

# Wärmetransport in Brennräumen

## Kapitel A

### Einleitung

Der Autor möchte mit diesem Artikel einen weiteren Gesichtspunkt zum Wärmetransport in Gasen liefern. Insbesondere ist es mir ein Anliegen, den Wärmetransport in Brennräumen von Verbrennungskraftmaschinen aus gaskinetischer Sicht zu beleuchten.

Die Mehrzahl der Transportphänomene werden vom Standpunkt des Kontinuums aus beschrieben. Der Nachteil dieser Herangehensweise ist jedoch, dass häufig die zu Grunde liegenden Mechanismen nicht mehr erkannt werden. In diesem Punkt setzt meine Arbeit an.

Im Innern der Brennkammer wird die Wärme über Konvektion und Strahlung transportiert. Zur Wand hin, geht die Konvektion stetig in Wärmeleitung über (siehe Bild 2).

Die wesentlichen Zusammenhänge sollen aus gaskinetischer Sicht erläutern werden.

### Grundsätzliches zu molekularen Transportprozessen in (mäßig) verdünnten Gasen.

Befindet sich Gas in Ruhe, d.h. die makroskopischen Größen: Strömungsgeschwindigkeit, Temperatur und Konzentration sind räumlich und zeitlich konstant so ist das Gas im thermischen Gleichgewicht.

Treten Änderungen in: Strömungsgeschwindigkeit, Temperatur und/oder Konzentration auf, so ist das Gas nicht mehr im thermischen Gleichgewicht. Infolge dieser Änderung transportieren die Moleküle ihren Zustand über eine freie Weglänge  $l_f$  in ein Gebiet, mit dem sie nun kein Gleichgewicht mehr haben (hier ist der makroskopische Zustand – Temperatur, Strömungsgeschwindigkeit und/oder Konzentration – verschieden vom Zustand aus dem die Moleküle kamen). Die Moleküle befinden sich nun zu ihrer neuen Umgebung im Zustand des Ungleichgewichts. Molekulare Kollisionen führen in Folge zu Ausgleichsprozessen die sich makroskopisch als Diffusion (Massetransport), Reibung (Impulstransport) und Wärmeleitung (Energietransport) bemerkbar machen.

Wie oben gezeigt, hängen die Transportprozesse hauptsächlich von der Anzahl der Kollisionen über einer charakteristischen Länge  $L$  (im Fall der Wärmeleitung ist  $L$  die Temperaturgrenzschichtdicke) ab. Dies führt auf die Definition der Knudsen-Zahl  $Kn = \frac{l_f}{L}$ . A1

Es gibt nun zwei Extremfälle: die Kontinuumsströmung mit  $l_f \ll L$  und die freie Molekülströmung mit  $l_f \gg L$ . Beide Extreme sind mit den Methoden der molekularen Gasdynamik lösbar, hingegen ist der Zwischenbereich nur schwer analytisch zu handhaben.

Wenn die mittlere freie Weglänge  $l_f$  klein ist gegen die makroskopische Länge  $L \rightarrow l_f \ll L$ , dann stößt ein Molekül auf seinem Weg durch die Grenzschicht permanent auf andere Moleküle und ändert infolge von Kollisionen permanent seinen Zustand. In diesem Bereich befindet sich das Gas unter Umgebungsbedingungen (1bar, 20°C)  $l_f \approx 6.4 \cdot 10^{-8}m$ . Bei 80bar und ca. 2300K (Brennraum nach Freisetzung der Energie im Bereich des oberen Totpunktes) beträgt  $l_f \approx 6.1 \cdot 10^{-9}m$  (siehe auch hierzu im Anhang die Berechnungen). Der molekulare Transportprozess auf einer Temperaturgrenzschicht ist somit im Kontinuumsbereich kollisionsbestimmt.

Zusammenfassend kann gesagt werden: die molekularen Erhaltungsgrößen als da sind: Masse, Impuls und Energie werden durch Stoßprozesse ausgetauscht. Die Außenwirkung dieser molekularen Stoßprozesse (Diffusion, Schubspannung und Wärmeleitung) sind sich ähnlich (auch im Aufbau der Konstanten ( $\mathfrak{D}, \mu, \lambda$ )  $\rightarrow$  siehe 1/6 Modell); dies verdeutlichen die nahezu konstanten Parameter aus den Ähnlichkeitsgesetzen. Die Prandtl-Zahl und die Schmidt-Zahl, welche die molekularen Transportgrößen: Viskosität, Wärmeleitfähigkeit und Diffusion

$$\text{Prandtl-Zahl } Pr = \frac{\eta c_p}{\lambda} = \frac{\text{Viskosität} * c_p}{\text{Wärmeleitung}} \quad A2$$

$$\text{Schmidt-Zahl } Sc = \frac{\eta}{\rho \mathfrak{D}} = \frac{\text{Viskosität}}{\rho * \text{Diffusion}} \quad A3$$

ins Verhältnis setzten. Erstaunlich ist in dem Zusammenhang, dass in dem hier beachteten Bereich (Kontinuum mit seiner hohen Kollisionsfrequenz), die Transportgrößen nahezu unabhängig von der Gasdichte sind!

Wir halten fest: die kinetische Gastheorie beschreibt den Austausch von u.a. Wärme durch Stoßprozesse zwischen den Gasmolekülen. Es gelten die Sätze von: Erhaltung der Massen, Impulssatz, Energiesatz sowie das 2. Newtonsche Gesetz. In heißen Gasen bewegen sich die Gasmoleküle rascher als in kalten Gasen. Mithin findet der Wärmetransport in heißen Gasen rascher als in kalten Gasen statt.

## Einfachste kinetische Theorie von Gasen

Für ein einzelnes Gasmolekül gilt:

$$\frac{1}{2} m \bar{c}^2 = \frac{3}{2} kT. \quad \text{Hierin ist: } m = \text{Teilchenmasse [kg]} \quad A4$$

$\bar{c}$  = Teilchengeschwindigkeit [m/s]

(mittlere Teilchengeschw. [m/s])

k = Boltzmannkonstante  $1.38062 \times 10^{-23}$  [J/K]

T = absolute Temperatur [K]

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} = \sqrt{3RT} \quad A5$$

Für einen konstanten Wärmestrom bedeutet das, dass sich die Anzahl  $n$  [Zahl der Gasmoleküle / Volumeneinheit] der Gasmoleküle umgekehrt proportional der Temperatur verhält:

$$P = n k T \quad \text{hierin ist: } P = \text{Druck [Pa]} \quad A6$$

$$n = \text{Anzahl der Moleküle (Stoßpartikel) pro Raumgebiet [1/m}^3\text{]}$$

In kalten Gasschichten verlangsamt sich mithin der Wärmestrom (viele Gasmoleküle an der kalten Wand, bewegen sich relativ zu wenigen Molekülen in den heißen Zonen, langsam).

Um den Wärmestrom zu quantifizieren muss die thermische Grenzschichtdicke bekannt sein.

Für eine Abschätzung mag die allgemeine Differentialgleichung für das ruhende Temperaturfeld dienen:

$$\rho c_p(T) \frac{dT}{dt} = -\text{div}[\lambda(T) \text{grad}(T)] + \dot{Q}(T, x, t) \quad A7$$

Hierin sind:  $\rho$  = Dichte [kg/m<sup>3</sup>]

$c_p(T)$  = spez. Wärmekapazität bei konst. Druck [J/kg K]

$T$  = Temperatur [K]

$t$  = Zeit [s]

$\text{div}$  = Divergenz = räumlicher Differentialoperator (Nabla-Operator  $\nabla$ )

$\lambda(T)$  = Wärmeleitkoeffizient [W/m K]

$\text{grad}$  = Gradient = räumlicher Differentialoperator (Nabla-Operator  $\nabla$ )

$\dot{Q}$  = Wärmequelle im zu berechneten Gebiet [W]

diese vereinfacht sich zu:

$$\rho c_p(T) \frac{dT}{dt} = -\text{div}[\lambda(T) \text{grad}(T)] \quad A8$$

wenn keine Wärmequellen im betrachteten Gebiet sind. Eine weitere Vereinfachung ergibt sich, wenn das Temperaturfeld stationär ist und von einer räumlichen auf eine eindimensionale Temperaturverteilung das Augenmerk gelegt wird:

$$0 = \frac{\partial \lambda(T)}{\partial T} \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2 + \lambda(T) \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad A9$$

Dem Verfasser ist bekannt, dass dies nur eine grobe Abschätzung ist, da das Temperaturfeld unter anderem sehr stark von den vorherrschenden Geschwindigkeiten bestimmt ist.

Dies zu erfassen sind die Navier-Stokes-Gleichungen geeignet. Die Navier-Stokes-Gleichungen gehen aus den Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie hervor. Oder, wie unten gezeigt wird, aus einer asymptotischen Entwicklung der Boltzmann-Gleichung für kleine Abweichungen vom thermodynamischen Gleichgewicht, nach Chapman und Enskog.

Auch bleibt das Problem, dass die Geschwindigkeitsverteilung im Brennraum nur schwer abzuschätzen ist und auf Erfahrungswerte aus Versuchen zurückgegriffen werden muss. Hier sehe ich das größte Problem meiner Arbeit, diesen mehr oder minder starken spekulativen Anteil, zuverlässig zu erfassen.

## Kapitel B

### Temperaturgrenzschicht

Ein Modell der Temperaturverteilung an der Zylinderwand, mit Schichtdicken die der mittleren freien Weglänge entsprechen, sei hier dargestellt.

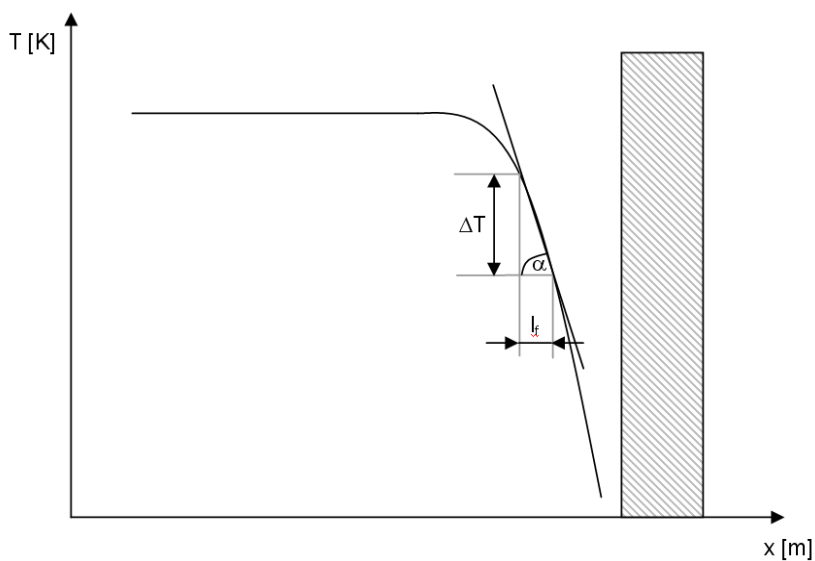


Bild 1: Temperaturverlauf an der Brennraumwand

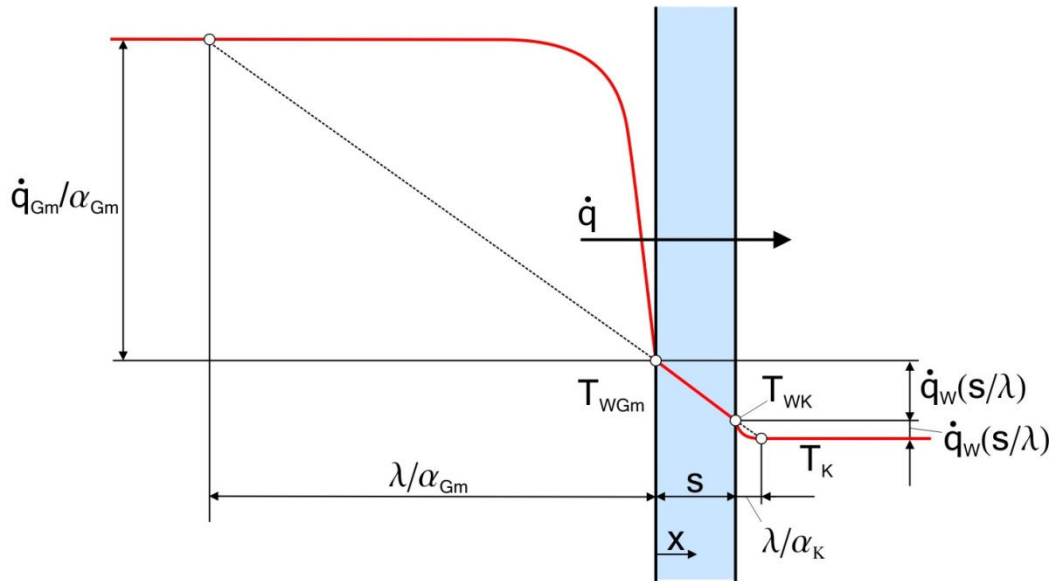


Bild 2: Wärmedurchgang am Brennraum. In dieser Darstellungsform wird der Wärmestrom über die  $\alpha$  - Zahl dargestellt

Es sei darauf hin gewiesen, dass für nicht konstante Stoffwerte ( $\lambda(T)$ ) der Temperaturverlauf entsprechend der Temperaturabhängigkeit von  $\lambda$  mehr oder minder von einer Geraden abweicht (siehe Bild 2 oben). Die allgemeine Lösung für Gleichung A9 ist die nach Fourier benannte Wärmeleitungsgleichung B1:

$$\dot{q} = -\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \quad B1$$

wird der Differentialquotient in den Differenzenquotient überführt →

$$\dot{q} = -\lambda(T) \frac{\Delta T}{\Delta x} \quad B2$$

$\Delta x$  geht über in  $l_f$  (mittlere freie Weglänge = Länge, die die Moleküle zwischen zwei Stößen zurück legen).

Als Gradienten:

$$\tan(\alpha) = \frac{\dot{q}}{-\lambda} = \frac{\Delta T}{l_f} \quad B3$$

Aus überschlägigen Berechnungen erkennt man, dass die Gradienten nahe an der kalten (ca. 180°C) Zylinderwand sehr steil verlaufen (nahe 90°). Je weiter wir uns auf der Grenzschicht Richtung Brennraummitte bewegen, desto flacher verläuft der Temperaturgradient.

Hilfreich für das Verständnis der Wärmeströme, ist eine Analogie zum elektrischen Stromkreis: die Ursache für einen elektrischen Strom ist die Potentialdifferenz U (Volt) dem wird ein Widerstand R (Ohm) entgegengesetzt.

Bei der Wärme ist die Ursache für einen Wärmestrom eine Temperaturdifferenz, dem steht ein Wärmewiderstand  $[K * m^2 / W]$  = Schichtdicke  $l$  / Wärmeleitkoeffizient  $\lambda$  entgegen. Steile Gradienten ergeben einen großen Wärmewiderstand, flache Gradienten einen kleinen Wärmewiderstand.

Nach meinem Dafürhalten, erklärt sich, was bei den Versuchen unter Woschi, zum adiabaten bzw. teiladiabaten Brennraum, in den 1980er Jahren passiert ist und warum die Vorhersagen zur Wirkungsgradverbesserung fehlgeschlagen sind: der teiladiabate Brennraum (Nimonicplatte auf dem Kolben) führte zu Wandtemperaturen von bis zu 800°C hierbei wurde der effektivste Isolator (Wärmewiderstand) den das System besitzt (die kalte Wand, mit fast 90° steilen Gradienten) zum größten Teil zerstört. Zwar bildet auch die Nimonicplatte auf dem Kolben einen Wärmewiderstand, jedoch nicht mit der Effektivität einer kalten Grenzschicht.

