителю. Выявлены условия оптимального использования водяного теплоносителя для обеспечения эффективного теплообмена.

Ключевые слова: адгезионный слой, нанокластерная структура, адгезия, десорбция, диполь-дипольное взаимодействие, структура алюминия., тепловой двигатель.

Введение. При работе теплового двигателя с внешним или с внутренним сгоранием горючие газы, образующиеся в рабочих цилиндрах или в камерах сгорания реактивных двигателей, расходуют часть своей тепловой энергии на разогрев корпуса двигателя. Чрезмерный разогрев корпуса может существенно повлиять на нормальную работу двигателя в целом. Поэтому возникает необходимость через стенки корпуса двигателя часть тепла сбрасывать в окружающую атмосферу. При этом используется водяное, масляное или воздушное охлаждение. Водяное и масляное охлаждение осуществляется радиатором, который в свою очередь охлаждается принудительным воздушным потоком. В процессе разогрева и охлаждения корпуса теплового двигателя возникают сложные процессы теплообмена. Теплообменный процесс реализуется при теплопроводности, конвекции и вследствие воздействия теплового излучения.

Теплопроводность осуществляется внутри твердого тела, жидкости или газа, когда на границах раздела возникает разность температур. В этом случае удельный тепловой поток определяется законом Фурье

$$\dot{Q} = -\lambda \cdot \text{grad}T \text{ (Дж/м}^2\text{с).} \quad (1)$$

Здесь λ – коэффициент теплопроводности.

Конвективный теплообмен обусловлен путем перемещения или перемешивания частицами жидкости или газа при возникновении разности температур между твердым телом и жидкостью или газом. Движущаяся жидкость или газ являются теплоносителем. Количество тепла, переданного или принятого поверхностью твердого тела при конвективной теплоотдаче определяется формулой Ньютона

$$\dot{Q}' = \alpha(T - T_0)S, \text{ (Дж/с)} \quad (2)$$

где T и T_0 – соответственно температура твердого тела и движущейся жидкости или газа, S – охлаждаемая или нагреваемая поверхность твердого тела и α – коэффициент теплоотдачи.

Лучистый теплообмен определяется эффективностью излучения нагретой до температуры T жидкости или газа. Плотность излучения на единичный частотный интервал определяется формулой Планка, которая имеет вид

$$u_\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp(h\nu/k_b T) - 1}, \text{ (Дж/м}^3\text{Гц).} \quad (3)$$

Здесь h – постоянная Планка, ν – частота излучения, c – скорость света, k_b – постоянная Больцмана

На основании (3) интегральный поток излучения на поверхность твердого тела составит

$$\dot{Q}'' = \int_0^\infty \varepsilon_\nu A_\nu u_\nu c d\nu, \text{ (Дж/с)} \quad (4)$$

Здесь ε_ν – коэффициент черноты, A_ν – коэффициент поглощения.

Постановка проблемы. Реально количество переданной теплоты от более нагретого тела к более холодному осуществляется многими процессами теплопередачи. Учесть все виды теплопередачи в том или ином процессе достаточно сложно. Это обусловлено тем, что коэффициент теплопроводности λ , коэффициент теплоотдачи α , коэффициент черноты ε_ν ,

коэффициент поглощения A_v зависят от многих параметров, которые не возможно однозначно контролировать. Кроме этого сам процесс теплопередачи изменяется со временем, т.е. является нестационарным. Как правило, все перечисленные коэффициенты экспериментально определяются в каждом конкретном случае, что не позволяет осуществлять компьютерное моделирование.

Формулы Фурье и Ньютона позволяют чисто качественно получать общую картину теплопереноса, возникающего в ДВС. При этом не учитывались явления, возникающие на границе перехода двух агрегатных состояний. Не ясно, что собой представляет эта граница перехода и какое влияние оказывают явления адгезии и десорбции на процессы теплообмена между твердым телом и жидкостью.

Цель и задачи В этой связи возникает *цель*: создать модели различных процессов теплопередачи с учетом последних достижений в той области на наноуровне.

Поставленная цель может быть достигнута путем решения следующих задач:

- на атомно-молекулярном уровне определить структуру сложных молекул, которые обеспечивают процесс теплопередачи;
- определить нанокластерную структуру твердого тела и адгезионного слоя частиц жидкости;
- разработать механизм передачи тепловой энергии от твердого тела к теплоносителю;
- выяснить условия оптимального использования того или иного теплоносителя для обеспечения эффективного теплообмена.

Основная часть. Ниже рассмотрим сформулированные задачи применительно к водяному охлаждению корпуса двигателя.

