

ΔΙΑΧΥΤΟΤΗΤΑ ΚΑΙ ΙΞΩΔΕΣ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΣΥΣΤΑΤΙΚΩΝ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΙΚΩΝ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΜΕΣΩ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

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

¹Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα, Ελλάδα

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

³Department of Mechanical and Process Engineering, ETH Zürich, Zurich, Switzerland

(*kkaradima@chemenq.upatras.gr)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Ανάλογα με τη σύνθεσή τους και τις συνθήκες θερμοκρασίας και σχετικής υγρασίας (RH), τα οργανικά αερολύματα (ΟΑ)^[1] μπορούν να βρίσκονται στην υγρή, στην άμορφη ημιστερεά ή στην υαλώδη κατάσταση^[2-3]. Στην ημι-στερεά ή υαλώδη φάση, η μοριακή κινητικότητα είναι σχετικά αργή, έτσι ο χρόνος που απαιτείται για τη μεταφορά μάζας εντός των ΟΑ αυξάνεται δραματικά, ειδικότερα στις χαμηλές θερμοκρασίες. Λόγω τεχνικών δυσκολιών, η μέτρηση των συντελεστών διάχυσης εντός των ΟΑ γίνεται έμμεσα, μέσω μέτρησης του ιξώδους και εφαρμογής της εξίσωσης Stokes-Einstein^[3], παρόλο που η ισχύς της συγκεκριμένης εξίσωσης είναι περιορισμένη.

Η μοριακή δυναμική (ΜΔ) αποτελεί μια πολλά υποσχόμενη εναλλακτική υπολογιστική μέθοδο για την πρόβλεψη της διαχυτότητας και του ιξώδους, με ακρίβεια, ξεκινώντας από τη μοριακή δομή. Ακόμα πιο σημαντικό είναι το γεγονός πως μέσω της ΜΔ η διαχυτότητα και το ιξώδες εκτιμούνται ανεξάρτητα, ενώ είναι δυνατή και η άντληση πληροφοριών σχετικά με την επίδραση λεπτομερειών της μοριακής δομής^[4-6] στις τιμές των δύο αυτών ιδιοτήτων.

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιούμε προσομοιώσεις ΜΔ εντός και εκτός ισορροπίας για την άμεση εκτίμηση της διαχυτικότητας και του ιξώδους ενός μεγάλου φάσματος οργανικών συστατικών των ΟΑ σε θερμοκρασία περιβάλλοντος. Εστιάζουμε σε οργανικά μόρια με διαφορετική χημική πολυπλοκότητα ως προς το μήκος της αλυσίδας, τις χαρακτηριστικές οργανικές ομάδες που περιέχουν και τη μοριακή αρχιτεκτονική τους (π.χ., γραμμική, διακλαδωμένα, κυκλική). Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων συγκρίνονται αρχικά με διαθέσιμα βιβλιογραφικά δεδομένα^[7], ενώ στόχος είναι η κατανόηση της επίδρασης των παραπάνω χαρακτηριστικών των οργανικών μορίων στις ιδιότητες μεταφοράς τους.

Για τα γραμμικά οργανικά μόρια, τόσο η αύξηση της μοριακής αλυσίδας όσο και η παρουσία οργανικών ομάδων που περιέχουν οξυγόνο μειώνουν τη διαχυτότητα του μορίου και αυξάνουν το ιξώδες του συστήματος σχεδόν γραμμικά. Η διαφορά της επίδρασης της αλκοολομάδας έναντι της καρβοξυλομάδας είναι σημαντικότερη για τα μικρότερα μόρια. Για τα μη γραμμικά μόρια, όλες οι αλληλεπιδράσεις σχετίζονται με το βαθμό της μη γραμμικότητας του μορίου. Εν γένει, η μη γραμμικότητα περιορίζει τη διαχυτική ικανότητα του μορίου και αυξάνει το ιξώδες συγκριτικά με το αντίστοιχο γραμμικό μόριο.

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: Διαχυτότητα, Ιξώδες, Οργανικό αεροζόλ, Μοριακή Δυναμική, Ατμοσφαιρικά σωματίδια

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Seinfeld JH, Pandis SN. (2006). *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*, 2nd ed., John Wiley & Sons.
- [2] Virtanen A, Joutsensaari J, Koop T, Kannosto J, Yli-Pirilä P, Leskinen J, Mäkelä JM, Holopainen JK, Pöschl U, Kulmala M, Worsnop DR, Laaksonen A. (2010). *Nature*, 467, 824–827.

- [3] Koop T, Bookhold J, Shiraiwa M, Pöschl U. (2011). *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 13, 19238–19255.
- [4] Karadima KS, Mavrantzas VG, Pandis SN. (2017). *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19, 16681–16692.
- [5] Karadima KS, Mavrantzas VG, Pandis SN. (2019). *Atmos. Chem. Phys.*, 19, 5571–5587.
- [6] Mermigkis PG, Karadima KS, Pandis SN, Mavrantzas VG. (2023). *ACS Omega*, 8, 33481–33492.
- [7] Rothfuss NE, Petters MD. (2017). *Environ. Sci. Technol.*, 51, 271–279.