Bild 2 zeigt ferner die Schwächen auf, wenn der Wärmestrom über die  $\alpha$  – Zahl dargestellt wird.  $\dot{q} = \alpha * \Delta T \left[ \frac{W}{m^2} \right]$  spezifischer Wärmestrom B4

Oder:  $\dot{Q} = \alpha * A * \Delta T [W]$  B5

Ein komplexer, hochdynamischer Vorgang der Temperatur über dem Weg, welcher alles andere als linear (mit Ausnahme der Zylinderwand) ist, wird über eine Gerade gemittelt. Wo in diesem System gute Isolatoren und wo gute Wärmeleiter sind, entzieht sich dieser Darstellungsweise völlig.

## Kapitel C

### Grenzen der einfachen kinetischen Theorie der Gase

Bei genauerer Analyse der Stoffwerte stellen sich rasch Differenzen zwischen der von der einfachen kinetischen Gastheorie geforderten Wärmeleitfähigkeit und den Messwerten ein.

$$\lambda \sim T^{0.5} \quad \lambda [W/m K] \quad \text{aus:} \quad C1$$

$$\lambda = \frac{1}{3} * l_f * \bar{c} * \rho * c_V \quad C2$$

mit

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi}} \quad C3$$

$$\text{und } l_f = 1/\sqrt{2}\sigma^2 \pi n, \quad c_V = \frac{f}{2} \times R, \quad R = \frac{k}{m}, \quad \rho = n \times m, \quad C4$$

für ein einatomiges Gas mit 3 Freiheitsgraden (die Anzahl der Freiheitsgrade gibt an, wie viele Möglichkeiten ein Molekül hat um Energie zu speichern. Im Fall eines einatomigen Gases ist f=3 )

$$\lambda = \frac{1}{\sigma^2} * \sqrt{\frac{k^3 T}{\pi m}} = \frac{1}{\sigma^2} * k \sqrt{\frac{RT}{\pi}} \quad C5$$

$$\Leftrightarrow \lambda \sim T^{\frac{1}{2}}$$

hierin ist:

$\bar{c}$  = mittlere Teilchengeschwindigkeit [m/s]

$l_f$  = mittlere freie Weglänge [m], ist die Länge, die ein Teilchen sich zwischen zwei Stößen zurücklegt.

$m$  = Teilchenmasse [kg],

$\sigma$  = molekularer Durchmesser[m]

$\rho$  = Dichte [kg/m<sup>3</sup>]

$c_V$  = spez. Wärmekap. b konst. Volumen [J/kg K]

$n$  = Teilchendichte [1/m<sup>3</sup>]

$R$  = Gaskonstante [J/kg K]

Die Messwerte ergeben für  $\lambda$  eine Temperaturabhängigkeit

$$\lambda \sim T^{0.7} \quad \text{bis} \quad \lambda \sim T^{0.8} \quad C6$$

(für einatomige Gase, also Gase mit 3 Freiheitsgraden). Dies zeigt, dass eine einfache kinetische Theorie der Gase die Phänomene auf einer Grenzschicht nicht mit genügender Genauigkeit erklären kann. Für eine allgemeine Abschätzung der Größen, ist die Theorie jedoch empfehlenswert, da sie einfach zu handhaben ist und schnell Ergebnisse liefert. Auch kann die einfache Theorie der Gase grundsätzliche Zusammenhänge gut erklären. Die Gründe für die Ungenauigkeiten liegen in den Annahmen für die einfache kinetische Theorie der Gase begründet. Diese Annahmen sind:

1. Das Volumen der Teilchen ist Null (oder sehr klein gegen den Raum in dem die Teilchen gefangen sind), sodass die Moleküle den gesamten Raum für die Bewegung zur Verfügung haben.
2. Die Teilchen verhalten sich wie unendlich kleine, vollkommen elastische Billardkugeln, d.h. die Teilchen üben sonst keine Kräfte aus. Siehe Bild 5 Modell1: Rigid spheres.
3. Alle Teilchen haben die gleiche Geschwindigkeit  $\bar{c}$ .
4. Alle Transportkoeffizienten ( $\mathcal{D}$ =Diffusionskoeffizient,  $\mu$  = Viskosität,  $\lambda$  = Wärmeleitfähigkeit) sind unabhängig voneinander.
5. Die 1/6 Verteilung der Geschwindigkeit, die besagt, dass sich 1/6 aller Moleküle exakt in eine Koordinatenrichtung bewegen.

Die einfache kinetische Theorie der Gase führt zu den bekannten drei Transportkoeffizienten:

$\mathcal{D}$  = Diffusionskoeffizient [ $\text{m}^2/\text{s}$ ],  $\mu$  = dynamische Viskosität [ $\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}$ ],

$\lambda$  = Wärmeleitungskoeffizient [ $\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$ ]

Das Gesetz für die Diffusion einer Spezies A (Ficksches-Gesetz):

$$j_A = -\mathcal{D} \frac{dx_A}{dy} \left[ \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \frac{1}{\text{m}} = \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \right] \quad \text{oder in einer einfacheren Form: } j = -\mathcal{D} \frac{\partial \rho}{\partial y} \left[ \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right] \quad C7$$

Mit

$$x_A(y) = \frac{\rho_A}{\rho} [1] \quad \text{Molbruch} \quad C8$$

Für die Reibung:

$$\tau = \eta \frac{du}{dy} \left[ \frac{\text{kg}}{\text{s}} \frac{\text{m}}{\text{s}} \frac{1}{\text{m}} = \frac{\text{kg}}{\text{s}^2 \cdot \text{m}} = \frac{\text{N}}{\text{m}^2} \right] \quad C9$$

Mit der Geschwindigkeit  $u$  in  $x$  – Richtung ( $\perp y$ )

Für den Wärmestrom (Fourier-Gesetz):

$$\dot{q} = -\lambda \frac{dT}{dy} \left[ \frac{\text{W}}{\text{m}} \frac{\text{K}}{\text{m}} = \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \right] \quad C10$$

Siehe Bild 3.

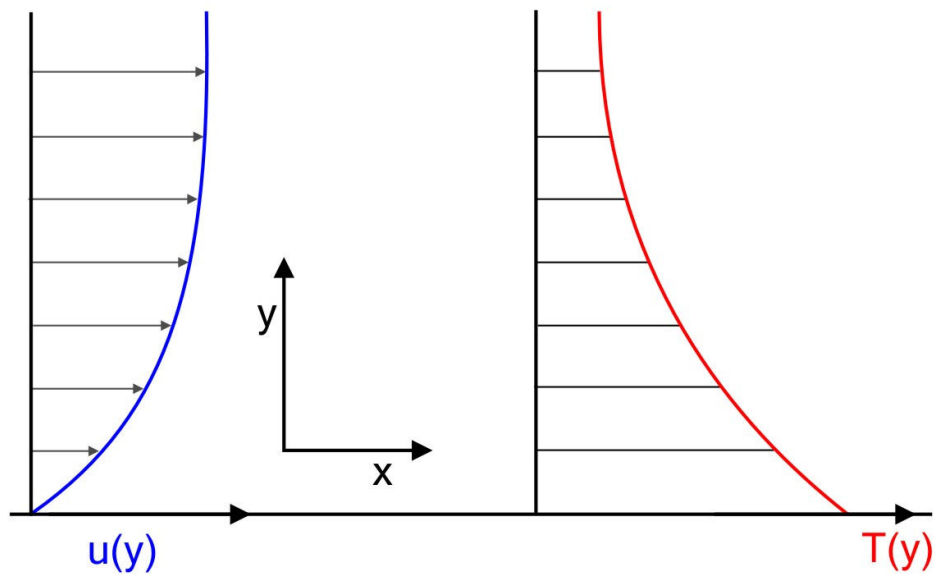


Bild 3: Geschwindigkeits- und Temperaturgrenzschicht

Mit den drei Transportkoeffizienten aus der einfachen kinetischen Gastheorie und dem 1/6 Modell:

$$\mathcal{D} = \frac{1}{3} l_f * \bar{c} \left[ m \frac{m}{s} = \frac{m^2}{s} \right] \quad \text{Diffusionskoeffizient [m}^2\text{/s]} \quad C11$$

$$\eta = \frac{1}{3} l_f * \bar{c} * \rho \left[ m \frac{m \text{ kg}}{s \text{ m}^3} = \frac{\text{kg}}{s \text{ m}} \right] \quad \text{Dynamische Viskosität [kg/m s]} \quad C12$$

$$\lambda = \frac{1}{3} l_f * \bar{c} * \rho * c_V \left[ m \frac{m \text{ kg}}{s \text{ m}^3} \frac{J}{\text{kg K}} = \frac{W}{m K} \right] \quad \text{Wärmeleitungskoeffizient [W/m K]} \quad C13$$

## Kapitel D

### Strenge kinetische Theorie der Gase

Nur eine strenge kinetische Theorie der Gase kann den oben genannten Unterschied klären. Die Differenzen zur einfachen kinetischen Gastheorie sind:

#### zu Annahme 1:

Der Bewegungsraum ist durch das Eigenvolumen der Moleküle sowie die Raumverminderung infolge Ausdehnung, herabgesetzt. Dazu wird das Volumen in dem die Transportphänomene stattfinden wie folgt definiert:

Der Raum in dem sich die Teilchen befinden sei ein Quader mit dem Volumen  $V$ . Der Raum den die Teilchen für die Bewegung zur Verfügung haben sei:

$$V = (V^{\frac{1}{3}} - \sigma)^3 - \left(\frac{N}{2}\right) \times \left(\frac{4}{3} \pi \sigma^3\right) \approx V - \frac{2}{3} \pi N \sigma^3 \quad (\text{siehe auch Bild 4}) \quad D1$$

Hierin ist:  $V$  = Volumen in dem die Prozesse stattfinden [ $m^3$ ]  
 $\sigma = (r_1 + r_2)$  mit  $r_i$  = Radius der einzelnen Stoßpartikel [m]  
 $N$  = Gesamtzahl der Moleküle [1]

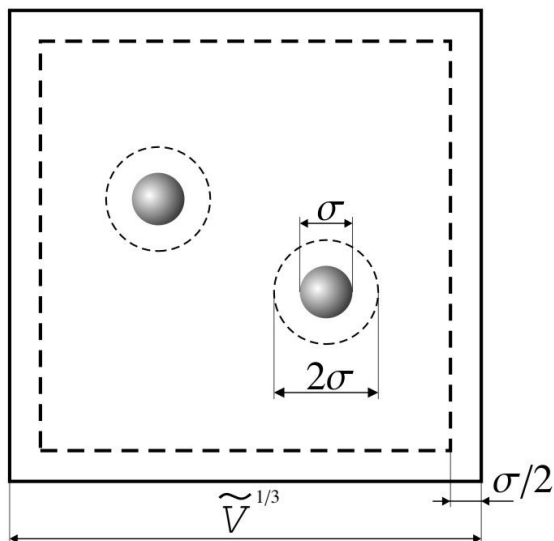


Bild 4: Tatsächlicher Bewegungsraum der Moleküle

Da die Moleküle eine Ausdehnung haben, legen sie zwischen den Stößen nicht den Weg  $l_f$  (mittlere freie Weglänge) zurück, der Weg verkürzt sich um die Summe der Radien (bei gleichen Stoßpartnern  $l_f - (r_1 + r_2) = l_f - \sigma$  wenn es sich um ein reines Gas handelt – dann ist  $r_1 = r_2$  und damit  $2 * r = \sigma$ ).

Diese beiden Punkte führen bei hohen Drücken zu einer Korrektur in der Boltzmann-Gleichung.

**zu Annahme 2:**

Zur Beschreibung der molekularen Kräfte wird zu meist ein Lennard-Jones-Potential angesetzt:

$$\phi(r) = 4\varepsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad \left[ J \left\{ \frac{m^{12}}{m^{12}} - \frac{m^6}{m^6} \right\} = J \right] \quad D2$$

Siehe Bild 5 Lennard-Jones-Potential.

- Hierin ist:
- $\varepsilon$  = Bindungsenergie [J]
  - $\sigma$  = wirksamer Stoßdurchmesser (siehe oben)
  - $r$  = Variable = Abstand der Stoßpartikel [m]

$$F = -\nabla\Phi(r) \quad \left[ Nm \frac{1}{m} = N \right] \quad D3$$

d.h. die Kraft aus einem Potential ist allgemein: Nabla angewendet auf Potential.

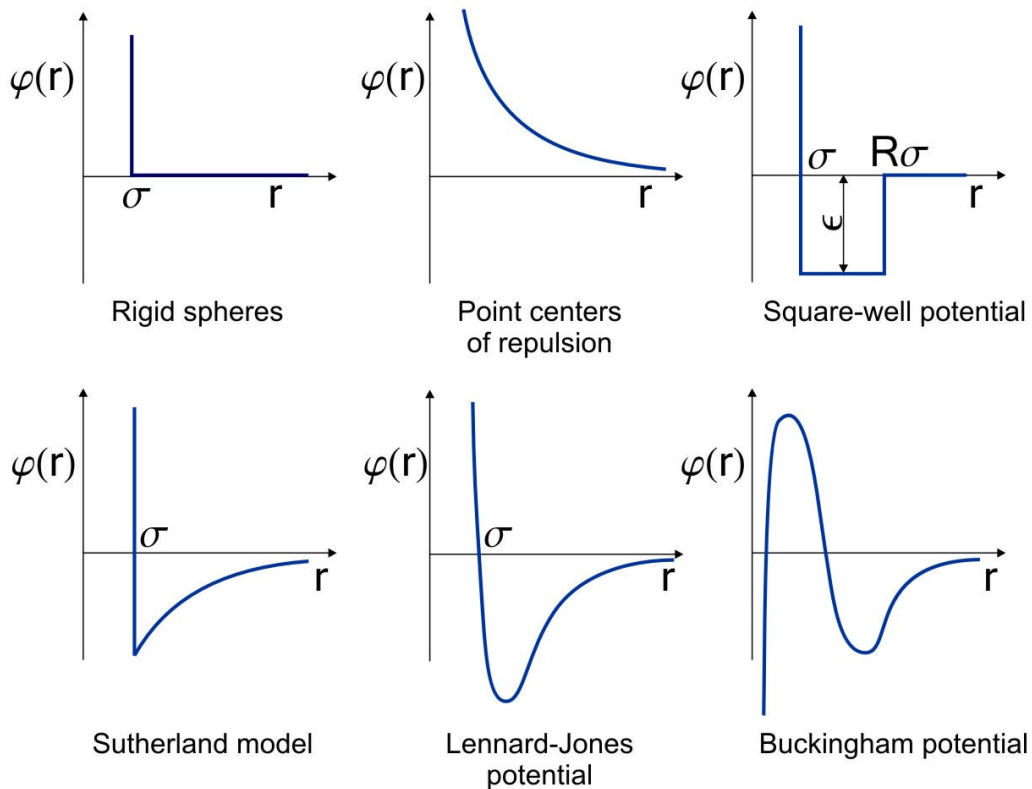


Bild 5: Übersicht der gängigen Potentialmodelle

**zu Annahme 3:**

Eine räumliche Darstellung (D4) der Maxwell Verteilung ist anschaulich nicht zu machen. Man behilft sich, in dem man nur eine Koordinate darstellt (D5).

$$F(c)^2/n = g(c_1) * g(c_2) * g(c_3) \left[ \frac{1}{m} \frac{1}{m} \frac{1}{m} = \frac{s^3}{m^3} \right] \quad D4$$

Die Verteilung bezieht sich auf die Dichte n [1/m³], i=1,2,3 Richtung im Raum, c<sub>i</sub>=Geschw. in Richtung i [m/s]

$$g(c_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi RT}} e^{-\frac{c_i^2}{2RT}} \left[ \frac{1}{m} = \frac{s}{m} \right] \quad D5$$

Siehe Bild 6

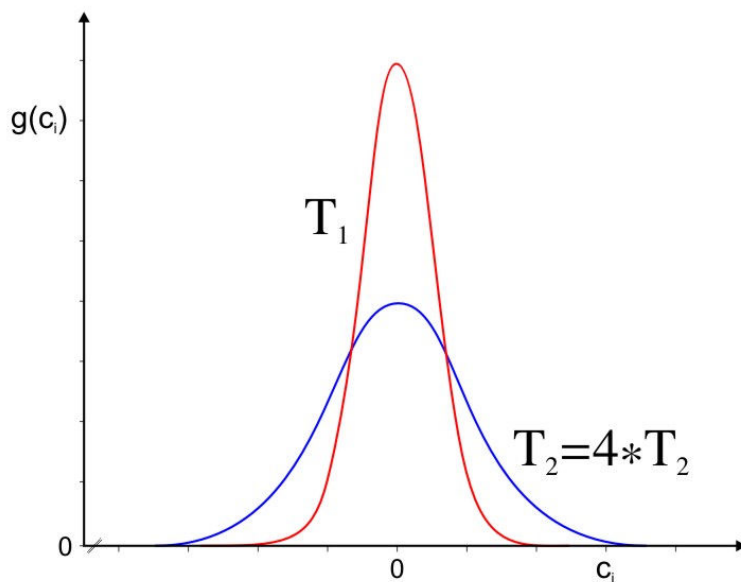


Bild 6: Eindimensionale Maxwell-Verteilung für zwei Temperaturen

Bild 6 zeigt eine eindimensionale Gleichgewichtsverteilung. Die Funktion:  $g(c_i)$  entspricht einer Gaußschen Fehlerverteilungskurve und ist für zwei Werte von T skizziert. Der Flächeninhalt:

$$\int g(c_i) dc_i \quad \text{für } -\infty < c_i < \infty \quad D6$$

bleibt konstant und entspricht bei der Maxwell-Verteilung:

$$F(c)^2 = \frac{n}{(2\pi RT)^{3/2}} e^{-\frac{c^2}{2RT}} \quad D7$$

der Dichte. Die Breite der Kurven entspricht der Temperatur des Gases, hieraus folgt, dass die Kurven mit zunehmender Temperatur immer flacher werden. Man erkennt, dass die

Wahrscheinlichkeit Moleküle bei höherer Geschwindigkeit zu finden, mit wachsender Temperatur ansteigt.