1. Образование сложных молекул воды, как теплоносителя

Процесс образования молекул воды происходит в два этапа. Вначале образуются двухатомные молекулы OH , а затем образуются молекулы воды путем взаимодействия молекулы OH с атомом водорода. Исходные параметры кислорода и водорода приведены в табл. 1.

Таблица 1

Исходные данные для атомов и молекул, на основании которых производился расчет

Ато- мы	Потенциал первой, второй и третьей кратности ионизации, эВ			Среднее удаление электрона от ядра первой, второй и третьей кратности ионизации, Å			Эффективный заряд ядра первой, второй и третьей кратности ионизации			Дипольный электрический момент для атома и иона, D(Дебая)
	Θ_1	Θ_2	Θ_3	$r_{p,1}$	$r_{p,2}$	r_s	Z^*_1	Z^*_2	Z^*_3	
O	13,6	35,1	55	0,65	0,57	0,53	0,62	1,39	2,10	1,60/0,96
H	13,6	-	-	0,53	-	-	0,50	-	-	0
Al	5,99	18,8	28,4	1,81	1,28	1,18	0,75	1,68	2,33	1,078/0,201
Fe	7,87	16,2	30,6	1,72	1,57	1,29	0,94	1,76	2,74	3,894/2,099
Al_2	6,00	22,0	-	1,69	1,06	-	0,703	1,703	-	0
Fe_2	5,79	23,1	-	1,54	1,01	-	0,618	1,618	-	0
Al_3	5,99	22,1	48,4	2,86	1,43	0,95	1,188	2,188	3,188	0,55
Fe_3	5,89	21,7	47,5	2,63	1,38	0,93	1,074	2,074	3,074	5,73
H_2O	12,6	43,1	91,5	1,23	0,69	0,48	1,072	2,072	3,072	1,85
Al_2O_3	7,75	33,1	57,5	3,30	1,21	0,95	1,774	2,774	3,774	2,56
Fe_2O_3	9,69	32,7	69,4	1,87	0,99	0,68	1,259	2,259	3,259	6,12

Квантово-механический расчет энергии диссоциации для молекулы OH выполнялся по формулам [1]:

Ковалентная связь

$$E_{\text{ков.}} = \sum_i \sum_j \left(\frac{H_{i,1} + H_{i,2}}{1 + S} \right)_{i,j}, \quad (5)$$

где перекрестное суммирование осуществлялось по первой, второй и третьей степени ионизации взаимодействующих частиц, $H_{i,1}$, $H_{i,2}$ и S – соответственно интегралы кулоновский, обменный и перекрытия квантово-механической теории возмущения. При этом волновые функции аппроксимировались S -состоянием с эффективными зарядом и главным квантовым числом.

Ионная связь определялась по формуле

$$E_{\text{ион.}} = -\Theta S \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_e}. \quad (6)$$

Здесь $\Theta = P_1 + P_2$, а P_1 и P_2 – вероятность пребывания валентного электрона вблизи первой и второй взаимодействующих частиц, r_e – межъядерное расстояние. Электрон-дипольная и диполь-дипольная связи определялись по методике, разработанной в [1], но с учетом того, что электрический диполь атома кислорода использовался не нейтрального атома, а ионного остова, и при этом рассматривалась не только одна пара (p -s), (d -s) или (f -s) взаимодействий, а вся их совокупность, как это предложено в [3]. Расчетное значение дипольного электрического момента для атома и иона кислорода приведено в табл. 1.

Таблица 2

Энергия диссоциации и ионизации двухатомных и трехатомных молекул

Параметры	Молекулы						
	ОН	Al ₂	Fe ₂	Al ₃	Fe ₃	AlO	FeO
r_e , Å	0,97	2,47	2,38	2,14	2,06	1,62	1,68
$E_{\text{ков.}}$, эВ	0,95	-1,958	-1,249	-2,143	-2,330	-4,581	-5,102
$E_{\text{ион.}}$, эВ	-5,63	-0,118	-0,051	-0,181	-0,173	-1,315	-1,016
E_{e-d} , эВ	0,19	-	-	-	-	0,350	1,384
E_{d-d} , эВ	-	0,003	0,213	-0,006	-0,706	0,057	0,533
$E_{\text{рез.}}/E_{\text{экс.}}$	4,49/4,40	2,076/2,00	1,30/1,30	-2,330	-3,209	5,12/5,14	4,2/4,2
$\theta_{i,\text{рез.}}/\theta_{i,\text{экс.}}$	3,60/3,18	6,00	5,79	5,99	5,89	8,2/9,5	9,0/8,7
$p_{\text{э.}}, \text{Кл}\cdot\text{м}\cdot 10^{-30}$	6,19/6,17	0	0	1,833	19,11	2,531	3,794
$r_{\text{эфф.}}$, Å	0,858	1,69	1,54	2,86	2,63	1,932	1,873

