

Μελέτη ατμοσφαιρικών νανοσωματιδίων με τη μέθοδο προσομοίωσης της μοριακής δυναμικής

Κατερίνα Σ. Καραδήμα,^{1,2} Βλάσης Γ. Μαυραντζάς,^{1,2,3} Σπύρος Ν. Πανδής^{1,2}

¹Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών, Καραθεοδωρή 1, Πανεπιστημιούπολη, 26504 Ρίο, Πάτρα

²Ινστιτούτο Επιστημών Χημικής Μηχανικής, Ίδρυμα Τεχνολογίας & Έρευνας, Σταδίου, 26504 Πλατάνι, Πάτρα

³Particle Technology Laboratory, Department of Mechanical and Process Engineering, ETH-Z, CH-8092 Zurich, Switzerland

Λέξεις-κλειδιά: ατμοσφαιρικά νανοσωματίδια, μοριακή δυναμική, οργανικό αεροζόλ

Περίληψη

Παρά τη σημαντική πρόοδο που έχει σημειωθεί τα τελευταία χρόνια με τη βοήθεια εργαστηριακών πειραμάτων, μετρήσεων πεδίου και των προβλέψεων θεωρητικών μοντέλων, ο ρόλος της οργανικής ύλης στα αιωρούμενα ατμοσφαιρικά σωματίδια στην κλιματική και παγκόσμια αλλαγή παραμένει υπό διερεύνηση. Ο τεράστιος αριθμός των οργανικών ενώσεων που εμφανίζονται στα αεροζόλ (συνήθως αναμειγμένων με ανόργανους ηλεκτρολύτες όπως θειικό, νιτρικό ή χλωριούχο άλας) και ο μεγάλος αριθμός των αβεβαιοτήτων που σχετίζονται με τις πηγές (ανθρωπογενείς ή βιογενείς, πρωταρχικές ή δευτερεύουσες) και τις μεταλλάξεις τους (συμμετοχή σε αλυσιδωτές αντιδράσεις) όπως και με τη σύνθεση, τις ιδιότητες και τις αλληλεπιδράσεις τους με τους υδρατμούς και την ακτινοβολία καταστούν την ποσοτική τους μελέτη ιδιαίτερα δύσκολη και προκλητική. Τα αεροζόλ αυτά αποτελούνται από σωματίδια διεσπαρμένα στον αέρα (σε υγρή ή στερεή φάση) και διαδραματίζουν ρόλο-κλειδί στη ζωή μας, διότι εμπλέκονται σε πολλές περιβαλλοντικές διεργασίες [1]: επιδρούν στην ισορροπία της ακτινοβολίας της γήινης ατμόσφαιρας, επηρεάζουν το σχηματισμό των σύννεφων (μπορούν να λειτουργήσουν ως πυρήνες συμπύκνωσης σύννεφων, ΠΣΣ/CCN), συνεισφέρουν στο σχηματισμό νέων σωματιδίων μέσω της πυρηνογένεσης, επιδρούν στο επιμερισμό των ημιπτητικών ενώσεων στην αέρια και σωματιδιακή φάση και μπορούν να έχουν σημαντική επίδραση στην ανθρώπινη υγεία, καθώς η έκθεση στα σωματίδια του περιβάλλοντος σχετίζεται με βλαβερές επιπτώσεις στο αναπνευστικό και καρδιαγγειακό σύστημα.

Το οργανικό αεροζόλ (ΟΑ/ΟΑ) μελετάται εδώ και χρόνια (μέσω μετρήσεων πεδίου [2], πειραμάτων και θεωρητικών μοντέλων [3]), αλλά λόγω της πολυπλοκότητας και της δυναμικής φύσης του υπάρχουν πολλά θέματα ακόμα που θα πρέπει να κατανοηθούν. Κατά την τελευταία δεκαετία σημαντική πληροφορία σχετικά με τη δομή και τις θερμοδυναμικές ιδιότητες των σωματιδίων ΟΑ λαμβάνεται και με μεθόδους μοριακής προσομοίωσης [4], όπως η μοριακή δυναμική (ΜΔ/ΜΔ) πλήρους ατομιστικής λεπτομέρειας. Με μια τέτοια ισχυρή μέθοδο, μπορεί κανείς να αντιμετωπίσει αρκετά σημαντικά θέματα που σχετίζονται με:

- το βαθμό εσωτερικής ανάμειξης οργανικών και ανόργανων συστατικών
- τη μορφολογία και την εσωτερική δομή των σωματιδίων ΟΑ
- σημαντικές φυσικοχημικές ιδιότητες αυτών των σωματιδίων, και
- το πώς οι εξωτερικές συνθήκες και η αναμειξιμότητα εντός του οργανικού κλάσματος επηρεάζουν την κατάσταση της φάσης τους.

Σκοπός αυτής της εργασίας είναι να χρησιμοποιήσουμε προσομοιώσεις ΜΔ για να μελετήσουμε ατμοσφαιρικά νανοσωματίδια (σωματίδια ΟΑ κατά την έναρξη του κύκλου ζωής τους) με σύνθεση παρόμοια με αυτήν που αναφέρεται σε μετρήσεις πεδίου ή πειράματα. Ειδικότερα, θεωρούμε πως τα νανοσωματίδια αποτελούνται από ένα μικρό κλάσμα οργανικής μάζας, θειικό οξύ, αμμωνία και νερό. Τυπικές ενώσεις που θεωρούνται ως οργανική μάζα περιλαμβάνουν το πινονικό οξύ και αλκάνια μεγάλης αλυσίδας (δηλ. μόρια που παρατηρούνται στον ατμοσφαιρικό αέρα). Στην παρούσα εργασία αναφέρονται και συζητούνται προβλέψεις που προκύπτουν από τις προσομοιώσεις στο NPT στατιστικό σύνολο σχετικά με το μέγεθος και το σχήμα των σχηματιζόμενων νανοσωματιδίων, με τις κατανομές πυκνότητας των συστατικών ενώσεων, και με τις αντίστοιχες συναρτήσεις ακτινικής κατανομής που επιτρέπουν να εξάγουμε πληροφορίες για τον τρόπο οργάνωσης των διαφόρων ενώσεων στο νανοσωματίδιο, αλλά και τη σχετική δύναμη των αντίστοιχων διαμοριακών

αλληλεπιδράσεων. Επιπλέον, προσομοιώθηκαν νανοσωματίδια διαφορετικών μεγεθών και μελετήθηκε η επίδραση της σχετικής υγρασίας στις παραπάνω ιδιότητες. Μελετήθηκε επίσης η επίδραση της θερμοκρασίας στις ιδιότητες δομής και μεταφοράς (συντελεστής αυτοδιάχυσης D) των προσομοιωμένων νανοσωματιδίων ΟΑ για εύρος θερμοκρασιών στο οποίο τα νανοσωματίδια παραμένουν σταθερά και ποσοτικοποιήθηκε η εξάρτηση του συντελεστή D από τη θερμοκρασία και το μέγεθος του νανοσωματιδίου [5].

Αναφορές

- [1] J.H. Seinfeld, S.N. Pandis, J. Willey, 2nd edition (2006).
- [2] M. Kulmala, H. Vehkamäki, T. Petäjä, M. Dal Maso, A. Lauri, V.-M. Kerminen, W. Birmili, P.H. McMurry, *Aeros. Sc.*, 35 (2004) 147-176.
- [3] E. Athanasopoulou, H. Vogel, B. Vogel, A.P. Tsimpidi, S.N. Pandis, C. Knote, C. Fountoukis, *Atmos. Chem. Phys.*, 13 (2013), 625-645.
- [4] X. Ma, P. Chakraborty, B. Henz, M. Zachariah, *PCCP*, 13 (2011) 9374-9384.
- [5] K.S. Karadima, V.G. Mavrantzas, S.N. Pandis, manuscript in preparation for submission.