Sinkt die Temperatur, so werden die Kurven schmaler und höher. Bei  $T \rightarrow 0$  geht die Verteilung in eine Dirac-Verteilung über. Wenn  $T \rightarrow 0$  geht, so geht auch die thermische Geschwindigkeit  $c \rightarrow 0$ . In einem Gas mit der Strömungsgeschwindigkeit  $c = \xi - v$  ( $c$  = Partikelgeschwindigkeit siehe Brownsche Bewegung) folgt, die Absolutgeschwindigkeit  $\xi$  ( $\xi$  = Partikelgeschwindigkeit + Strömungsgeschwindigkeit) der Moleküle geht über in die mittlere Strömungsgeschwindigkeit  $v$ . Die Fläche unter den Kurven ist, wie bei Gaußschen Fehlerverteilungskurven üblich, auf 1 normiert.

In Bild 6 sind obige Kurven über  $\xi_i = c_i + v_i$  aufgetragen. Die Kurven verschieben sich nach rechts. Alle Geschwindigkeiten  $v_i$  sind positiv.

Die Maxwell-Verteilung  $F(c^2)$  als Funktion der Geschwindigkeitsbeträge

$$|c| = \sqrt{c_1^2 + c_2^2 + c_3^2} \quad 0 \leq |c| \leq \infty \quad D8$$

wird in Kugelkoordinaten transformiert. Darin sind:  $dn$  die Zahl der Moleküle pro Volumen in der Kugelschale (aus der Gleichung  $dn = 4\pi c^2 F(c^2) d|c|$ ) ausgedrückt durch die Geschwindigkeitsverteilung für die  $X(|c|)$ :

$$dn \equiv X(|c|)d|c| = \int_0^\pi \sin\Phi d\Phi * \int_0^{2\pi} d\varepsilon F(c^2) d|c| = 4\pi c^2 F(c^2) d|c| \quad D9$$

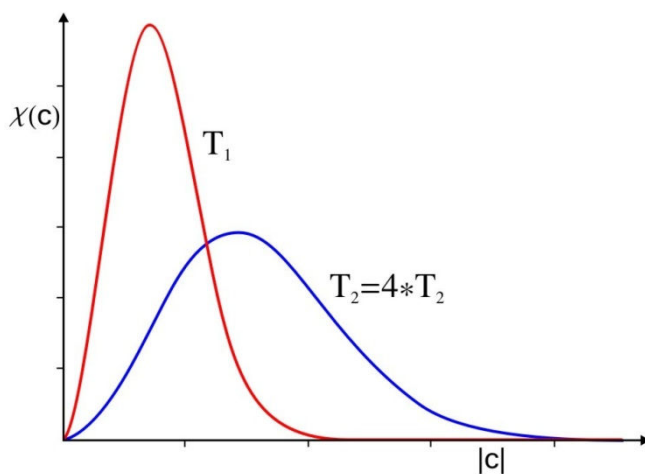


Bild 7: Geschwindigkeitsverteilungsfunktion für zwei Temperaturen

$X(|c|)$  (die Verteilungsfunktion) ist definiert: Anzahl der Moleküle  $dn$  im Geschwindigkeitsbereich  $d|c|$  und  $|c| + d|c|$ .

$$X(|c|) = \frac{dn}{d|c|} = F(c^2) 4\pi c^2 = \frac{4\pi n}{(2\pi RT)^{3/2}} c^2 e^{-\frac{c^2}{2RT}} \quad D10$$

Aus obiger Abbildung ist zu erkennen, dass  $X(|c|)$  mit der Nulltangente im Nullpunkt ansteigt (Ableitung von  $X(|c|)$  an der Stelle  $|c| = 0$ ). Maximum bei einer Geschwindigkeit  $c_m$ . Für große  $|c|$  geht die Funktion asymptotisch gegen Null.

Thermische oder kinetische Energie pro Masse des Moleküls:

$$e(c) = \frac{1}{2} c^2 \quad D11$$

Ersetze die Energie  $e(c)$  an der Stelle  $|c|$  in der Verteilung  $X(|c|)$  und drücke  $X(e(c))$  aus, so folgt:

$$X(e) = \frac{8\pi n}{(2\pi RT)^{3/2}} e(c) e^{-\frac{e(c)}{RT}} \quad D12$$

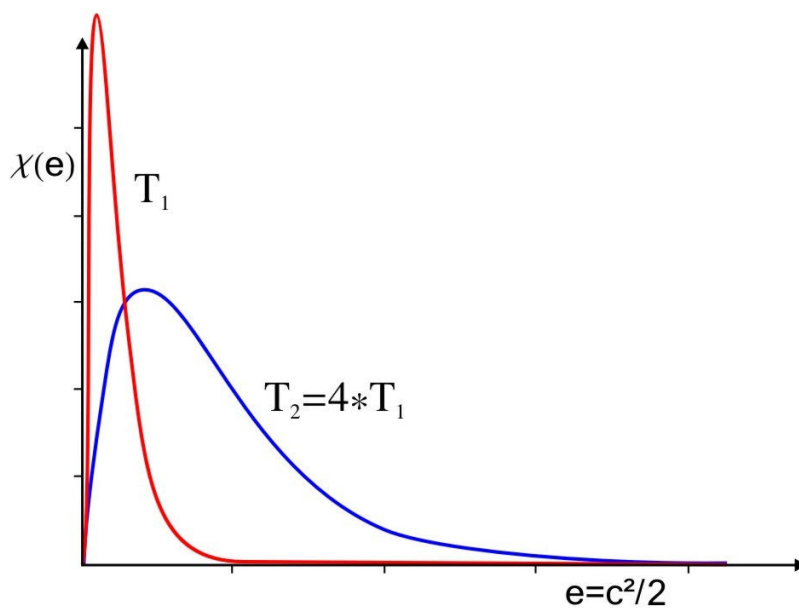


Bild 8: Energiespektrum der Moleküle bei zwei Temperaturen

In Bild 8 ist die Verteilungsfunktion  $X(e(c))$  als Funktion der thermischen bzw. der kinetischen Energie  $e(c) = \frac{1}{2} c^2$  der Moleküle dargestellt. Man nennt diese Funktion auch das Energiespektrum der Moleküle. Es wird eine Aussage über den Energiebereich der Moleküle gemacht. Man erkennt den steilen (linearen) Anstieg  $e(c)$  aus dem Nullpunkt (im Gegensatz zur Nulltangente bei der Geschwindigkeitsverteilung). Für große Energien fällt (exponentiell) die Kurve mit  $e^{-e/RT}$  auf Null. Am Maximum mit:  $\frac{dX}{de(c)} = 0$  gibt es eine Geschwindigkeit  $|c|_m$  oder Energie  $e_m = e(c_m)$ , in der  $n$  pro Energieintervall am größten ist. An dieser Geschwindigkeit ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Moleküle am wahrscheinlichsten. Das ist die „wahrscheinlichste Geschwindigkeit“  $c_m$ . Es gibt aber noch weitere Definitionen von Molekülgeschwindigkeiten welche aus  $X(e(c))$  herrühren.

### Die wahrscheinlichste Geschwindigkeit:

hier wird  $\frac{dX}{de} = 0$  gesetzt. Es folgt die maximale kinetische Energie:  $e(c)_{max} = RT$  mit der gesuchten wahrscheinlichsten Geschwindigkeit  $c_m = \sqrt{2RT}$  D13

Ist die Geschwindigkeit, bei der sich ein Maximum an Molekülen in einem Geschwindigkeitsintervall um  $c_m$  befindet. Bei dieser Geschwindigkeit ist es am wahrscheinlichsten, ein Molekül an zu treffen.

### Der arithmetische Mittelwert $\bar{c}$ :

$$n\bar{c} = \int_0^{\infty} c |X(c)| dc \quad D14$$

Mit

$$X(c) = \frac{dn}{d|c|} = F(c^2) 4\pi c^2 = \frac{4\pi n}{(2\pi RT)^{3/2}} c^2 e^{-\frac{c^2}{2RT}} \quad D15$$

Folgt:

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi}} \quad D16$$

### Der quadratische Mittelwert $c_0$ oder $\sqrt{c^2}$

Ist auch als RMS-Wert (root mean square) bekannt und wird errechnet aus der Wurzel des Mittelwertes der Geschwindigkeitsquadrate.

$$nc_0^2 = n\overline{c^2} = \int_0^{\infty} c^2 X(c) dc \quad D17$$

Folgt:

$$c_0 = \sqrt{\overline{c^2}} = \sqrt{3RT} \quad D18$$

### zu Annahme 4:

Auf die Annahme 4 [Alle Transportkoeffizienten ( $\mathcal{D}$ =Diffusionskoeffizient,  $\mu$  = Viskosität,  $\lambda$  = Wärmeleitfähigkeit) sind unabhängig voneinander] wird im folgendem ausführlich eingegangen.

Eine genaue Analyse der Vorgänge auf der Zylinderwandgrenzschicht ist außerordentlich komplex. Hier treten Diffusionseffekte neben Wärmeleitungseffekten und Sekundäreffekte von beiden Transportgrößen auf.

Eine genaue Analyse von Diffusionseffekten haben Chapman und Enskog für kleine Abweichungen vom thermodynamischen Gleichgewicht mittels der nach ihnen benannten Theorie gegeben (Hirschfelder Curtiss Bird: Molecular Theorie of Gases and Liquids).

Die Ergebnisse besagt: die Diffusionsgeschwindigkeit  $(v_D)_s$  nicht nur von den Gradienten der jeweiligen Spezies abhängt, wie es das Ficksche Gesetz:

$$j_{i,s} = \sum_r D_{rs} \frac{\partial \rho_s}{\partial x_i} \tag{D19}$$

fordert, sondern auch noch von Gradienten des Druckes und Gradienten der Temperatur.

Für die Diffusion gibt Hirschfelder an:

$$j_{i,s} = \rho_s (v_{Di})_s = \frac{\rho_s}{\rho} \left( \frac{n^2}{n_s} \sum_r m_r D_{sr} d_{i,s} - D_s^T \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \right) \tag{D20}$$

mit:

$$d_{i,s} \equiv \frac{\partial n_s}{\partial n} + \left( \frac{n_s}{n} - \frac{\rho_s}{\rho} \right) \frac{\partial \ln p}{\partial x_i} \tag{D21}$$

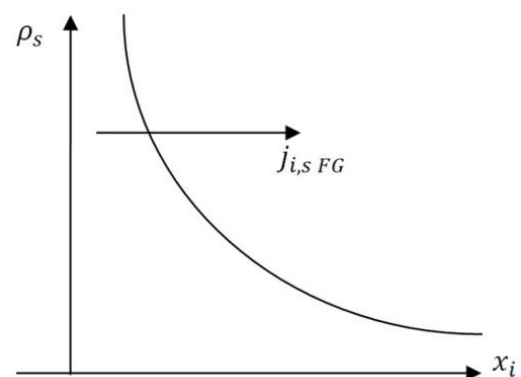
Mit  $d_{i,s}$  [1/m]

Hierin ist:  $D_{sr}$  = Diffusionskonstante des Stoffes s und des Stoffes r [m<sup>2</sup>/s]

$D_s^T$  = Thermodiffusionskonstante des Stoffes s. [kg/m s]

Damit setzt sich der Diffusionsstrom  $j_{i,s}$  [kg/m<sup>2</sup> s] aus drei Anteilen zusammen:

1. Die Konzentrationsdiffusion  $\sim \frac{\partial n_s}{\partial n}$ , auch als Ficksches Gesetz benannt, ergibt den Transport relativ zum Gemisch als Folge eines Gradienten der Partialdichte an. Dabei sucht der Diffusionsstrom den Ausgleich in der Konzentration. Das bedeutet, der Diffusionsstrom fließt entgegen der Gradientenrichtung der Konzentration. Damit ist die Konzentrationsdiffusion eine Bewegung von Molekülen (Massentransport) von einem Nichtgleichgewichtszustand in einen Gleichgewichtszustand. Ferner erhöht sich die Entropie, da der Ordnungszustand vor der Diffusion größer war als nach dem Ausgleichsprozess.
2. Die Druckdiffusion  $\sim \frac{\partial \ln p}{\partial x_i}$  tritt bei starken Druckgradienten auf. Die leichten Stoffe diffundieren zum größeren Druckes hin und die schwereren Stoffe entgegengesetzt, es tritt eine Entmischung ein. Dieser Effekt dürfte insbesondere während der Verdichtung und anschließenden Verbrennung im Brennraum zu einer Inhomogenität (Entmischung) führen.



3. Die Thermodiffusion  $\sim \frac{\partial \ln T}{\partial x_i}$  tritt bei starken Temperaturgradienten auf. Die leichteren Stoffe diffundieren in Richtung anwachsender Temperatur. Die schwereren Stoffe bewegen sich in die entgegengesetzte Richtung. Auch hier tritt wieder eine Entmischung ein. An der Thermodiffusion erkennt man die Größe der Chapman Enskog Theorie, dieser Effekt wurde von der Theorie vorhergesagt und im Anschluss experimentell nachgewiesen (Auch als Soret-Effekt in kondensierten Phasen bezeichnet).
4. Der Diffusionsthermoeffekt oder auch als Dufour-Effekt bekannt: ist die Umkehrung der Thermodiffusion. Aus einem Konzentrationsgefälle durch Diffusion kann es zu einem entgegengesetzten Wärmestrom kommen, das führt dann zu Temperaturdifferenzen während der Diffusion.
5. Auch die Wirkung äußerer Kräfte führt zu einem Diffusionsstrom. Wirkt ein elektrisches Feldes auf Ionen (geladene Teilchen) so kann es zu einer Entmischung kommen.

Neben Diffusionseffekten kommt es in der Grenzschicht hauptsächlich zum Wärmetransport.