Диполь-дипольное взаимодействие для молекулы ОН отсутствует, а электрон-дипольное взаимодействие

$$E_{e-d} = [P_1 P_2 (1 - S)^2 + P_1 P_2 S (1 - S)] \frac{p_{\text{э.}}}{4\pi\epsilon_0 r_e^2}. \quad (7)$$

Результаты вычислений различных типов взаимодействий для молекулы ОН приведены в табл. 2. Получается, что энергия диссоциации молекулы ОН определяется преимущественно ионной связью. Поэтому вблизи атома кислорода в основном пребывают оба валентных электрона, а атом водорода пребывает в виде положительного иона. Такое расположение валентных электронов в молекуле ОН приводит к возникновению наведенного электрического диполя $p'_{\text{э.}} = P_1 S e r_e = 2,988 \cdot 10^{-30}$ Кл·м, а совместно со встроенным электрическим моментом для иона атома кислорода получаем: $p_{\text{э.рез.}} = 6,19 \cdot 10^{-30}$ Кл·м.

Энергию ионизации можно оценить по энергии связи валентного электрона каждого из атомов по формуле

$$\begin{aligned} \theta_{i,1} &= (1 - P_1 S) \theta_{i,1} + P_1 S \theta_{i,2}; \\ \theta_{i,2} &= (1 - P_2 S) \theta_{i,2} + P_2 S \theta_{i,1}, \end{aligned} \quad (8)$$

где вероятности перехода от одного атома к другому P_1 и P_2 определяются по времени пребывания валентного электрона у каждого из атомов. Применительно к молекуле ОН, для которой $r_e = 0,97$ Å [2], $P_1 = 0,246$ и $P_2 = 0,254$ и тогда в соответствии с (8) имеем: $\theta_{i,1} = 13,59$ и $\theta_{i,2} = 13,61$ эВ. Валентные электроны водорода и кислорода обобщаются и являются общими для молекулы ОН. Энергия ионизации молекулы ОН 13,18 эВ [2]. Минимальное значение для одного из электронов в

соответствии с (8) составляет 13,60 эВ. Совпадение теоретического значения с экспериментальными данными вполне удовлетворительное.

Вторую кратность ионизации молекулы ОН можно определить по второй формуле (8), но вместо $\theta_{i,l}$ использовать потенциал ионизации кислорода не первой кратности, а второй кратности. Тогда потенциал ионизации второй кратности для молекулы ОН равен $\sim 31,1$ эВ.

При образовании молекулы H_2O атомы водорода пребывают в виде положительных ионов. Вследствие их расталкивания расстояние между центрами атома водорода и молекулы ОН должно возрасти по сравнению с $r_e = 0,97$ Å. Насколько этот рост увеличивается трудно оценить. Поэтому расстояние между центрами атома водорода и молекулой ОН будем полагать вариационным параметром с получением энергии диссоциации равной экспериментальному значению. Тогда $R_{\text{OH-H}} = 1,0092$ Å, а эффективный радиус молекулы H_2O составляет 1,226 Å. Результирующий дипольный электрический момент будет $6,19 \cdot 10^{-30}$ Кл·м. Экспериментальное значение – $6,17 \cdot 10^{-30}$ Кл·м [2]. Получается, что разработанная модель расчета энергетических характеристик сложных молекулярных структур достаточно оправдана и может быть использована для расчета других сложных молекул.

Молекулы воды обладают большим значением дипольного электрического момента. Поэтому такие молекулы, формируя кластерные структуры, будут образовывать простые кубические кристаллы. Энергия связи молекул H_2O внутри кластера определяется преимущественно диполь-дипольным взаимодействием, а именно [4]

$$E_{\text{дип}} = \frac{8p^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \left(-1 + \frac{0,5776}{2^{3/2}} - \frac{0,669}{3^{3/2}} \right). \quad (9)$$

Из значения плотности воды эффективный радиус молекул воды составит 1,505 Å. Величина энергии связи молекул воды в кластерных образованиях в нормальных условиях [5]:

$$E_{\text{св.,рез}} = E_{\text{дип}} - 3k_b T = 0,455 \text{ эВ}. \quad (10)$$

Экспериментальное значение 0,46 эВ. Полученные значения энергий связи молекул воды совпадают с данными работы [5], которые были получены с применением достаточно грубого приближения ковалентной и ионной связей. Реально в данном случае реализуется диполь-дипольное взаимодействие, что и подтверждается выполненным расчетом.

