

ΠΡΟΒΛΕΠΟΝΤΑΣ ΤΗ ΜΟΡΦΟΛΟΓΙΑ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΙΚΩΝ ΝΑΝΟΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΜΕ ΤΗ ΒΟΗΘΕΙΑ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

Κ.Σ. Καραδήμα^{1,2,*}, Σ.Ν. Πανδής^{1,2,3}

¹Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα, Ελλάδα

²Ινστιτούτο Επιστημών Χημικής Μηχανικής, ΙΕΧΜΗ/ΙΤΕ, Πλατάνι Πατρών, Ελλάδα

³Department of Chemical Engineering, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA

([*kkaradima@chemeng.upatras.gr](mailto:kkaradima@chemeng.upatras.gr))

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η σύνθεση των ατμοσφαιρικών σωματιδίων μεταβάλλεται χωρικά και χρονικά και συνήθως περιλαμβάνει τόσο ανόργανα (συμπεριλαμβανομένου του νερού) όσο και οργανικά συστατικά^[1]. Το μεγάλο πλήθος των οργανικών ενώσεων που συμμετέχουν στις ατμοσφαιρικές διεργασίες όπως και το εύρος των ιδιοτήτων από τις οποίες αυτές χαρακτηρίζονται δυσχεραίνουν τη μελέτη και την κατανόηση του ρόλου του οργανικού αεροζόλ στο περιβάλλον, το κλίμα αλλά και την ανθρώπινη υγεία. Η γνώση της μορφολογίας και της τοπικής δομής των ατμοσφαιρικών σωματιδίων συμβάλλει σημαντικά στον καθορισμό των φυσικοχημικών ιδιοτήτων του αεροζόλ. Επιπλέον, βοηθά στη μελέτη του μηχανισμού συμμετοχής του σε ετερογενείς αντιδράσεις με την αέρια φάση, του τρόπου μεταφοράς μάζας/συστατικών από και προς την αέρια φάση, στην εκτίμηση του χρόνου ζωής του κ.α. Η εξέταση της μικροδομής των ατμοσφαιρικών σωματιδίων διαμέτρου μερικών νανομέτρων δεν είναι εν γένει εφικτή με τη χρήση τυπικών πειραματικών διατάξεων. Η μέθοδος προσομοίωσης μοριακής δυναμικής (ΜΔ) μπορεί ωστόσο να παρέχει σημαντική πληροφορία για σωματίδια τέτοιου μεγέθους.

Στην παρούσα εργασία, με τη βοήθεια της ΜΔ, μελετάμε νανοσωματίδια ποικίλης σύστασης (τόσο σε οργανικά όσο και σε ανόργανα συστατικά) υπό ατμοσφαιρικές συνθήκες. Ειδικότερα, διερευνάται η επίδραση της σύστασης στη μορφολογία των νανοσωματιδίων, στην τοπική κατανομή των επιμέρους συστατικών εντός του σωματιδίου, αλλά και στις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των συστατικών^[2-3]. Τα εξεταζόμενα σωματίδια καλύπτουν ένα σημαντικό εύρος ποσοστών υγρασίας, περιέχουν ανόργανη και οργανική μάζα σε διάφορα κλάσματα, όπως και διαφορετικές οργανικές ενώσεις. Επιπρόσθετα, τα οργανικά συστατικά διακρίνονται για τις διαφορετικές ιδιότητές τους και συναντώνται σε πρωτογενές (π.χ., γραμμικά αλκάνια) ή δευτερογενές οργανικό αεροζόλ, όπου ως συστατικά του δευτερογενούς οργανικού αεροζόλ συμπεριλαμβάνονται προϊόντα πρωτογενούς αλλά και δευτερογενούς οξειδωσης (π.χ., *cis*-πινονικό οξύ ή CPA αλλά και 3-μεθύλο-1,2,3-βουτανοτριοκαρβοξυλικό οξύ ή MBTCA). Οι επιμέρους οργανικές ενώσεις προέρχονται επίσης τόσο από βιογενείς όσο και από ανθρωπογενείς πηγές και χρησιμοποιούνται μεμονωμένα ή σε μίγματα.

Στην πλειοψηφία των σωματιδίων που εξετάστηκαν διαπιστώνεται διαχωρισμός φάσης είτε μεταξύ ανόργανης και οργανικής μάζας, είτε μεταξύ υδρόφιλων και υδρόφοβων συστατικών, είτε ακόμη –υπό ορισμένες συνθήκες– και μεταξύ των δευτερογενών προϊόντων οξειδωσης (CPA και MBTCA)^[3]. Αναλυτικότερα, στην περίπτωση των οξειδωμένων οργανικών ενώσεων, το οργανικό κλάσμα μάζας συγκεντρώνεται κυρίως κοντά στην επιφάνεια του σωματιδίου και σχηματίζει εκεί μικρές συστάδες, οι οποίες αυξάνονται σε μέγεθος καθώς αυξάνεται το οργανικό κλάσμα μάζας. Αντίστοιχα σωματίδια με αυξημένα ποσοστά υγρασίας παρουσιάζουν δομή πυρήνα-κελύφους, με τα ιόντα να απαντώνται στο εσωτερικό του σωματιδίου και να διαχωρίζονται εν τέλει από τα οργανικά. Στα σωματίδια που περιέχονται κανονικά αλκάνια παρατηρείται διαχωρισμός μεταξύ των υδρόφοβων και υδρόφιλων συστατικών^[2-3]. Τα αλκάνια σχηματίζουν μια ξεχωριστή, καλά οργανωμένη φάση, και στην περίπτωση παρουσίας και μη υδρόφοβου οργανικού συστατικού αυτό εντοπίζεται μεταξύ της υδρόφοβης και υδρόφιλης φάσης.

Στην εργασία μας θα παρουσιάσουμε αναλυτικά τα παραπάνω ευρήματα και θα αναλύσουμε τη σύνδεσή τους με μελέτες που εξετάζουν το ρόλο των σωματιδίων σε φυσικοχημικές διεργασίες στην ατμόσφαιρα.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Calvo AI, Alves C, Castro A, Pont V, Vicente AM, Fraile R. (2013). *Atmos. Res.*, 120–121: 1–28.
- [2] Karadima KS, Mavrantzas VG, Pandis SN. (2017). *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19: 16681–16692.
- [3] Karadima KS, Mavrantzas VG, Pandis SN. (2019). *Atmos. Chem. Phys.*, under review.