

МОДЕЛИРОВАНИЕ СКОРОСТЕЙ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ, НУКЛЕИРУЮЩИХ В АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ

Назаренко Е.С., Надыкто А.Б.

Московский Государственный Технологический университет «Станкин» 127055
Россия, г. Москва, Вадковский пер., д. 3а, (499)972-95-20, e-mail: soralumina@gmail.com

В данной работе проведен численный эксперимент по определению термодинамических характеристик и скоростей нуклеации вторичных аэрозольных частиц в трехкомпонентных газовых смесях. Для определения термодинамических свойств нуклеирующих кластеров [1] была проведена серия вычислительных экспериментов по определению энтальпий, энтропий и свободных энергий Гиббса для реакций, связанных с формированием кластеров, состоящих из ДМА (органической производной аммиака, обладающей крайне высоким сродством к H_2SO_4), серной кислоты и воды. Показано, что стабильность H_2SO_4 – ДМА – H_2O – кластеров значительно превышает стабильность трехкомпонентных кластеров, содержащих также аммиак.

Показано, что малые кластеры, состоящие из серной кислоты и аминов сильно гидратированы. Однако степень гидратации уменьшается по мере роста кластера. Скорости нуклеации, полученные на основе термодинамических данных, рассчитанных с применением функционала плотности PW91PW91/6-311++G(3df, 3pd), прекрасно согласуются с данными эксперимента CLOUD, проводимого в CERN [2].

Результаты показывают, что применение квантовохимических методов к задачам формирования наноразмерных частиц позволяет с высокой точностью описать процессы нуклеации в сложных многокомпонентных системах, где применение классического формализма Кельвина-Томсона невозможно в связи с непригодностью приближения сплошной среды для описания межмолекулярных взаимодействий на микро- и наноуровнях.

Литература.

1. A.B. Nadykto, J. Herb, F. Yu, Y. Xu, Enhancement in the production of nucleating clusters due to dimethylamine and large uncertainties in the thermochemistry of amine-enhanced nucleation // Chem. Phys. Lett. In press. doi:10.1016/j.cplett.2014.03.036.
2. J. Almeida et al., Molecular understanding of sulphuric acid–amine particle nucleation in the atmosphere// Nature 502 (7471), 2013, 359 – 363. doi:10.1038/nature12663.