Вода обладает свойством смачивания различных твердых тел вследствие энергии адгезии выше, чем энергия связи внутри кластера воды. На примере смачивания водой алюминия и железа происходит взаимодействие молекул воды на поверхности с кластерам твердого тела.

2. Образование кластерных структур в алюминии и железе

В металлах по мере снижения температуры и вследствие взаимодействия атомов друг с другом образуются устойчивые двухатомные молекулы, а затем взаимодействие атомов с двухатомными молекулами приводит к образованию трехатомных молекул. Образующиеся молекулы взаимодействуют между собой, друг с другом и с отдельными атомами. При этом образование трехатомных молекул не может происходить вследствие тройных столкновений атомов друг с другом, а наиболее вероятно их образование происходит при бинарном взаимодействии атомов с двухатомными молекулами.

Энергия диссоциации для двухатомных молекул Al_2 и Fe_2 экспериментально измерены и составляют соответственно 2,0 эВ и 1,3 эВ. Для молекулы Al_2 также измерено межъядерное расстояние, которое составляет 2,47 Å [2]. По этим данным произведен расчет энергии диссоциации. Результат приведен в табл. 2. Совпадение теоретического расчета с экспериментальными данными достаточно полное. Для молекулы Fe_2 известна только энергия диссоциации. В этом случае межъядерное расстояние рассматривалось как вариационный параметр. Совпадение теоретического расчета с экспериментальным значением произошло на межъядерном расстоянии 2,38 Å. При этом энергия ионизации молекулы Fe_2 равна 5,79 эВ. Эффективный радиус молекул Al_2 и Fe_2 соответственно равен 1,69 и 1,54 Å. При взаимодействии атома алюминия с двухатомной молекулой алюминия наиболее вероятно обе частицы располагаются так, как это показано на рис.1. Из рис. 1 получается, что ковалентный радиус трехатомной молекулы примерно равен

$$R_m = \frac{1}{\sqrt{3}} r_e + r_a. \quad (11)$$

Для алюминия это будет 2,86 Å, а для железа – 2,63 Å, а расстояние между центрами атома и двухатомной молекулой для алюминия равно 2,14 Å, а для железа – 2,06 Å. На основании данных табл. 1 и полученных расстояний между центрами взаимодействующих частиц произведен расчет энергий разрыва связи между атомом и двухатомной молекулой. Результаты приведены в табл. 2.

Теоретический расчет энергий ионизации, ковалентных радиусов и эффективных зарядов молекул Al_3 и Fe_3 содержится в табл. 1. Энергия разрыва связи атома с двухатомной молекулой для алюминия незначительно отличается от энергии диссоциации двухатомной молекулы. Поэтому, образование двухатомных молекул и трехатомных молекул для алюминия происходит одновременно.

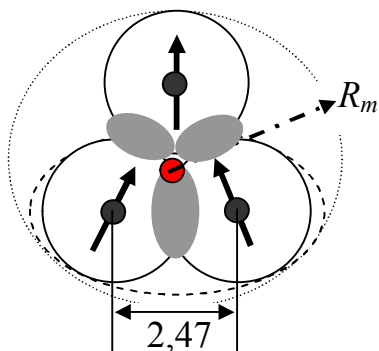


Рис. 1. Расположение атомов в трехатомной молекуле алюминия

Что касается образования трехатомных молекул для железа, то они не могут образовываться, пока не возникнут двухатомные молекулы. Как только образовались двухатомные молекулы, то они начнут взаимодействовать друг с другом и группироваться относительно отдельного атома. В этом случае кластер будет обладать объемцентрированной кубической структурой. Чтобы понять сложный механизм формирования и взаимодействия различных частиц в расплаве, важно выяснить, как взаимодействуют атомы, двухатомные молекулы и трехатомные молекулы между собой и друг с другом.

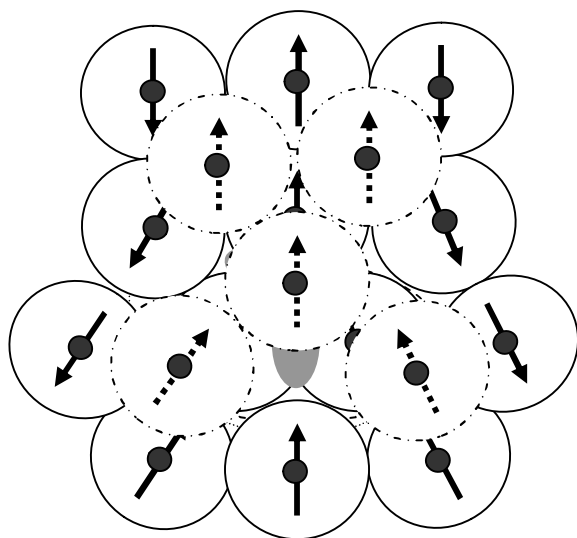


Рис. 2. Кластерная структура при взаимодействии трехатомной молекулы с отдельными атомами

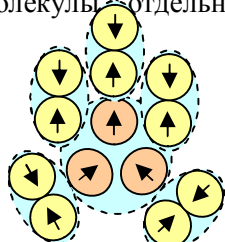


Рис. 3. Схематичное изображение формирования кластерной структуры при взаимодействии двухатомных молекул с трехатомной молекулой

Взаимодействие атома с трехатомной молекулой.