Zu beachten ist, dass die Diffusionsgeschwindigkeit neben den Effekten auf den Massentransport eines Stoffes auch Einfluss auf den molekularen Wärmetransport (Wärmestrom  $q_i$ ). Der Wärmestrom ist die Summe aus: molekularen Energietransport (Wärmeleitung beschrieben durch das Fourier-Gesetz), Transport von Wärme durch Diffusion und dem Diffusionsthermoeffekt (Dufour-Effekt). Damit ist der Wärmestrom:

$$\vec{q}_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \frac{5}{2} kT \sum_s n_s (\vec{v}_D)_s - p \sum_s \frac{1}{\rho_s} D_s^T * \vec{d}_{i,s} \quad D22$$

- Es ist:
- $\lambda$  = der Wärmeleitkoeffizient des Gemisches [W/m K]
  - $T$  = Temperatur an der Stelle  $x_i$  [K]
  - $\vec{x}_i$  = eine Raumkoordinate [m]
  - $n_s$  = die Anzahl der Moleküle der Stoffes s pro Volumen [1/m<sup>3</sup>]
  - $(\vec{v}_D)_s$  = die Diffusionsgeschwindigkeit der Stoffes s [m/s]
  - $p$  = Druck [Pa = N/m<sup>2</sup>]
  - $\rho_s$  = Dichte der Stoffes s [kg/m<sup>3</sup>]
  - $D_s^T$  = Thermodiffusionskonstante der Stoffes s [kg/m s]

Mit:

$$\vec{d}_{i,s} \equiv \frac{\partial n_s}{\partial n} + \left( \frac{n_s}{n} - \frac{\rho_s}{\rho} \right) \frac{\partial \ln p}{\partial x_i} \quad D23$$

- $n$  = Gesamtzahl der Moleküle im Einheitsvolumen [1/m<sup>3</sup>]
- $\rho$  = Dichte [kg/m<sup>3</sup>]

Der erste Term auf der rechten Seite der Wärmeleitungsgleichung:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad D24$$

Ist das bekannte Wärmeleitungsgesetz nach Fourier und beschreibt den molekularen Energietransport.

Der zweite Term:

$$\frac{5}{2} kT \sum_s n_s (\vec{v}_D)_s \tag{D25}$$

Beschreibt den Transport von Wärme durch Diffusion für ein einatomiges Gas. Für ein mehratomiges Gas geht der Term  $\frac{5}{2} kT \sum n_s (\vec{v}_D)_s$  über in  $\sum n_s h_s (\vec{v}_D)_s$  hierin ist  $h_s$  die Enthalpie pro Molekül der Sorte  $s$  ( $h_s = 5/2 kT + u_s^{(int)}$ ) der erste Term ist die translatorische Energie, der zweite Term repräsentiert die internen Freiheitsgrade – Rotation und Schwingungen in der Verbindungsachse der Moleküle- siehe Kapitel F). Hierbei wird die Diffusionsgeschwindigkeit  $(\vec{v}_{Di})_s$  berechnet aus  $j_{i,s} = \rho_s * (\vec{v}_{Di})_s$  (siehe oben). Der Transport von Wärme infolge Diffusion hängt damit, von der Diffusionsgeschwindigkeit und der Dichte ab, d.h. je größer die Diffusionsgeschwindigkeit und je größer die Dichte der diffundierenden Partikel, desto größer der Wärmetransport durch Diffusion! An dieser Stelle sei noch vermerkt, dass bei Gleichheit der Massen und Gleichheit in den Potentialen (d.h. bei Gleichheit der wechselwirkenden Kräfte) treten keine Thermodiffusionsströme auf!

Der dritte Term:

$$p \sum_s \frac{1}{\rho_s} D_s^T \vec{d}_{i,s} \tag{D26}$$

Oder ausführlich

$$p \sum_s \frac{1}{\rho_s} D_s^T \left[ \frac{\partial n_s}{\partial n} + \left( \frac{n_s}{n} - \frac{\rho_s}{\rho} \right) \frac{\partial \ln p}{\partial \vec{x}_i} \right] \tag{D27}$$

Mit  $\rho = m * n$  folgt:

$$p \sum_s \frac{1}{\rho_s} D_s^T \left[ \frac{\partial n_s}{\partial n} + \frac{n_s}{n} \left( 1 - \frac{m_s}{m} \right) \frac{\partial \ln p}{\partial \vec{x}_i} \right] \tag{D28}$$

Beschreibt den Transport von Wärme infolge Diffusionsthermoeffekt. Man erkennt, dass der Wärmestrom direkt proportional dem herrschenden Druck, umgekehrt proportional der Speziesdichte, proportional dem Thermodiffusionskoeffizienten, Konzentrations- und Massenverhältnissen der einzelnen Spezies sowie dem logarithmischen Druckgradienten, ist.

Dieser Term dürfte hauptsächlich für den stark erhöhten Wärmestrom bei klopfender Verbrennung verantwortlich sein.

Damit ergibt sich der gesamte Wärmestrom auf der Grenzschicht zu:

$$\vec{q} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial \vec{r}} + \sum_{i=1}^v n_i h_i (\vec{v}_D)_i + \frac{kT}{n} \sum_{i=1}^v \sum_{j=1}^v \frac{n_j D_{ij}^T}{m_i D_{ij}} (\vec{v}_D)_i - (\vec{v}_D)_j \tag{D29}$$

Es ist zu beachten, dass  $j \neq i$  ist. Ferner ist:  $\vec{r} = \vec{r}_x + \vec{r}_y + \vec{r}_z$ .

## zu Annahme 5:

Die 1/6 Geschwindigkeitsverteilung ist nur im Gleichgewichtszustand erfüllt. In diesem Zustand sind alle Gradienten (Massetransport, Impulstransport und Wärmetransport) Null. Treten Gradienten der obigen Transportgrößen auf, so ist die Geschwindigkeitsgleichverteilung über die Raumkoordinaten gestört und damit abweichend von der 1/6 Verteilung.

## Kapitel E

### Warum haben die $\alpha$ - Zahlen einen Druckterm?

An dieser Stelle möchte ich noch auf einen scheinbaren Widerspruch der (einfachen) kinetischen Gastheorie mit den  $\alpha$  Werten von Woschni, Nusselt, Pflaum, Eichelberg etc., eingehen. Woschni gibt die  $\alpha$  Zahl wie folgt an:

$$\alpha_{W\ddot{U}} = 130 d^{0.2} T_x^{-0.53} p_x^{0.8} [C_1 c_m + C_2 \frac{V_h T_1}{p_1 V_1} (p_x - p_0)]^{0.8} \quad E1$$

$$\alpha_{W\ddot{U}} \text{ [W/m}^2 \text{ K]}$$

Hier wird eine Abhängigkeit der  $\alpha$  Zahl vom Druck in sehr hohem Maß ( $p_x^{0.8}$ ) suggeriert.

Die einfache kinetische Gastheorie fordert für einen sehr weiten Bereich, keine Abhängigkeit des Wärmeübergangskoeffizienten, und damit des Wärmeübergangs, vom Druck siehe:

$$\lambda = \frac{1}{3} l \bar{v} \rho c_v = \frac{1}{3} \frac{1}{\sqrt{2} \sigma^2 \pi n} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} nm \frac{f k}{2 m} \quad E2$$

Diese Gleichung führt, nach weiteren Umformungen auf den obigen bekannten Wärmeleitkoeffizient (für ein einatomiges Gas  $f=3$ ):

$$\lambda = \frac{1}{\sigma^2} \times \sqrt{\frac{k^3 T}{\pi m}} \quad E3$$

Dies ist in weiten Bereichen experimentell gut bestätigt (nur die Temperaturabhängigkeit ist fehlerhaft). Im Bereich kleiner Drücke (wenn  $l_f$  die Größe der Gefäßdimension annimmt) nimmt die Wärmeleitfähigkeit dem Druck proportional ab (Derwargefäße = Vakuummantelgefäß).

Da der Druckaufbau im Brennraum durch zünden des Kraftstoffes und oder der Hubbewegung des Kolbens erfolgt, sind die Verhältnisse im Brennraum instationär. Durch den sich verändernden Druck kommt es zu einer Gasbewegung im Brennraum. Der Koeffizient  $p_x^{0.8}$  spiegelt also nur den Geschwindigkeitstherm im Wärmeübergang wieder und steht nicht im Widerspruch zur Theorie.

## Kapitel F

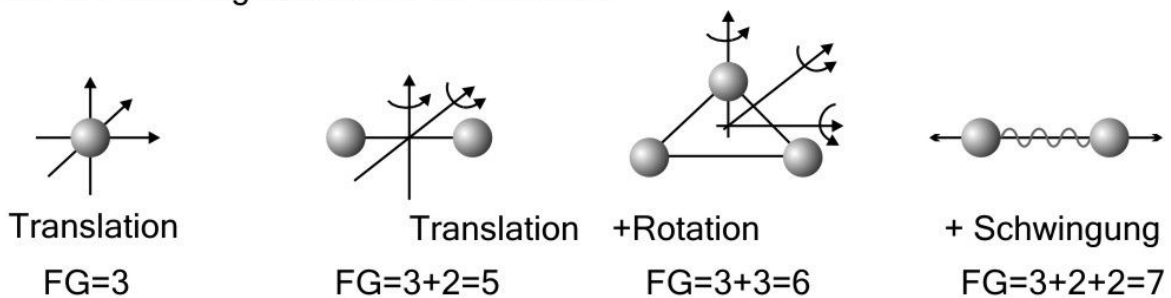
### Über die Abhängigkeit des Wärmeleitungskoeffizienten vom Molekülmodell und den Freiheitsgraden.

Ein paar Gedanken über molekulare Freiheitsgrade: die Gleichung:

$$\lambda = \frac{1}{3} l_f \bar{v} \rho c_v \left[ \frac{W}{m K} \right] \quad F1$$

Gilt streng genommen nur für einatomige Gase, also für Gase mit drei Freiheitsgraden  $F_G$ . Die Freiheitsgrade können als Möglichkeit der Moleküle Energie zu speichern gedeutet werden. Ein einatomiges Gas hat somit drei Freiheitsgrade (die drei kartesischen Koordinaten). Besteht ein Molekül aus zwei Atomen, so hat es 5  $F_G$  (3 kartesische und 2 senkrecht zur Verbindungsachse der Atome). Auf den letzt genannten  $F_G$  speichert das Molekül Energie in Form von Rotation. Diese internen Freiheitsgrade sind meist schon bei sehr niedrigen Temperaturen (5K) voll angeregt. Bei hohen Temperaturen (zum Beispiel für  $O_2$  bei Temperatur größer 2300K und bei  $N_2$  bei Temperatur größer 3400K) hat das Molekül ferner die Möglichkeit Energie in der Verbindungsachse zwischen den Atomen zu speichern und damit zusätzliche interne oder innere Freiheitsgrade zu bilden. Das ist die Energie des Feder-Masseoszillators. In diesem Oszillator wechselt sich die potentielle Energie (die Energie der gespannten Feder) fortlaufend mit der kinetischen Energie (Bewegung der beiden Atome zueinander oder voneinander weg) ab, d.h. die Summe der beiden Energien ist konstant. Moleküle mit mehr als 2 Atomen, haben bei niedrigen Temperaturen 6  $F_G$  (drei der Translation und drei der Rotation) bei hohen Temperaturen ( $T \geq \text{ca.} 3000\text{K}$ ) 9  $F_G$ . Siehe Bild 9

Bild 9: Freiheitsgrade einfacher Moleküle



Grundsätzlich wächst die Zahl der Freiheitsgrade mit der Temperatur ständig an, dies schlägt sich beispielsweise im Isentropenexponenten  $\kappa = \frac{(F_G + 2)}{F_G}$  nieder, der mit wachsender Temperatur immer kleiner wird.

Für mehratomige Gase gibt es eine Eucken – Korrektur welche die internen Freiheitsgrade bei der Bestimmung des Wärmeleitungskoeffizienten mit berücksichtigt. In obiger Gleichung wird die spezifische Wärmekapazität  $c_v$  in zwei Teile aufgetrennt: in einen translatorischen Anteil

$c_{Vtr} = 3/2 R$  und in einen inneren Anteil  $c_{Vin} = (F_G - 3)/2 R$ . Damit ergibt sich für den Wärmeleitkoeffizient bei mehratomigen Gasen:

$$\lambda = \eta R \left( \frac{15}{4} + \frac{F_G - 3}{2} \right) = \eta c_{Vtr} \frac{5}{2} + \eta c_{Vin} 1 \quad \left[ \frac{W}{mK} \right] \quad F2$$

Eucken gewichtet damit den Anteil der translatorischen Energie (den translatorischen Freiheitsgraden) mit je  $5/2$  und den Anteil an innerer Energie (den inneren Freiheitsgraden) mit je 1. Das Ergebnis entspricht den Erwartungen, schließlich trägt die translatorische Energie den Hauptanteil am Wärmetransport.

Der Wärmeleitkoeffizient  $\lambda$  hängt im Wesentlichen vom Beschreibungsmodell ab. Wie oben (Kapitel A) bereits erwähnt, ist der Wärmestrom und mithin auch die Wärmeleitfähigkeit die Folge von molekularen (energetischen) Austauschprozessen. Es sei

$$e m = \frac{1}{2} m c_0^2 = m c_V T = \frac{3}{2} k T \quad F3$$

mithin ist die spezifische Energie eines Moleküls

$$e = \frac{c_0^2}{2} = c_V T = \frac{3}{2} \frac{k}{m} T \quad \left[ \frac{m^2}{s^2} \right] \quad F4$$

hieraus folgt sofort:

$$c_0 = \sqrt{3 \frac{k}{m} T} \quad \left[ \frac{m}{s} \right] \quad F5$$

und mit  $\lambda$  nach dem  $1/6$  Gesetz (dieses Gesetz besagt, dass sich alle Moleküle nur in die kartesischen Richtungen bewegen)

$$\lambda = \frac{1}{3} l_f c_0 \varrho c_V = \frac{1}{3} \frac{1}{\pi \sigma^2 n} \sqrt{3 \frac{k}{m} T} n m c_V = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{k m T}}{\pi \sigma^2} c_V \quad \left[ \frac{W}{mK} \right] \quad F6$$

mit der mittleren freien Weglänge

$$l_f = \frac{c_0}{\nu} = \frac{1}{\pi \sigma^2 n} [m] \quad F7$$

mit der Kollisionsfrequenz

$$\nu = \pi \sigma^2 n c_0 \quad \left[ \frac{1}{s} \right] \quad F8$$

Ein genauerer Wert ergibt sich, wenn die Geschwindigkeit  $c_0$  nicht konstant ist, sondern nach einer Boltzmann – Maxwell - Verteilung (siehe Kapitel D) verläuft. Wenn ferner die mittlere freie Weglänge nach dem „Starr-Kugel-Modell“ ( Rigid spheres siehe oben) und einer Maxwellverteilung gerechnet ist:

$$\lambda = \frac{25\pi}{64} l_f c_0 \varrho c_V \quad F9$$

Hierin ist:

$$l_f = \frac{1}{\sqrt{2} \sigma^2 \pi n} [m] \quad F10$$

$$c_0 = \sqrt{\frac{8 k T}{\pi m}} \left[ \frac{m}{s} \right] \quad F11$$

Für ein Gas mit drei Freiheitsgraden:

$$\lambda = \frac{25}{32} \frac{1}{\sigma^2} \sqrt{\frac{k m T}{\pi}} c_V \left[ \frac{W}{m K} \right] \quad F12$$

Und mit

$$\eta = \frac{5}{16} \frac{1}{\sigma^2} \sqrt{\frac{k m T}{\pi}} \left[ \frac{kg}{m s} \right] \quad F13$$

Folgt

$$\lambda = C \eta c_V \quad F14$$

Im einfachsten Modell ist die Proportionalkonstante  $C = 1$ , im Fall einer Boltzmann – Verteilung der Geschwindigkeit ist  $C = 5/2$ . Man erkennt, dass Viskosität und Wärmeleitung sich nur durch die spezifische Wärmekapazität  $c_V$  und einen Faktor  $C$  unterscheiden. Es sei auch an dieser Stelle nochmals vermerkt, dass dies eine nahezu konstante Prandtl-Zahl zur Folge hat. Wie oben bereits erwähnt, hängt die Wärmeleitfähigkeit in weiten Bereichen nicht von der Dichte ab. Auf makroskopischer Ebene besteht nur eine Abhängigkeit von der Temperatur. Auch dieses genauere Modell kann jedoch die experimentelle Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Temperatur:  $\lambda(\text{gemessen}) \sim T^{0.8}$  nicht erklären ( $\lambda(\text{kalkuliert}) \sim T^{0.5}$ ). Die Abhängigkeit bei Molekülen mit mehr als 3 Freiheitsgraden wurde von Eucken gegeben (siehe oben F2).