На рис. 2 показано примерное расположение отдельных атомов относительно трехатомной молекулы. Применительно к углероду такая структура соответствует фуллерену, а применительно к металлу формируется металлофуллерен. В такой структуре вокруг трехатомной молекулы в ближайшем окружении находится 20 атомов. Для железа среднее значение бинарной связи атомов с трехатомной молекулой составляет ~ 0,525 эВ. При этом ковалентная связь составляет от общей энергии связи только 23-25%. Ионная связь практически равна нулю. Получается, что бинарная связь атомов с трехатомной молекулой в железе преимущественно определяется диполь-дипольным взаимодействием.

Аналогичная структура металлофуллерена реализуется и для алюминия. Результирующая энергия бинарной связи равна 0,0547 эВ. Ионная

связь отсутствует, а диполь-дипольная связь составляет от общей энергии связи не более 7%.

Взаимодействие двухатомной молекулы с трехатомной молекулой. Взаимодействие трехатомной молекулы с двухатомными молекулами образует разветвленную структуру, изображенную на рис. 3. Средняя энергия бинарного взаимодействия для алюминия определяется в основном ковалентной связью и составляет в среднем ~ 0,028 эВ. Если учесть, что в твердом теле в

соответствии с законом Дюлонга и Пти число степеней свободы составляет 6, то такая связь в алюминии может образоваться при температуре ниже 54 К, т.е. практически вблизи абсолютного нуля.

Для железа средняя энергия бинарной связи составляет $\sim 0,189$ эВ, и определяется в основном диполь-дипольным взаимодействием. Такая связь в железе может устойчиво реализоваться вплоть до температуры 2200 К, т.е. может иметь место даже при температуре плавления железа (1812 К).

Взаимодействие трехатомных молекул друг с другом.

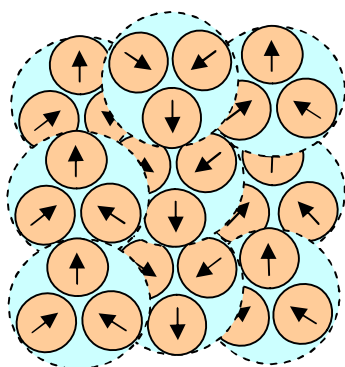


Рис. 4. Расположение трехатомных молекул в слое в процессе их взаимодействия

Общий вид такого типа взаимодействия показан на рис. 4. В случае алюминия средняя энергия бинарного взаимодействия составляет 0,091 эВ, что соответствует температуре 1056 К. Взаимодействие трехатомных молекул друг с другом формирует гранецентрированную кристаллическую структуру. Если такие структуры существенно деформировать, то можно получить алмазоподобный кристалл. При температуре плавления алюминия 934 К гранецентрированные кластеры распадаются.

Для железа бинарная связь трехатомных молекул составляет $\sim 0,600$ эВ.

Взаимодействие двухатомных молекул друг с другом.

Взаимодействие двухатомных молекул между собой обуславливает чешуйчатую и нитевидную структуру. Реализация таких структур показана на рис. 5. Для чешуйчатого строения энергия бинарного взаимодействия в плоскости чертежа равна 0,187 эВ, а в случае нитевидного строения – 0,189 эВ. В результате для алюминия самая большая энергия связи реализуется при бинарном взаимодействии отдельных атомов.

В случае железа бинарная связь между двухатомными молекулами при чешуйчатом строении составляет 0,317 эВ, а при нитевидном строении – 0,484 эВ.

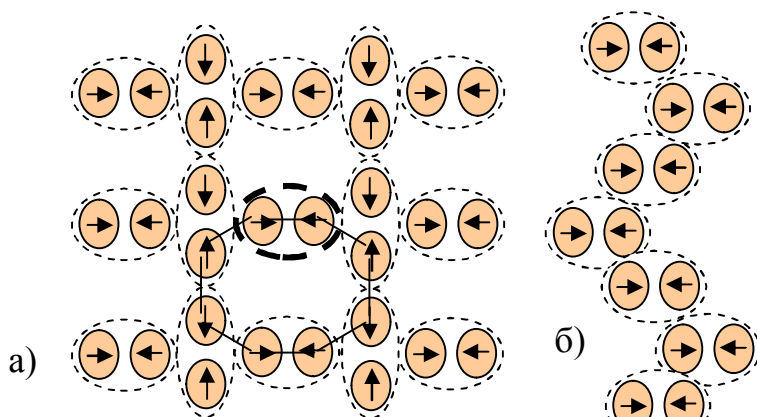


Рис. 5. Строение вещества при взаимодействии двухатомных молекул: а) – чешуйчатая структура; б) – нитевидная структура

Полученные энергии связи бинарного взаимодействия частиц в молекулярных структурах и их взаимного расположения в процессе образования кластерных структур свидетельствует о том, что кластерные структуры алюминия формируются только вследствие бинарного взаимодействия отдельных атомов друг с другом и такая кластерная структура рассмотрена в [1]. При температурах вблизи абсолютного нуля в третьем координационном слое могут формироваться сложные

структурные образования, приводящие к возрастанию энергии связи между частицами в кристалле, что неизбежно должно сказываться на существенном изменении физико-механических свойств алюминия при низких температурах. Это экспериментально и было обнаружено [1].

Для железа ситуация более сложная. Кластерные образования формируются не только путем бинарного взаимодействия между отдельными атомами, но и путем образования структур вокруг трехатомных молекул. В результате получают сложные аллотропические изменения железа в зависимости от роста или уменьшения температуры кристалла.

3. Коллективное взаимодействие атома с двухатомными молекулами.

При достаточно большой концентрации двухатомных молекул в расплаве последние концентрируются вокруг изолированного атома, как это показано на рис. 6. В горизонтальной

плоскости такого вида взаимодействия формируют знакопеременную поверхность, которая приведена на рис 7

Для независимых частиц расстояние между взаимодействующими центрами составляет для алюминия 3,12 Å, а для железа – 2,80 Å. Энергия бинарной связи изолированных частиц в первом случае – 0,531, а во втором случае – 1,391 эВ.

Из анализа различных энергий бинарной связи следует, что кластеры алюминия формируются в основном трехатомными молекулами, образуя гранецентрированную структуру, а железо – коллективным взаимодействием двухатомных молекул с изолированным атомом,

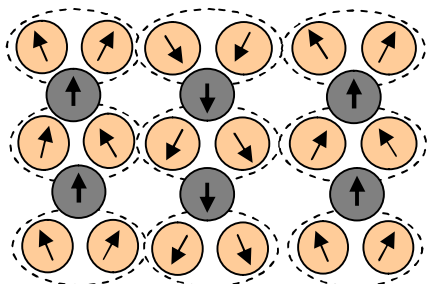


Рис. 6. Взаимодействие двухатомных молекул с изолированным атомом

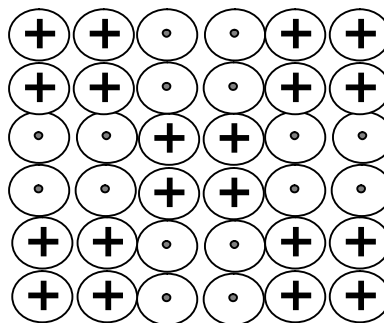


Рис. 7. Знакопеременная поверхность объемноцентрированной структуры

формируя объемноцентрированную структуру. С ростом температуры изолированный атом железа захватывается двухатомной молекулой и образуется трехатомная молекула. При этом происходит фазовый переход второго рода, т.е. объемноцентрированная структура переходит в гранецентрированную. Такой переход в железе происходит при температуре 1041 К с преодолением энергии связи 0,090 эВ. Получается, что образовавшиеся трехатомные молекулы в железе находятся под влиянием других частиц, которые существенно ослабляют энергию разрыва связи атома с двухатомной молекулой.

4. Физическая адгезия воды на кластерах алюминия и железа

Теплообменные процессы при использовании воды в качестве теплоносителя на практике не используются выше температуры кипения воды, т.е. выше температуры 373 К. Поэтому в процессе рассмотрения таких процессов, когда в качестве конструкционного материала применяются сплавы алюминия или железа, возникает необходимость рассмотреть физическую адгезию воды на кластерах алюминия и железа, которые формируются при взаимодействии отдельных атомов в кристаллических структурах этих материалов.