Eine bessere Übereinstimmung wird erzielt, wenn mit einer molekularen Geschwindigkeitsverteilungsfunktion  $f(\xi, r, t)$  mit  $\xi = \text{Gesamtgeschwindigkeit}, r = \text{Ortsvektor}, t = \text{Zeit}$  und ohne  $1/6$  Verteilung sowie ohne Gleichgewichtsbedingung gearbeitet wird. Es versteht sich, dass Partikelzahl, Impuls- und Energieerhaltung über dem Stoß erhalten bleiben.

Eine Geschwindigkeitsverteilungsfunktion nach Boltzmann hat folgende Eigenschaften:

Durch die Boltzmann-Gleichung wird eine Verteilungsfunktion  $f(\xi, r, t)$  von Nichtgleichgewichtszuständen in Zeit und Raum angegeben.

Mit der Boltzmann-Gleichung kann auch der Sonderfall einer Gleichgewichtsverteilung (Maxwell-Verteilung) modelliert werden. Die Lösungen stellen die Eulergleichungen (reibung- und wärmeleitungs-freie Strömungen) dar.

Gasdynamische Vorgänge werden mit der Boltzmann-Gleichung in der universellsten Form gelöst. Bei gegebener Verteilung sind alle makroskopischen Größen wie: Druck, Temperatur, Diffusion, Reibung und Wärmetransport darstellbar.

Die Boltzmann-Gleichung deckt den kompletten Zustandsraum, von sehr kleinen mittleren freien Weglängen (hohe Dichte) bis hin zur freien Molekülströmung (große mittlere freie Weglänge), ab.

Gibt es nur geringe Unterschiede vom thermodynamischen Gleichgewicht, so ist es möglich, mit einer asymptotischen Entwicklung, die nach ihren Begründern Chapman und Enskog benannte Methode, die Boltzmann-Gleichung zu lösen. Die aus der Chapman-Enskog-Entwicklung resultierenden Momente führen auf das Navier-Stokes-Gleichungssystem für die erste Näherung und auf die Burnett-Gleichungen für höhere Näherungen.

Analytische und numerische Lösungen (Monte-Carlo-Methode) gehen über die üblichen Aussagen der Kontinuumsmechanik hinaus.

In aller Regel ist eine Boltzmann-Gleichung analytisch nicht lösbar und es werden numerische Verfahren (Monte-Carlo-Methode) zur Lösung verwendet.

Um den Rechenaufwand zu begrenzen, werden folgende Einschränkungen gemacht:

1. Das Molekülmodell bleibt zu Anfang auf das Starrkugelmodell (rigid spheres) beschränkt.
2. Die Moleküle üben nur über eine sehr kurze Distanz Kräfte auf einander aus.
3. Der Moleküldurchmesser ist klein gegen den Molekülabstand und dieser klein gegen die mittlere freie Weglänge.
4. Auf elektrisch geladene Moleküle können, über ein elektrisches Feld, Kräfte auf das Molekül wirken, sodass sich die Teilchenbahn krümmt, dies hat jedoch auf den Stoß keine weiteren Auswirkungen.
5. Da die Kollisionszeit sehr kurz ist, ändert sich die Verteilungsfunktion nicht.
6. Das Gas ist nicht sehr hoch verdichtet, sodass es nur binäre Stöße gibt (dreier Stöße sind nicht relevant).

Unter diesen Bedingungen gibt Hänel die Boltzmann-Gleichung wie folgt an:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \xi_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_{i=1}^3 \frac{F_i}{m} \frac{\partial f}{\partial \xi_i} = \int_{\xi_1} \int_{A_C} (f' f'_1 - f f_1) g dA_C d\xi_1 \quad F15$$

Differenzgeschwindigkeit  $g = \xi_1 - \xi$  der Stoßpartikel,  $A_C$  die Oberfläche des Ortsraumes.

Oder in der Vektorschreibweise:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi * \nabla_r f + \frac{F_i}{m} * \nabla_{\xi} f = \int_{\xi_1} \int_{A_C} (f' f'_1 - f f_1) g dA_C d\xi_1 \quad F16$$

Hierin sind:  $f$  die gesuchte Nichtgleichgewichtsverteilungsfunktion (vor dem Stoß),  $i=1,2,3$  die kartesischen Raumkoordinaten,  $\xi_i$  die Gesamtgeschwindigkeit aus molekularer Geschwindigkeit  $c_i$  und der makroskopischen Geschwindigkeit  $v_i$ ,  $x_i$  eine der drei Raumkoordinaten,  $F_i$  eine äußere Kraft in Richtung  $i$ ,  $m$  das Molekulargewicht,  $f'$  die Verteilungsfunktion nach dem Stoß,  $f'_1$  die Verteilungsfunktion von 1 nach dem Stoß,  $f_1$  die Verteilungsfunktion vor dem Stoß,  $g$  die Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner,  $A_C$  die Stoßfläche,  $\xi_1$  Gesamtgeschwindigkeit. Wir erkennen aus dem Doppelintegral, dass die

Boltzmann-Gleichung eine Aussage über einen Orts- und Geschwindigkeitsraum mit insgesamt 6 Koordinaten macht. Dieser Raum wird allgemein Phasenraum genannt. Die linke Seite der Boltzmann-Gleichung wird als Transport-Term ( $Df/Dt$ ), die rechte Seite als Kollisions-Term ( $Df/Dt$ ), bezeichnet. Man erkennt, dass Lösungen der Boltzmann-Gleichungen äußerst kompliziert sind, sodass nur für die Grenzfälle einer freien Molekülströmung ( $l_f \rightarrow \infty$ ) und einer Gleichgewichtsverteilung ( $l_f \rightarrow 0$ ), exakte Lösungen angegeben werden. Wir betrachten den technisch interessanten Fall ( $l_f \rightarrow 0$ ) einer Kontinuumsströmung, dann wird der Transportterm  $Df/Dt = 0$

$$0 = \int_{\xi_1} \int_{A_C} (f' f'_1 - f f_1) g dA_C d\xi_1 \quad F17$$

Damit diese Gleichung erfüllt ist, muss

$$f' f'_1 - f f_1 = 0 \quad F18$$

Diese Bedingung ist hinreichend als auch notwendig. Die Lösung dieser Gleichung führt unter der Annahme, dass: Massen, Impuls und Energie erhalten bleiben, auf die Maxwell-Verteilung (siehe Kapitel D). Die Gleichung besagt, dass die Anzahl der Teilchen die infolge Stöße den Geschwindigkeitsraum verlassen von anderer Stelle infolge Stöße in den Geschwindigkeitsraum eintreten. Ein solches Verhalten bezeichnet man auch als thermodynamisches Gleichgewicht.

Um die Boltzmann-Gleichung auch bei technisch relevanten Bedingungen zu lösen, wird der nach Bhatnagar, Gross und Krook bezeichnete Modellansatz (BKG-Modell) verwendet. In ihm wird der Kollisionsterm ersetzt durch  $\omega (F - f)$ . Damit vereinfacht sich die Boltzmann-Gleichung zu

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \xi_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_{i=1}^3 \frac{F_i}{m} \frac{\partial f}{\partial \xi_i} = \omega (F - f) \quad F19$$

Die so vereinfachte Gleichung erfüllt alle wesentlichen Bedingungen der ursprünglichen Boltzmann-Gleichung insbesondere die Entropiebedingung. In einer weiteren Vereinfachung, der Chapman-Enskog-Entwicklung, werden die bekannten Euler-Gleichungen, Navier-Stokes-Gleichungen sowie die Burnett-Gleichungen, dargestellt. Auch hier ist  $f$  eine beliebige Nichtgleichgewichtsverteilung und  $F$  eine örtliche Maxwell-Verteilung und  $\omega$  eine molekulare Kollisionsfrequenz die von Dichte und Temperatur abhängt. Hänel gibt eine Lösung der Chapman-Enskog-Entwicklung aus dem BKG-Modell wie folgt an

$$\lambda = 2 \frac{k^2 T}{m} \int A \hat{C}_i F dc \quad F20$$

Hieraus lässt sich, in Abhängigkeit vom Potential,  $\lambda$  wie folgt berechnen:

$$\lambda = \lambda_r \left( \frac{T}{T_r} \right)^{(\alpha+4)/2\alpha} \quad F21$$

Hierin ist  $\lambda_R = \text{Bezugswärmeleitungskoeffizient}$  und  $T_R = \text{Bezugstemperatur}$ .  $\alpha$  ermittelt sich aus dem Molekülmodell ( $\alpha \rightarrow \infty$  für das *rigid sphere Modell*) und ( $\alpha \sim r^{-4}$  für das *Maxwell – Potential*). Für das Starr-Kugel-Modell (rigid sphere Modell) folgt die bekannte Abhängigkeit  $\lambda \sim T^{0.5}$  und für das Maxwell-Modell folgt  $\lambda \sim T^1$ . Wie zu erwarten war, können beide Modelle die gemessene Temperaturabhängigkeit des Wärmeleitungskoeffizienten nicht mit genügender Genauigkeit wieder geben.

## Kapitel G

### Abschätzung der Transportkoeffizienten aus realistischen Potentialen

Wir beginnen mit einem binären Stoß. Die Abbildung 10 zeigt einen binären Stoß im dreidimensionalen Raum.

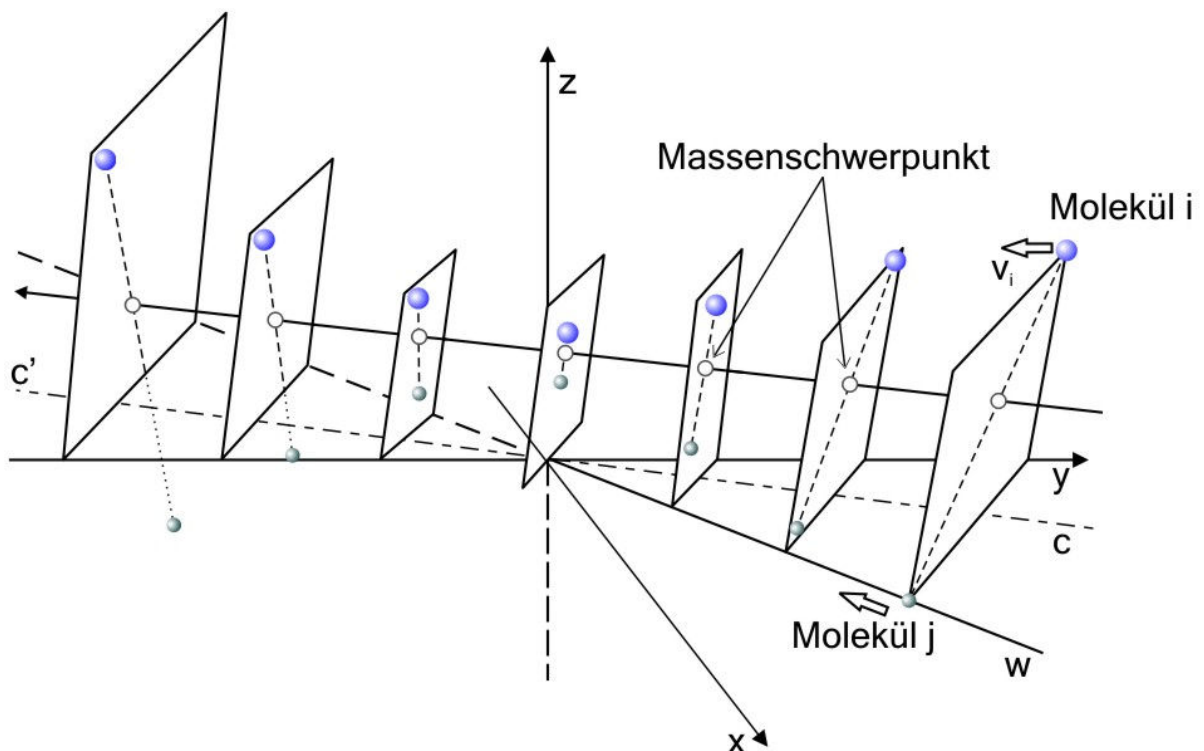


Bild 10: Darstellung eines dreidimensionalen Stoßvorgangs. Die einzelnen Bilder sind wie Schnappschüsse eines gefilmten Stoßvorganges. Man beachte, dass durch den Stoß die Lage der Schwereachse(welche die beiden Stoßpartner bilden) nicht beeinträchtigt wird.

Man sieht, wie die beiden Stoßpartner (i, j) sich in einer Ebene (welche durch die Ortsvektoren von i und j aufgespannt wird) auf einander zu bewegen (W liegt in der X-Y-Ebene). Hierbei bewegt sich das Massenzentrum mit einer konstanten Geschwindigkeit welche sich auch durch den Stoß nicht ändert. Die durch die Massenpunkte i, j aufgespannte Ebenen mit den

sich annähernden und nach dem Stoß entfernenden Massenpunkte, erscheinen wie Momentaufnahmen eines gefilmten Stoßvorganges. Werden alle Ebenen zu einer Ebene zusammengefasst, so entsteht Bild 11.

Es sei  $K$  die Bewegungsenergie der beiden Stoßpartner:  $K = \frac{1}{2}\mu[\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2] [J]$  G1

Der erste Term repräsentiert den translatorischen Anteil, der Zweite den Anteil aus der Rotation.

Hierin ist  $\mu = \text{reduzierte Masse}$  mit

$$\frac{1}{\mu_{12}} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \left[ \frac{1}{kg} \right]$$
 G2

Es sei darauf hin gewiesen, dass  $\mu = 1/2 m$ , wenn  $m_1 = m_2 = m$ . Diese Beziehung sowie die Kenntnis der potentiellen Energie des Systems ist von zentraler Bedeutung für den Stoßvorgang. Überführen wir nun das Problem der zwei Massen im  $R^3$  in ein Problem mit einer Masse  $\mu$  im  $R^2$  in einem sphärischen, symmetrischen Potential-Feld wie in Bild 11 und in Bild 12 gezeigt.

Folgende Gleichungen können aus den Bildern 10, 11, 12 und den Erhaltungssätzen der Energie und dem Drehimpuls geschlossen werden.