Молекула воды на алюминии располагается вдоль поверхности, а на железе под углом, который определяется расположением электрических диполей атомов железа в объемноцентрированной структуре. На поверхности алюминия и железа молекула воды располагается в междоузельном объеме, как это показано на рис. 8. При этом на поверхности алюминия молекула воды одновременно взаимодействует с двумя кластерами, а на поверхности железа только с одним кластером. Ячейка адгезии в первом и во втором случаях формируется двумя ионами, как показано на рис. 8. Расстояние между центрами взаимодействующих частиц в ячейке адгезии на поверхности алюминия равно 2,656 Å, а на поверхности железа – 2,486 Å. Взаимодействие осуществляется ковалентной и ионной связью с кластером и с ионами ячейки адгезии, а также диполь-дипольным взаимодействием молекул воды с ионами ячейки адгезии с учетом строения кластера на поверхности твердого тела. Конкретный расчет энергий физической адгезии монослоя молекул воды на алюминии и железе приведен в табл. 3. Полученные значения энергий физической адгезии свидетельствуют о достаточно хорошем смачивании водой всех рассмотренных поверхностей. Следовательно, образование адгезионного слоя воды на поверхности твердого тела должно учитываться в процессе разогрева корпуса двигателя. Для этого надо определить, какая толща воды адсорбируется на поверхности. Такая задача применительно к графитовой поверхности была решена в работе [5]. Не вдаваясь в подробности, применим эту теорию к адсорбции воды на поверхностях алюминия, железа, оксида алюминия и оксида железа.

Воспользуемся окончательной формулой, которая была получена в [5], для расчета адсорбированных слоев на поверхности твердого тела, а именно:

$$N = 1 + \frac{\ln(3k_b T / \Delta E) - \ln(1 - W_1)}{\ln(1 - W_2)}. \quad (12)$$

Здесь $\Delta E = |E_0 + E_{\partial-\partial}|$ есть результирующая энергия связи молекул воды между собой в адсорбированном слое (E_0 – энергия ковалентной и ионной связи и $E_{\partial-\partial}$ – энергия диполь-

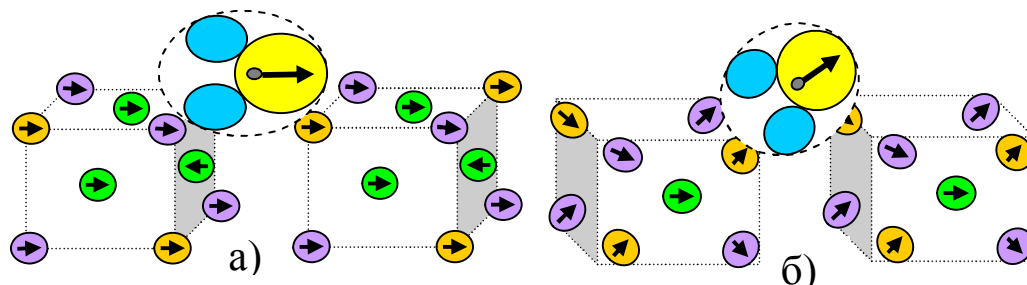


Рис. 8. Расположение молекул воды на поверхности металла: а) – для алюминия и б) – для железа

дипольного взаимодействия между молекулами воды в жидком состоянии). В свою очередь

Таблица 3

Энергия физической адгезии молекул вода на поверхности алюминия и железа при температуре 295 К

Параметры	Поверхность			
	алюминий	железо	Al_2O_3	Fe_2O_3
$E_{кл.}, \text{эВ}$	0,018	0,029	0,084	0,776
$E_{ион.}, \text{эВ}$	2,913	2,470	$5,1 \cdot 10^{-4}$	0,022
$E_{д-д.}, \text{эВ}$	0,037	0,472	0,188	0,311
$E_{рез.}, \text{эВ}$	2,892	2,894	0,273	1,109
N слоев	141	141	156	153

$$W_1 = \int_{E_{сес.}}^{\infty} f(E, T) dE \text{ и } W_2 = \int_{\Delta E}^{\infty} f(E, T) dE - \text{вероятность разрыва связи при заданной температуре } T$$

с основой и между частицами в адгезионном слое, а $f(E, T)$ – функция распределения частиц вещества по энергиям Максвелла-Больцмана. При расстоянии между молекулами воды $2,452 \text{ \AA}$ $\Delta E = 0,596 \text{ эВ}$.

Конкретный расчет количества мономолекулярных слоев воды адсорбированных на твердой поверхности в нормальных условиях приведен в табл. 3. Если связь первого мономолекулярного слоя при разогреве поверхности не разрывается, то количество адсорбированных монослоев не зависит от вещества поверхности твердого тела. Общая толщина слоя воды на поверхности твердого тела, которая связана с поверхностью и является пограничным слоем, составляет всего 38 нм. Потери тепла на разогрев такой толщи воды составляют незначительную величину и поэтому этими потерями можно пренебречь.

Пограничный слой воды на поверхности твердого тела представляет собой квазикристалл и обладает температурой этого же тела, а с остальным слоем воды происходит конвективный теплообмен. Если вода неподвижная толщиной h , то конвективный теплообмен определяется формулой Фурье (1), которая применительно к условиям, показанным на рис. 9, запишется так

$$\dot{Q} = -\lambda \frac{T_1 - T_0}{h}. \quad (13)$$

Коэффициент теплопроводности для воды $\lambda \sim 0,55 \div 0,68$ Вт/(м·К) достаточно высокий, но в неподвижной воде градиент температуры достаточно низкий. Поэтому теплопередача в неподвижной воде незначительная.

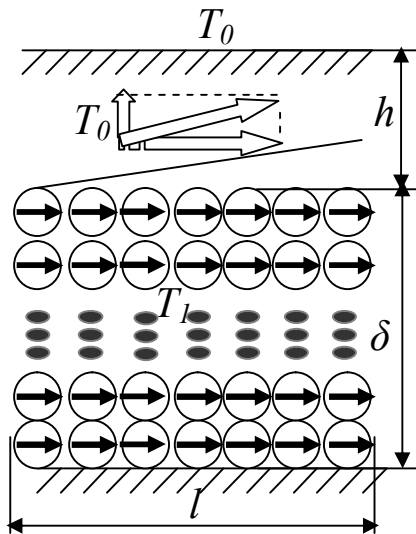


Рис. 9. Принципиальная схема теплообмена при водяном охлаждении твердого тела

Чтобы увеличить теплоотдачу, воду прокачивают вдоль нагретой поверхности твердого тела. Время взаимодействия воды с нагретой поверхностью $\tau = \frac{l}{v_n}$, (14)

где v_n - скорость потока воды вдоль поверхности.

Скорость уноса тепла со смоченной поверхности твердого тела определится величиной молекулярной термоэмиссии и плотностью воды при заданной температуре, а именно

$$v_T = J_T \frac{m_a}{\rho}. \quad (15)$$

Термоэмиссию получаем, применив формулу (5),

$$J_T = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{8}{\pi m_a}} \left(\frac{1}{d_i} \right)^3 \left(\frac{1}{k_b T} \right)^{3/2} \int_{E_{св,i}}^{\infty} \left(1 - \frac{E_{св,i}}{E} \right)^{1/2} E \exp \left(- \frac{E}{k_b T} \right) dE. \quad (16)$$

Здесь m_a - масса молекулы воды; d_i - межмолекулярное расстояние; $E_{св,i}$ - межмолекулярная энергия связи.

Если известна температура разогрева и длина охлаждаемой поверхности твердого тела, то оптимальные условия охлаждения реализуются, когда время взаимодействия воды с нагретой поверхностью будет равно времени достижения установленной границы движущегося потока, т.е.

$$\frac{l}{v_n} = \frac{h}{v_T}. \quad (17)$$

Например, с какой скоростью надо установить водяной поток вдоль нагретой поверхности длиной $l = 1$ м при температуре $T_l = 500$ К и толщиной потока $h = 1$ см с температурой $T_0 = 298$ К? В этом случае скорость распространения теплового потока составит 5,1 мм/с, а скорость потока воды - 5,1 см/с. На основании этих данных мощность теплоотвода в стационарных условиях с 1 м^2 составит

$$N_T \approx \lambda \frac{T_l - T_0}{0,5h} S = 24,8 \text{ кВт}. \quad (18)$$

Выводы. Таким образом, проведенные исследования позволили: 1.Обосновать кластерную структуру твердого тела, адгезионного слоя и жидкости. 2.Разработать теоретические основы механизма теплообмена между твердым телом и жидкостью с учетом образования адгезионного слоя между твердым телом и жидкостью. Выяснить оптимальные условия эффективного охлаждения нагретого твердого тела движущимся потоком жидкости.

1. Гречихин Л. И. Наночастицы и нанотехнологии. - Мн.: ИООО «Право и экономика», 2008. - 403 с.
2. Бабичев А. П. и др. Физические величины: Справочник / Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. - М., Энергоатомиздат, 1991. - 1232 с.
3. Гречихин Л. И., Шмермбек Ю. Наночуровень обоснования ОКГ конденсированных сред. - Мн.: ИООО «Право и экономика», 2010. - 75 с.
4. Гречихин Л. И., Иващенко С. А. Энергия взаимодействия частиц при формировании вакуумно-плазменных покрытий //Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серія фізіка-тэхнічных навук, 2002, № 4, С.11-17.
5. Гречихин Л. И. Двигатели внутреннего сгорания. Физические основы технической диагностики и оптимального управления. - Мн.: Навука і тэхніка, 1995. - 270 с.