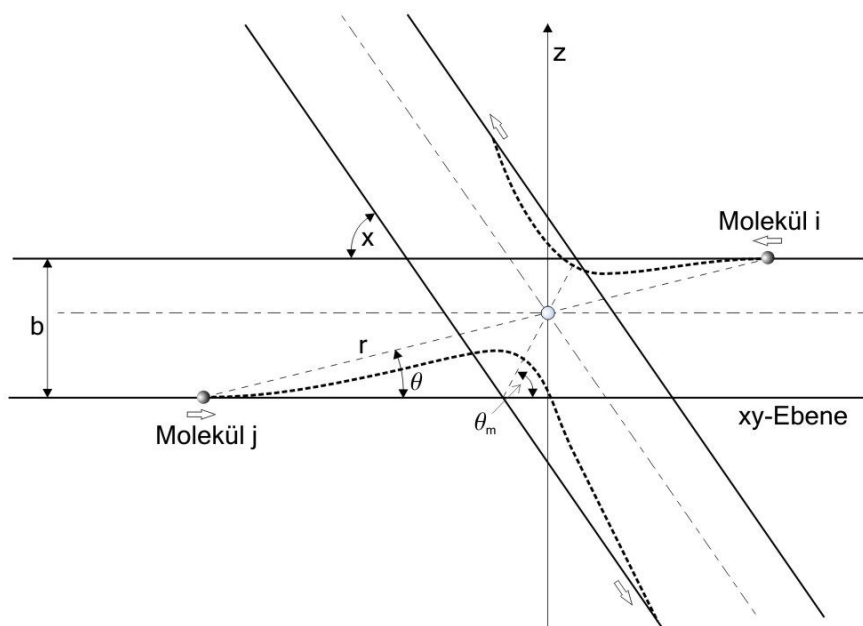


Bild 11: Darstellung des Stoßvorgangs aus Bild 10 im zweidimensionalen Raum. Dargestellt ist der kleinste Abstand der Stoßpartner sowie der Winkel bei kleinstem Abstand und die resultierende Flugbahn.

Aus der Erhaltung des Drehimpulses folgt unmittelbar:

$$\mu b g = \mu r^2 \dot{\theta} \left[ \frac{kg m^2}{s} \right]$$
 G3

Und aus der Erhaltung der Energie:

$$\frac{1}{2}\mu g^2 = \frac{1}{2}\mu(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) + \varphi(r) \quad [J] \quad G4$$

Mit:  $b = \text{Stoßparameter [m]}$ , ist die kleinste Annäherung ohne ein Potential  $\varphi(r)$  siehe Bild 11 und 12.  $g = \text{anfängliche Relativgeschwindigkeit der Stoßmoleküle}$ .

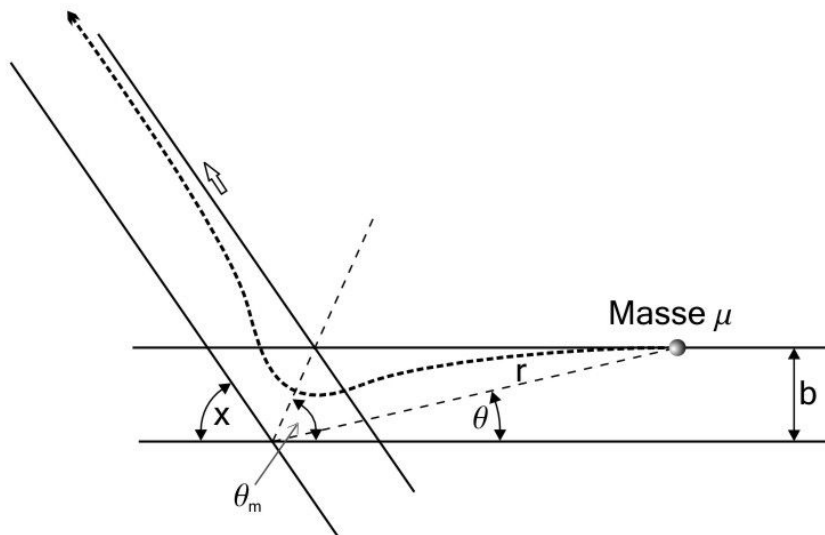


Bild 12 soll zeigen, wie aus einem Zweimassensystem im R3 ein Einmassensystem im R2 wird. Ferner sind dargestellt:  $b = \text{Abstand der Stoßpartner ohne die Anwesenheit eines Potentials}$ . Abstand der Stoßpartner als Funktion des Winkels unter dem Einfluss des Potentials, kleinste Annäherung der Stoßpartner und die resultierende Ablenkung.

Aus den beiden obigen Gleichungen G3 und G4 folgt:

$$\frac{1}{2}\mu g^2 = \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + \frac{1}{2}\mu g^2 \left(\frac{b^2}{r^2}\right) + \varphi(r) \quad [J] \quad G5$$

Die obige Gleichung ist eine Beschreibung einer eindimensionalen Bewegung einer Masse  $\mu$  mit einer totalen Energie  $\frac{1}{2}\mu g^2$  in einem effektiven Potentialfeld:

$$\varphi_{eff(r)} = \varphi(r) + \frac{1}{2}\mu g^2 \left(\frac{b^2}{r^2}\right) \quad [J] \quad G6$$

Hierin ist:

$$\frac{1}{2}\mu g^2 \left(\frac{b^2}{r^2}\right) \quad [J] \quad G7$$

Das Zentrifugalpotential.

Bild 13 zeigt das effektive Potential über dem Abstand  $r$ , eines eindimensionalen Einmassen Problems.

Die einzige Größe aus dem Kollisionsvorganges welcher in die Transportkoeffizienten eingeht, ist der Ablenkungswinkel  $\theta$ . Aus Bild 12 erkennt man:

$$\chi = \pi - 2\Theta_m \text{ [rad]} \quad G8$$

$\chi$  ist der Winkel zwischen den Relativgeschwindigkeitsvektoren vor und nach dem Stoß

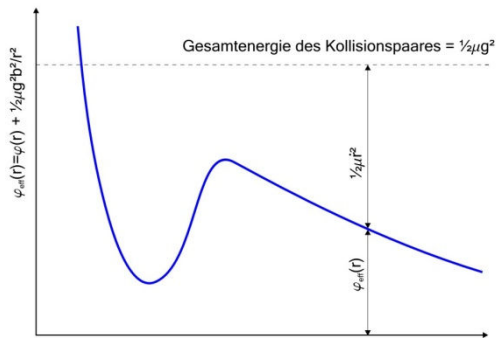


Bild 13: Darstellung des Stoßvorgangs aus Bild 10 auf ein eindimensionales Einmassenproblem reduziert. Dargestellt sind die verschiedenen Potentialanteile über dem Radius. Die unterbrochene Linie am oberen Bildrand stellt die Gesamtenergie des Systems dar. Die blaue Kurve gibt die Anteile an potentieller und kinetischer Energie an.

$\chi$  geht aus Bild 11 und 12 hervor.  $\Theta_m$  ist der Winkel aus der Verbindungslinie: nächste Annäherung von i und j (als Funktion von  $\Theta$ ) und der XY-Ebene (siehe Bild 11), in dem r (intermolekularer Abstand) ein Minimum hat. Dieses Minimum ist  $r_m$  (kleinster Abstand der Moleküle i und j).

Eliminieren wir nun die Zeitabhängigkeit von r und  $\Theta$  so erhalten wir eine analytische Beschreibung des Stoßes. In dem wir:  $dr/d\Theta = 0$  setzen, erhalten wir  $r_m$  und  $\Theta_m$ .  $\frac{dr}{d\Theta} =$

$$\frac{dr/dt}{d\Theta/dt} = - \left( \frac{r^2}{b} \right) \sqrt{1 - \frac{\varphi(r)}{1/2 \mu g^2} - \frac{b^2}{r^2}} \text{ [m]} \quad G9$$

Wir erhalten  $\Theta_m$  mit:

$$\Theta_m = \int_0^{\Theta_m} d\Theta = - \int_{\infty}^{r_m} \frac{(b/r^2)dr}{\sqrt{1 - (\varphi(r)/\frac{1}{2}\mu g^2) - (b^2/r^2)}} \text{ [rad]} \quad G10$$

Mit Gleichung G8 folgt:

$$\chi(b, g) = \pi - 2b \int_{r_m}^{\infty} \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - (\varphi(r)/\frac{1}{2}\mu g^2) - (b^2/r^2)}} \text{ [rad]} \quad G11$$

Wenn  $\varphi(r)$  als Hartkugel-Modell (rigid-spheres-Modell) gewählt wird, so kann  $\chi$  analytisch bestimmt werden, für ein realistisches Potential (z.B. Lennard-Jones 12-6) existiert keine analytische Lösung und das Integral muss numerisch gelöst werden.

Für kleine Abweichungen von thermodynamischen Gleichgewicht haben Chapman und Enskog – unabhängig von einander in den 1915 und 1916 er Jahren – eine Lösung vorgeschlagen. Die Lösungsmethoden differieren, Chapman hat einen intuitiven Weg gewählt und die Enskog – Lösung geht auf eine mathematische Theorie von Hilbert, zurück. Die unbekannte Boltzmann – Funktion  $f$  wird durch eine asymptotische Approximation:

$$f = f_0(1 + \Phi_1 + \Phi_2 + \dots) \tag{G12}$$

Und

$$\hat{f} = \hat{f}_0(1 + \xi\phi_1 + \xi^2\phi_2 + \dots) \tag{G13}$$

ersetzt. Wird in der Boltzmann-Gleichungen  $f$  durch  $f_0$  eingesetzt so handelt es sich um eine Gleichgewichtsströmungen in der keine Reibung und kein Wärmetransport auftritt, das Ergebnis sind die Eulergleichungen. Wird  $f$  durch  $f_0(1 + \Phi_1)$  eingesetzt so liefert die Boltzmann-Gleichung das Navier-Stokes Gleichungssystem. Ersetzt man  $f$  durch  $f_0(1 + \Phi_1 + \Phi_2)$  erhält man das Burnett-Gleichungssystem.

Leider kann diese Methode nicht zur Lösung von Schockwellen oder Wellen aus Detonationen, angewendet werden, da obige Voraussetzungen (kleine Abweichungen vom thermodynamischen Gleichgewicht) infolge großer Gradienten nicht mehr gegeben sind.

Zur Lösung, wird eine Hilfsgröße das „reduzierte Stoßintegral“

$$\Omega_{ij}^{(l,s)} = \sqrt{\frac{2\pi kT}{\mu_{ij}}} \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\gamma_{ij}^2} \gamma_{ij}^{2s+3} (1 - \cos^l(\chi)) b db d\gamma_{ij} \tag{G14}$$

eingeführt. Es gibt die Abweichung des realen Stoßes (unter Einwirkung des Lennard Jones 6/12 Potential) vom idealisierten Stoß (unter dem Einfluss des rigid spheres Potentials) an. Hierin ist:  $\mu_{ij}$  die reduzierte Masse der Moleküle i und j (wie in G2 definiert),  $\gamma_{ij}$  reduzierte relative Anfangsgeschwindigkeit der Stoßpartner. Mit

$$\gamma^2 = \frac{\frac{1}{2}\mu g^2}{kT} \tag{G15}$$

$$\frac{1}{2}\mu g^2 = \text{totale Energie der Stoßpartner [J]} \tag{G16}$$

Siehe auch hierzu Bild 13.  $\chi$  und  $b$  gehen aus den Bildern 10-12 und den Gleichungen G8 für  $\chi$  und G3 für  $b$  hervor.

Hirschfelder gibt die Höhe der Approximationen für die verschiedenen Transportkoeffizienten als Anzahl der Terme der Sonine polynomial Expansion wie folgt an:

$$S_m^{(n)}[x] = \sum_{p=0,1,2,3..}^n \frac{(m+n)!}{(m+p)!p!(n-p)!} * (-x)^p \tag{G16a}$$

für  $n=0 \rightarrow S_m^{(0)}[x] = 0,$

für  $n=1 \rightarrow S_m^{(1)}[x] = m + 1 - x,$

für  $n=2 \rightarrow S_m^{(2)}[x] = \frac{(m+1)(m+2)}{2} + (m+2)(-x) + \frac{x^2}{2}$

man beachte: die Polynome haben orthogonale Eigenschaften. Dies bedeutet:

$$\int_0^\infty x^m e^{-x} S_m^{(n)}[x] S_m^{(q)}[x] dx = 0 \quad \text{für } n \neq q \text{ und} \quad G16b$$

$$\int_0^\infty x^m e^{-x} S_m^{(n)}[x] S_m^{(q)}[x] dx = \frac{(m+n)!}{n!} \quad \text{für } n = q \quad G16c$$

Hieraus ergeben sich, in einem komplizierten mathematischen Verfahren, abhängig vom Grad der Approximation folgende Transportgrößen (in Abhängigkeit von obiger Hilfsgröße  $\Omega$  – aus G14–):

Transport- koeffizient	reine Substanz 1st Approximation	Gemisch 2st Approximation	reine Substanz 2nt Approximation
$\eta$	$\Omega^{(2,2)}$	$\Omega^{(2,2)}, \Omega^{(1,1)}$	$\Omega^{(2,s)} \quad s = 2,3,4$
$\lambda$	$\Omega^{(2,2)}$	$\Omega^{(2,2)}, \Omega^{(1,s)} \quad s = 1,2,3$	$\Omega^{(2,s)} \quad s = 2,3,4$
$\mathfrak{D}$	$\Omega^{(1,1)}$	$\Omega^{(1,1)}$	$\Omega^{(2,2)}, \Omega^{(1,s)} \quad s = 1,2,3$
$k_T$		$\Omega^{(2,2)}, \Omega^{(1,s)} \quad s = 1,2,3$	$\Omega^{(2,t)} \quad \Omega^{(1,s)} \quad \Omega^{(3,3)}$ $s = 1,2,3,4,5$ $t = 2,3,4$

Zur Lösung der Gleichung G14 wird diese wie folgt aufgespalten:

$$\chi(g, b) = \pi - 2b \int_{r_m}^\infty \frac{dr/r^2}{\sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{\varphi(r)}{\frac{1}{2}\mu g^2}}} \quad [rad] \text{ Ablenkungswinkel} \quad G17$$

$$Q^l(g, b) = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos^l(\chi)) b db \quad [m^2] \quad \text{Querschnitts Fläche (Crosssections)} \quad G18$$

$$\Omega_{ij}^{(l,s)}(T) = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu_{ij}}} \int_0^\infty e^{-\gamma^2} \gamma_{ij}^{2s+3} Q^l(b) d\gamma_{ij} \quad \text{reduziertes Stoßintegral} \quad G19$$

$\gamma^2$  ist in G15 definiert,  $\mu$  = reduzierte Masse der Kollisionspartner, wenn die Kollision zwischen verschiedenen Stoßpartnern  $i$  und  $j$  abläuft, so ist  $\varphi_{ij}$  das entsprechende Potential,  $\mu_{ij}$  ist unter G2 definiert,  $\Omega_{ij}^{(l,s)}(T)$  das Integral verbindet die Interaktion der beiden Stoßpartner  $i$  und  $j$ . Für Stöße mit gleichen Stoßpartnern (z.B.  $i$ ) ist  $\varphi_{ii}$ ;  $\mu_{ii} = 1/2 m_i$ ;  $\Omega_{ii}^{(l,s)}(T)$ . An dieser Stelle sei noch einmal vermerkt, dass für ein einfaches Potentialmodell wie z.B. rigid sphere Modell die Integrale gelöst werden können:

$$[Q^{(l)}]_{rigid\ sphere} = \left[1 - \frac{1}{2} \frac{1+(-1)^l}{1+l}\right] \pi \sigma^2 \quad [m^2] \quad G20$$

$$[\Omega^{(l,s)}]_{rigid\ sphere} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu}} \frac{(s+1)!}{2} [Q^{(l)}]_{rigid\ sphere} \quad G21$$

Man erkennt, dass für ein einfaches Modell der Stoßquerschnitt (Crosssection) nicht mehr von der Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner ( $g$ ) – so wie man dies auch erwarten würde – abhängt (d.h. der Stoßquerschnitt hängt nicht von der Temperatur ab).

Für die weitere Rechnung werden alle Größen Dimensionslos gemacht. Hinter dieser Überlegung steckt der Gedanke, dass eine jede physikalische Lösung eines Problems niemals von einem Einheitensystem abhängig sein kann, da jedem Einheitensystem immer eine Willkürlichkeit anhaftet.

Die Potentialfunktion  $\varphi(r) = \epsilon f(r/\sigma)$  nimmt für alle Substanzen die gleiche Funktion an, es ändern sich lediglich  $\epsilon, \sigma$ . Folgende reduzierten Größen werden eingeführt:

$$r^* = r/\sigma \text{ reduzierter intermolekularer Abstand} \quad G22$$

$$b^* = b/\sigma \text{ reduzierter (impact) Stoßparameter} \quad G23$$

$$\varphi^* = \varphi/\epsilon \text{ reduzierte intermolekulare potentielle Energie} \quad G24$$

$$T^* = kT/\epsilon \text{ reduzierte Temperatur} \quad G25$$

$$g^{*2} = \frac{1/2 \mu g^2}{\epsilon} \text{ reduzierte relative kinetische Energie} \quad G26$$

Damit gehen Gleichung 17, 18, 19 über in:

$$\chi(g^*, b^*) = \pi - 2b^* \int_{r_m^*}^{\infty} \frac{dr^*/r^{*2}}{\sqrt{1 - \frac{b^{*2}}{r^{*2}} - \frac{\varphi^*(r)}{g^{*2}}}} \quad G27$$

$$Q^{(l)*}(b^*, g^*) = \frac{2}{\left[1 - \frac{11+(-1)^l}{2} \frac{1}{1+l}\right]} \int_0^{\infty} (1 - \cos^l(\chi)) b^* db^* \quad G28$$

$$\Omega^{(l,s)*}(T^*) = \frac{2}{(s+1)! T^{*s+2}} \int_0^{\infty} e^{-g^{*2}/T^*} g^{*2s+3} Q^{(l)*}(g^*) dg^* \quad G29$$

verwendet man dieses Gleichungssystem mit einfachen Potentialen, so erhält man recht gute Resultate für die Transportkoeffizienten bei hohen Temperaturen. Auch können die einfachen Potentiale die Natur des Stoßvorganges in ihren wesentlichen Grundzügen gut wieder geben. Eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messwerten kann jedoch nur über ein realistisches Potential erreicht werden. Ein solches Potential ist das Lennard Jones Potential:

$$\varphi(r) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad G30$$

$\epsilon$  ist die Tiefe der Potentialdelle und damit die maximale Anziehungsenergie.  $\sigma$  ist der Kollisionsradius (für Stöße bei niedrigen Energien ist das der Wert für  $r$  wenn  $\varphi(r) = 0$ ). Als erstes betrachtet man den Ablenkungswinkel und den Stoßquerschnitt (Crosssection) dann die verschiedenen Transportkoeffizienten. Am Ende vergleicht man die Ergebnisse mit den Messwerten.

Wir schreiben auch das effektive Potential in dimensionsloser Form:

$$\varphi_{eff}^* = \varphi^*(r^*) + \frac{g^{*2} b^{*2}}{r^{*2}} \quad G31$$

Hierin ist  $\varphi(r)$  das bekannte Potential (Lennard Jones Potential) und der additive Anhang das Zentrifugalpotential (Zentrifugalenergie). Das reduzierte effektive Potential ist eine Funktion von  $r^*$  in Abhängigkeit des Parameters  $g^{*2}b^{*2}$ .

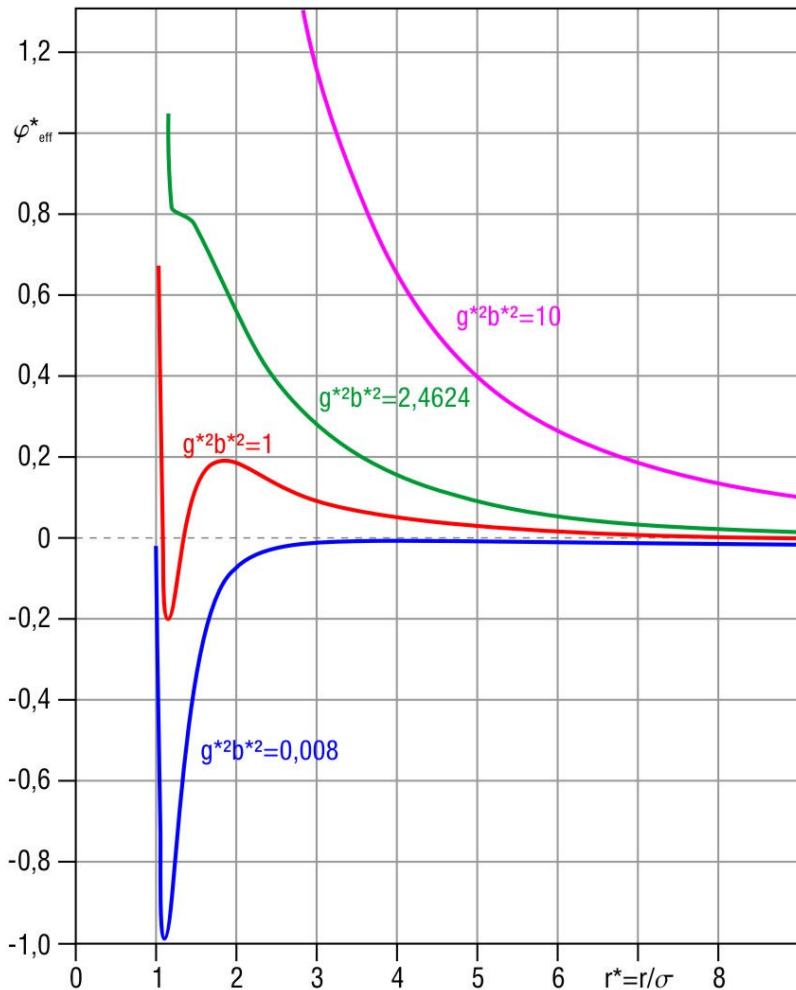


Bild 14 zeigt den Verlauf des effektiven Potentials für verschiedene Werte von  $g^{*2}b^{*2}$ . Man erkennt: für große Werte von  $g^{*2}b^{*2} = 10$  ist das effektive Potential streng monoton fallend über dem reduzierten Abstand. Das bedeutet, es herrschen nur abstoßende Kräfte über dem reduzierten Abstand, die Kräfte nehmen mit zunehmendem Abstand rasch ab (siehe auch hierzu Bild 15). Bei einem kritischen Wert:  $g^{*2}b^{*2} = 2.4624$  und  $r^* \sim 1.2$  halten sich die anziehenden Kräfte aus dem Lennard Jones Potential und die abstoßenden Kräfte aus dem Zentrifugalpotential die Waage. Ober- und unterhalb dieser Distanz herrschen die abstoßenden Kräfte vor. Bei Werten  $g^{*2}b^{*2} = 1$  herrschen anziehende Kräfte zwischen  $1.6 \geq r^* \geq 1.2$  außerhalb dieser Distanz existieren nur abstoßende Kräfte. Bei sehr kleinen Zentrifugalpotentialen ( $g^{*2}b^{*2} = 0.008$ ) wird das effektive Potential vom Lennard Jones Potential beherrscht. Oberhalb einer Schwelle  $r^* \sim 1.2$  herrschen nur noch anziehende Kräfte,

die jedoch mit zunehmendem Werten von  $r^*$  rasch gegen Null streben. Wenn wir uns das Bild 14 ansehen, so können wir die Dynamik des Stoßes verfolgen. Hat das Molekülpaar eine reduzierte kinetische Energie von weniger als 0,8, so sind mehrere Stoßvarianten möglich. Ist  $g^{*2} = 0.2$  und  $g^{*2}b^{*2} = 10$  ( $b^{*2} = 50$  also  $b \sim 7.1 * \sigma$ ) d.h. die Moleküle fliegen im weiten Abstand aneinander vorbei wobei die kinetische Energie relativ klein ist. Diese Art Stöße werden auch als verrückte Stöße bezeichnet. Die abstoßenden Kräfte sind bei diesem Stoß Typ klein (siehe Bild 16 Skizze a). Ist  $g^{*2}b^{*2} = 0.008$  ( $b^{*2} = 0.04$  also  $b = 0.2 * \sigma$ ) so spricht man von einem direkten Stoß – beide Kräfte, die abstoßenden Kräfte für kleine Abstände und die anziehenden Kräfte für größere Abstände, sind wirksam (siehe Bild 16 Skizze b). Diese Kollision wird vom Lennard Jones Potential beherrscht. In einem Zwischenbereich, für  $b \sim \sigma$  und Zentrifugalenergien im Bereich der Lennard Jones Potentialdelle, fangen sich die Moleküle gegenseitig ein und beginnen um einander zu rotieren. Dieser Zustand ist nicht stabil (er wird von Stößen mit anderen Teilchen zerstört) Bild 16 Skizze c.

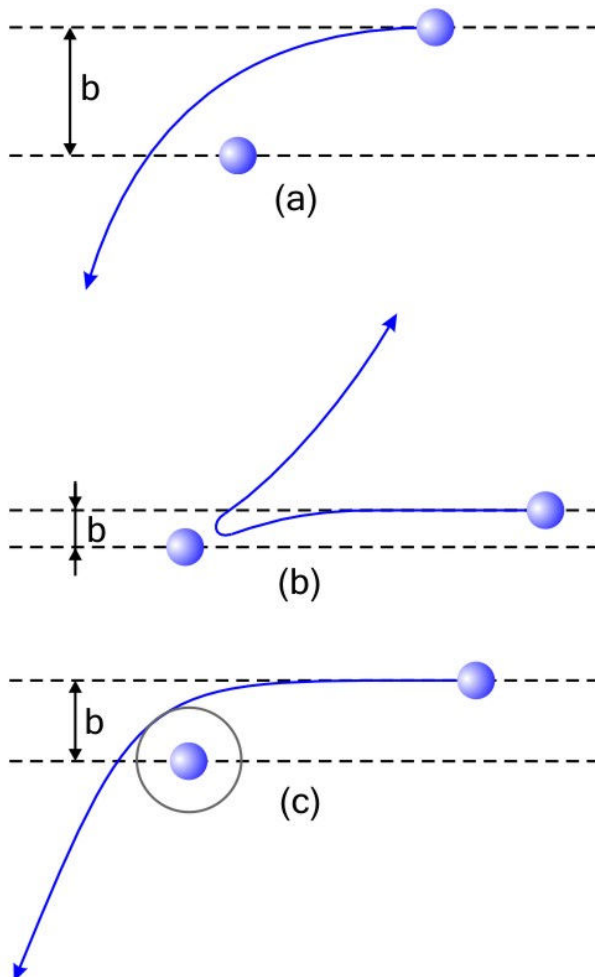


Bild 15 zeigt drei Typen von Kollisionen bei Anwesenheit eines 6-12 Lennard-Jones Potentials. (a) zeigt den „verrückten Stoß“, (b) zeigt den direkten Stoß, (c) zeigt das gegenseitige Einfangen der Moleküle.

Der Ablenkungswinkel aus Gleichung G17 wurde mit numerischen Methoden berechnet. Die Ergebnisse sind in Bild 17 dargestellt. Hier wurde  $1 - \cos\chi$  über  $b^{*2}$  für vier verschiedene reduzierte kinetische Energien ( $g^{*2} = 0.4, 0.8, 1, \text{und } 10$ ) erfasst. Die Flächen unter den Kurven ergeben den Stoßquerschnitt  $Q^{(1)*}$ . Für kleine kinetische Energien  $g^{*2} (g^{*2} \leq 0.8)$  zeigen die Kurven rasche Winkelwechsel – d.h. es existiert ein  $b^{*2} = b_0^{*2}$  bei dem anziehende (aus dem Lennard Jones Potential) und abstoßende Kräfte (aus dem Zentrifugalpotential) gleich sind - die Moleküle rotieren um einen gemeinsamen Schwerpunkt siehe Bild 17 (die beiden oberen Diagramme). Für  $g^{*2} > 0.8$  sind die Zentrifugalkräfte immer größer als die anziehenden Kräfte aus dem Lennard Jones Potential, die Rotation der Moleküle um ihren gemeinsamen Schwerpunkt ist nicht mehr möglich (siehe in Bild 17 die beiden untere Diagramme).

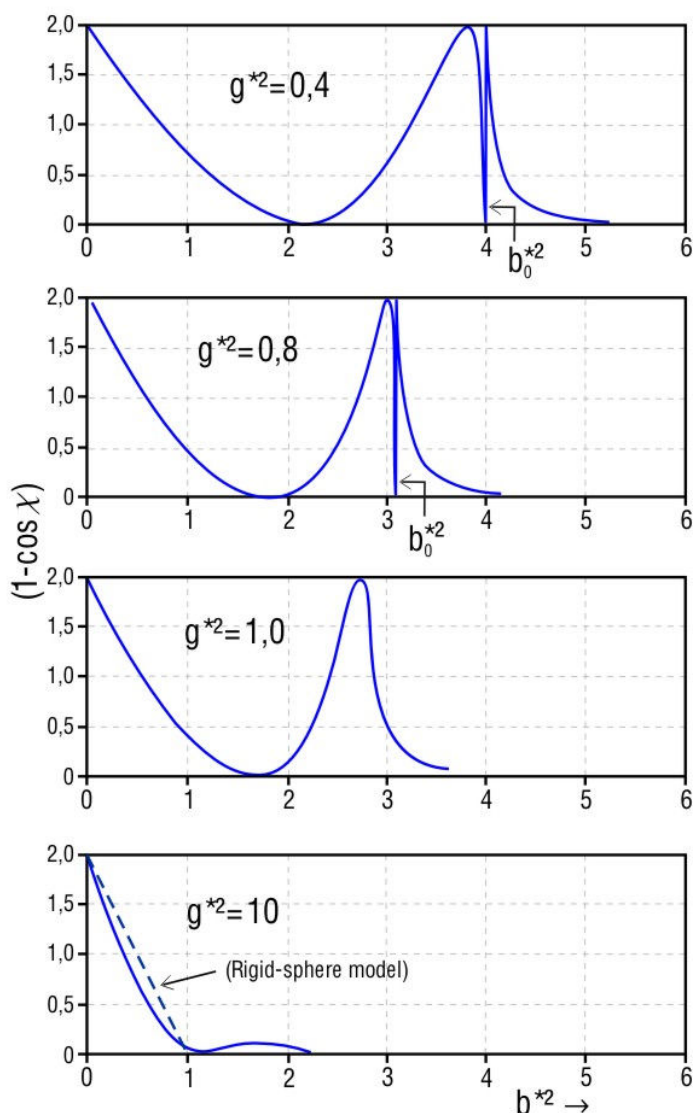


Bild 16 zeigt den Ablenkungswinkel für ein 6-12 Lennard-Jones Potential. Aufgetragen ist  $(1 - \cos\chi)$  über  $b^{*2}$  für mehrere reduzierte kinetische Energien  $g^{*2}$ . Um  $b_0^{*2}$  pendelt  $(1 - \cos\chi)$  in infinitesimalen Zeiten zwischen 0 und 2 d.h. die Stoßpartner rotieren umeinander. Die Fläche unter den Kurven gibt den Stoßquerschnitt an.

Ist  $g^{*2} = 1.0$  so ist bei  $b^* = 1.668$  die Ablenkung ca.  $182^\circ$ , größere Ablenkungswinkel sind nicht mehr möglich. Es sei an dieser Stelle darauf hin gewiesen, dass beim zentralen Stoß ( $b^* = 1$ ), die Ablenkung – so wie wir es erwarten –  $180^\circ$  ist. In dem Fall ist auch die kleinste Distanz der Moleküle  $r_m^* = 0.961$  und hiermit kleiner als der Moleküldurchmesser.

Ist  $g^{*2} = 10$  so ist bei Stoßabständen die größer als der Moleküldurchmesser sind, kaum noch eine Ablenkung zu erwarten (siehe Bild 17 unteres Diagramm). Die Dynamik des Stoßes wird nur noch von dem abstoßenden Teil des Lennard Jones Potentials sowie vom Zentrifugalpotential bestimmt. Auch dringen die Moleküle auf Grund ihrer hohen kinetischen Energie sehr viel stärker ineinander ein  $r_{m\ min}^* = 0.8797$  (beim zentralen Stoß). Mit anderen Worten: mit zunehmender Energie (Temperatur) spüren die Stoßpartner die Tiefe der Lennard Jones Potentialdelle immer weniger.

Wie aus Gleichung G28 zu ersehen, ist die Fläche in Bild 17 unter den Ablenkungskurven gleich dem Stoßquerschnitt  $Q^{(l)*}$ . Man erkennt sofort: für kleine Geschwindigkeiten  $g^{*2}$  (niedrige Temperaturen) ist der Stoßquerschnitt bei Molekülen mit Lennard Jones Potential größer als mit rigid sphere Potential (starre Kugeln siehe gestrichelte Linie in Bild 17 unten). Für große Geschwindigkeiten (hohe Temperaturen) ist der Stoßquerschnitt mit Lennard Jones Potential kleiner als der Stoßquerschnitt des Starrkugelpotentials (siehe Bild 17 unten), da die Moleküle – abhängig von der kinetischen Energie – verschieden stark ineinander eindringen können. Damit ist qualitativ gezeigt, wie die Temperaturabhängigkeit der drei Transportkoeffizienten bei einem realistischen Potential abhängig ist. Unten stehende Tabelle zeigt am Beispiel des Viskositätskoeffizienten für drei verschiedene Temperaturen (am Beispiel  $N_2$ ):

- a) auf Basis der einfachen kinetischen Theorie ermittelten Viskositätskoeffizienten
- b) auf Basis der Chapman Enskog Theorie ermittelten Viskositätskoeffizienten
- c) dem gemessenen Viskositätskoeffizienten

Mol-Gewicht M	Stoßquer $\sigma$	Temp T	Freie Weglänge $l_f$	Reziproke Stoßzeit $\Gamma$	Stoß Geschwindig- keit $\Omega$	Viskositäts- koeffizient $\eta$	Viskositäts- koeffizient $\eta$	Viskositäts- koeffizient $\eta$
g/mol	$\text{\AA}$ $10^{-10}m$	K	$\text{\AA}$ $10^{-10}m$	$10^{-9}/s$	$10^4\text{cm/s}$	$\frac{10^{-7}g}{\text{cm s}}$	$\frac{10^{-7}g}{\text{cm s}}$	$\frac{10^{-7}g}{\text{cm s}}$
						kalkuliert: einfache kinetische Theorie	kalkuliert: Chapmann Enskog Theorie	gemessen
28.02	3.75	100	218	12.61	2.75	1005	687	698
		300	654	7.28	4.76	1740	1785	1786
		500	1090	5.64	6.15	2247	2570	2657

Man erkennt, dass die Unterschiede bei niedrigen Temperaturen, zwischen der einfachen Theorie und der Chapman Enskog Theorie, am größten ausfallen. Es sei auch an dieser Stelle nochmals vermerkt, dass dies auf den erheblich größeren Stoßquerschnittes (folgend aus den anziehenden Kräften – in der Potentialdelle – des Lennard Jones Potentials) resultiert. Bei hohen Temperaturen fallen die Unterschiede geringer aus. Die einfache Theorie welche als Potentialmodell das Rigid Sphere Modell (Starrkugelmodell) hat, liegt hier näher an der Chapman Enskog Theorie mit dem Lennard Jones Potential. In der einfachen Theorie bleibt der Stoßquerschnitt immer konstant (die Moleküle können nicht ineinander eindringen und bei  $b^{*2} > 1$  erfolgt keine Ablenkung, d.h. die Moleküle fliegen aneinander – ohne Bahnänderung - vorbei). In der Chapman Enskog Theorie mit dem „weicheren Molekül“ können, beim zentralen Stoß und bei hohen Energien (Temperaturen) die Moleküle ein wenig ineinander eindringen ( $g^{*2} = 10$  (siehe oben)  $\implies r_m = 0.88$ ). Die Abweichungen der Transportkoeffizienten aus der Chapman Enskog Theorie von den gemessenen Werten, rühren vom asymmetrischen Aufbau beim realen Potential – zum zentralsymmetrischen Lennard Jones Potential – her (das Lennard Jones Potential ist ein empirisches Potential, das aus den Messwerten angenommen wurde). Die Abweichungen sind klein und rühren keinesfalls aus einer fehlerhaften Theorie, vielmehr ist die wahre Natur der Moleküle komplexer als das Lennard Jones Potential suggeriert.

Berechnet man die Diffusionskonstante  $\mathcal{D}$ , die Viskositätskonstante  $\eta$  und die Wärmeleitungs-konstante  $\lambda$  nach der Chapman – Enskog – Theorie, so ergeben sich folgende Gleichungen:

$$\mathcal{D}_1 = 0.002628 \frac{\sqrt{T^3/M}}{p\sigma^2\Omega^{(1,1)*}(T^*)} \left[ \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \right] \quad G32$$

Für ein reines Gas. Mit  $\mathcal{D}$  dem Diffusionskoeffizienten, P dem Druck [bar], T Temperatur [K],  $T^*$  reduzierte Temperatur  $= k \frac{T}{\epsilon}$  [1], M dem Molekulargewicht [g/Mol],  $\sigma$  Kollisionsparameter [ $\text{Å}$ ]. Bzw. für ein binäres Gas:

$$\mathcal{D}_{1,2} = 0.002628 \frac{\sqrt{T^3(M_1+M_2)/2M_1M_2}}{p\sigma_{12}^{(1,1)*}\Omega_{12}^{(1,1)*}(T_{12}^*)} \left[ \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \right] \quad G33$$

mit  $M_1, M_2$  die Molekulargewichte der Spezies 1 bzw. 2 [g/Mol]

$$\eta_1 = 266.93 * 10^{-7} \frac{\sqrt{MT}}{\sigma^2 \Omega^{(2,2)*}(T^*)} \left[ \frac{\text{g}}{\text{cm s}} \right] \quad G34$$

Die Viskosität eines reinen Gases

$$\eta_{12} = 266.93 * 10^{-7} \frac{\sqrt{2M_1M_2T/(M_1+M_2)}}{\sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(2,2)*}(T_{12}^*)} \left[ \frac{\text{g}}{\text{cm s}} \right] \quad G35$$

Die Viskosität eines binären Gases

$$\lambda_1 = 1989.1 * 10^{-7} \frac{\sqrt{T/M}}{\sigma^2 \Omega^{(2,2)*}(T^*)} \left[ \frac{\text{cal}}{\text{cm s K}} \right] \quad G36$$

Die Wärmeleitungs-konstante eines reinen einatomigen Gases. Oder mit der Viskositäts-konstante eines reinen einatomigen Gases:

$$\lambda_1 = \frac{15}{4} \frac{R}{M} \eta_1 \left[ \frac{\text{cal}}{\text{cm s K}} \right] \quad G37$$

Für ein mehratomiges reines Gas:

$$\lambda_1^{Eucken} = \frac{15}{4} \frac{R}{M} \eta_1 \left( \frac{4}{15} \frac{C_v}{R} + \frac{3}{5} \right) \left[ \frac{\text{cal}}{\text{cm s K}} \right] \quad G38$$

Siehe Kapitel F

Und für ein binäres mehratomiges Gas:

$$\lambda_{12} = \frac{25}{32} \left( \frac{\sqrt{(M_1+M_2)\pi kT/2M_1M_2}}{\pi \sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(2,2)*}(T_{12}^*)} \right) \left( \frac{3}{2} k \right) \left[ \frac{\text{cal}}{\text{cm s K}} \right] \quad G39$$

Oder:

$$\lambda_{12} = \frac{15}{4} k \left( \frac{M_1+M_2}{2M_1M_2} \right) \eta_{12} \left[ \frac{\text{cal}}{\text{cm s K}} \right] \quad G40$$

Die Umrechnung auf S I Einheiten:  $1 \frac{\text{cal}}{\text{cm s K}} = \frac{4.18\text{J}}{\text{m}/_{100} \text{s K}} = \frac{418\text{W}}{\text{m K}}$

## Kapitel H

Newtonsche Ansatz für den gasseitigen Wärmeübergang

Es sollte ferner darauf hin gewiesen werden, dass die Gleichungen

$$\dot{q} = \alpha \Delta T \quad \text{für den spez. Wärmestrom und} \quad H1$$

$$\dot{n}_a = \beta \Delta c_A \quad \text{für die Stoffübertragung,} \quad H2$$

nicht die Gesetze der Wärme und Stoffübertragung beschreiben. Diese Gleichungen dienen lediglich der Definitionen für die  $\alpha$  und  $\beta$  Zahlen. In den  $\alpha$  und  $\beta$  Zahlen sind die jeweiligen Größen und Abhängigkeiten (häufig) summarisch enthalten (siehe Bild 2) und stellen damit einen naturgesetzlichen Zusammenhang her.

## Kapitel I

### Ausblick:

Man kann aus den Versuchen zum adiabaten Brennraum folgenden Schluss ziehen, wenn die Bedingungen stimmen, isoliert sich der Brennraum weitestgehend selbst. Die Bedingung hierfür ist in erster Linie eine kalte Brennraumwand. Erläuterung: kalte Temperaturen bedeuten immer eine verlangsamte Teilchenbewegung – in der klassischen Theorie, hört die Teilchenbewegung am absoluten Nullpunkt auf – wenn die Bewegung aber zur Ruhe kommt, kommt auch der Energietransport (Wärmetransport) zur Ruhe (gilt nur für den Wärmetransport als Folge von Kollisionen also die Wärmeleitung. Wärmetransport durch Strahlung ist davon nicht betroffen). Eine solche Isolation ist jedoch nicht möglich, da sich bei tiefen Temperaturen der Aggregatzustand ändert und mithin andere Gesetze des Wärme und Stofftransportes gelten.

Jede Isolierung muss diesem Umstand Rechnung tragen. Wenn durch Auftragen jeglicher Isolierstoffe die Wandtemperatur zu nimmt, nimmt die Stärke der Temperaturschicht ab und in der überwiegenden Mehrzahl der Fälle erhöht sich der Wärmetransport.

Aus den Versuchen zum wärmedichten Brennraum (Isolierung der Brennraumwände mit Keramik oder Nimonicplatte auf dem Kolben) kann man schließen wie Energien übertragen werden. Wenn man versteht, warum diese Versuche fehlgeschlagen sind (der Gesamtwirkungsgrad hat sich entgegen den Vorhersagen verschlechtert, mithin ist der Wärmeübergang – trotz Isolierung - angewachsen) ist es möglich, künftig diese Fehler zu vermeiden.

Es mag obskur erscheinen, dass sich die Wärmeströme durch die Brennraumwände bei einer zusätzlichen Isolation erhöhen, allein eine einfache DGL wie sie im Kapitel A abgeleitet wurde:

$$0 = \frac{\partial \lambda}{\partial T} \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

mit der der bekannten Lösung: dem Fourier'schen Wärmeleitungsgesetz:

$$\dot{q} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}$$

bzw. als Differenzenquotient:  $\dot{q} = -\lambda \frac{\Delta T}{\Delta x}$

kann diesen scheinbaren Widerspruch aufheben. Wir lösen diese Aufgabe, indem wir den umgekehrten Fall, einer kalten Brennraumwand diskutieren. Eine kältere Brennraumwand bedeutet zwar eine größere Temperaturdifferenz und es sollte sich auch damit der Wärmestrom erhöhen, dem steht aber der sehr viel stärkere Abfall des Wärmeleitkoeffizienten  $\lambda$  gegenüber, sodass das Produkt aus  $\lambda * \Delta T$  mit sinkender Temperatur immer kleiner wird.

Beim Umgang mit dem Fourier'schen Wärmeleitungsgesetz ist jedoch Vorsicht geboten, da die Verhältnisse auf der Temperaturgrenzschicht sehr viel komplexer sind als das einfache Wärmeleitungsgesetz suggeriert. Diese Betrachtung ist in Kapitel D dargestellt.

Der Autor hat aus den oben dargestellten Überlegungen ein Konzept für einen teiladiabaten Brennraum in Entwicklung.

## Kapitel J

### Anhang über Grenzschichtdicke

Mit:

$$\dot{q} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \left[ \frac{W}{m^2} \right] \quad J1$$

→

$$\partial x = -\frac{\lambda}{\dot{q}} \partial T \quad [m] \quad J2$$

→

$$x = -\frac{1}{\dot{q}} \int_{T_1}^{T_2} \lambda(T) dT \quad J3$$

Mit  $\lambda(T) = \frac{3.17}{10000} T^{0.772}$  (empirischer Ansatz nach Pflaum / Mollenhauer) → J4

$$x = -\frac{C}{\dot{q}} \int_{T_1}^{T_2} T^{0.772} dT \quad J5$$

→

$$x = -\frac{C}{\dot{q}} \left[ \frac{T^{1.772}}{1.772} \right]_{T_1}^{T_2} \quad J6$$

→

$$x(T) = -\frac{C}{1.772\dot{q}} (T_2^{1.772} - T_1^{1.772}) \quad J7$$

Mit Daten aus Pflaum / Mollenhauer:  $\dot{q} = 4 * 10^6 \left[ \frac{W}{m^2} \right]$  und

$\lambda = 3.17/10^4 T^{0.772} \left[ \frac{W}{mK} \right]$  und  $T_2 = 2273 K$  und  $T_1 = 453K$  →

$C = 3.17/10^4 \frac{W}{mK}$  in Gleichung J7 eingesetzt → Grenzschichtdicke ca. 0.037mm

## Kapitel K

### Abschätzung über gaskinetische Parameter:

#### Teilchendichte:

mit dem allgemeinen Gasgesetz:

$$P = n K T \left[ \frac{1}{m^3} \frac{J}{K} K \right] = \left[ \frac{N}{m^2} \right] \text{ Gasdruck} \quad K1$$

→

$$n = \frac{P}{K T} \left[ \frac{1}{m^3} \right] \text{ Teilchendichte} \quad K2$$

Teilchendichte bei Normalbedingungen: 1 bar und 20°C

$$n_{1,20} = \frac{10^5}{1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 293} \left[ \frac{N/m^2}{\frac{J}{K} K} \right] = 2.5 \cdot 10^{25} \left[ \frac{1}{m^3} \right] \quad K3$$

Teilchendichte bei max. Druck und max. Temp. (80bar und 2273K)

$$n_{80,2000} = \frac{80 \cdot 10^5}{1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 2273} \left[ \frac{N/m^2}{\frac{J}{K} K} \right] = 2.3 \cdot 10^{26} \left[ \frac{1}{m^3} \right] \quad K4$$

#### Mittlere freie Weglänge:

Mit:

$$l_f = \frac{1}{\sqrt{2} \sigma^2 \pi n} \left[ \frac{1}{m^2} \frac{m^3}{1} \right] = [m] \text{ mittlere freie Weglänge} \quad K5$$

Mit:  $\sigma$  (Moleküldurchmesser) = 3.75(Å) = 3.75 · 10<sup>-10</sup> m (Stoßparameter für Stickstoff)

und  $n_{1,20} = 2.5 \cdot 10^{25} \text{ Teilchen}/m^3$  sowie  $n_{80,2000} = 2.3 \cdot 10^{26} \text{ Teilchen}/m^3$  →

$l_f = 6.4 \cdot 10^{-8} \text{ m}$  bei Umgebungsbedingungen (1 bar und 20°C)

$l_f = 7.0 \cdot 10^{-9} \text{ m}$  bei 80 bar und 2000°C

## Literaturverzeichnis

“Molekulare Gasdynamik“

(D. Hänel)

Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2004

“Molecular Theorie of Gases and Liquids“

(Joseph O. Hirschfelder, Charles F. Curtiss, R. Byron Bird)

John Wiley & Sons New York, Chichester, Brisbane, Toronto 1964

“Introduction to Physical Gas Dynamics“

(Walter G. Vincenti, Charls H. Kruger, Jr. Krieger)

Publishing Company Malabar, Florida 2002

“Wärme und Stoffübertragung“

(H.D. Baehr, K.Stephan)

Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 1994 und 1996