



请输入关键字

## 科研动态

首页 (<http://www.ieecas.cn/>) 新闻动态 (././) 科研动态 (./)

### 地球环境研究所对二次有机气溶胶形成机制研究取得进展

发布时间: 2022-11-18

二次有机气溶胶 (SOA) 对我国典型城市重霾期间PM<sub>2.5</sub>质量浓度贡献显著。挥发性有机物 (VOCs) 是形成SOA的重要前体物之一。氢过氧化酯作为VOCs大气光化学反应的重要中间体, 对SOA的形成具有重要作用。因此, 探究氢过氧化酯聚合形成低聚物的反应机制, 对大气污染防治具有重要的理论和现实意义。

近期, 中国科学院地球环境研究所黄宇团队采用量子化学计算方法, 详细讨论四种氢过氧化酯 (HC(O)OCH<sub>2</sub>OOH, anti-/syn-HC(O)OCH<sub>3</sub>CHOOH 和HC(O)O(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>COOH) 与Criegee中间体聚合形成低聚物的反应机理与动力学性质, 发现: (1) Criegee中间体在与氢过氧化酯的聚合反应中, 能够作为重复单元, 发生连续加成反应 (图1); (2) Criegee中间体与氢过氧化酯的低聚反应自发进行且强放热, 放热性随甲基取代基数目的增加而显著降低 (图2); (3) 低聚物的饱和蒸气压和饱和浓度随Criegee中间体加成数目的增加而单调减少。研究结果深化了氢过氧化酯聚合形成低聚物反应机制的传统认识, 对提高模式预测的精确度、准确评估人为源排放对SOA生成的贡献具有重要意义。

该成果发表于*Atmospheric Chemistry and Physics*期刊, 陈龙副研究员为第一作者, 黄宇研究员为通讯作者。该工作得到国家自然科学基金(42175134, 41805107)、中国科学院先导项目(XDA23010300 and XDA23010000)和中科院“西部之光”(XAB2019B01)等资助

文章链接:

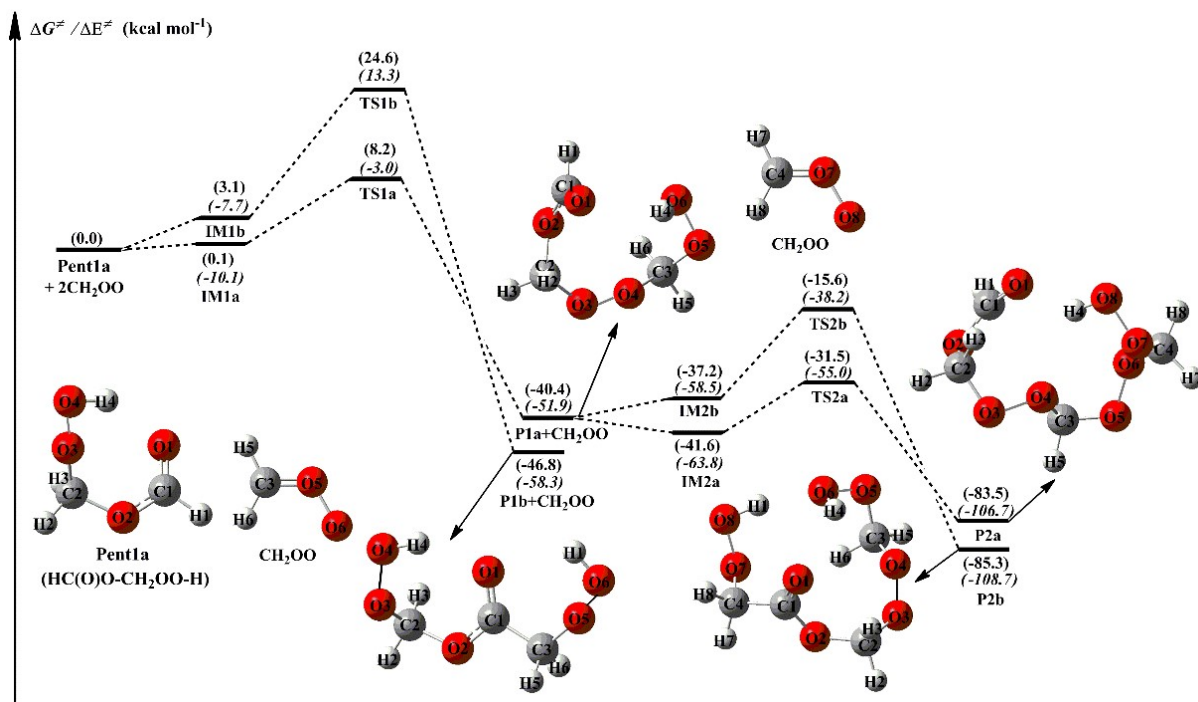


图1. 在M06-2X/ma-TZVP//M06-2X/6-311+G(2df,2p)水平上Criegee中间体CH<sub>2</sub>OO与氢过  
氧化酯HC(O)OCH<sub>2</sub>OOH聚合反应势能剖面图

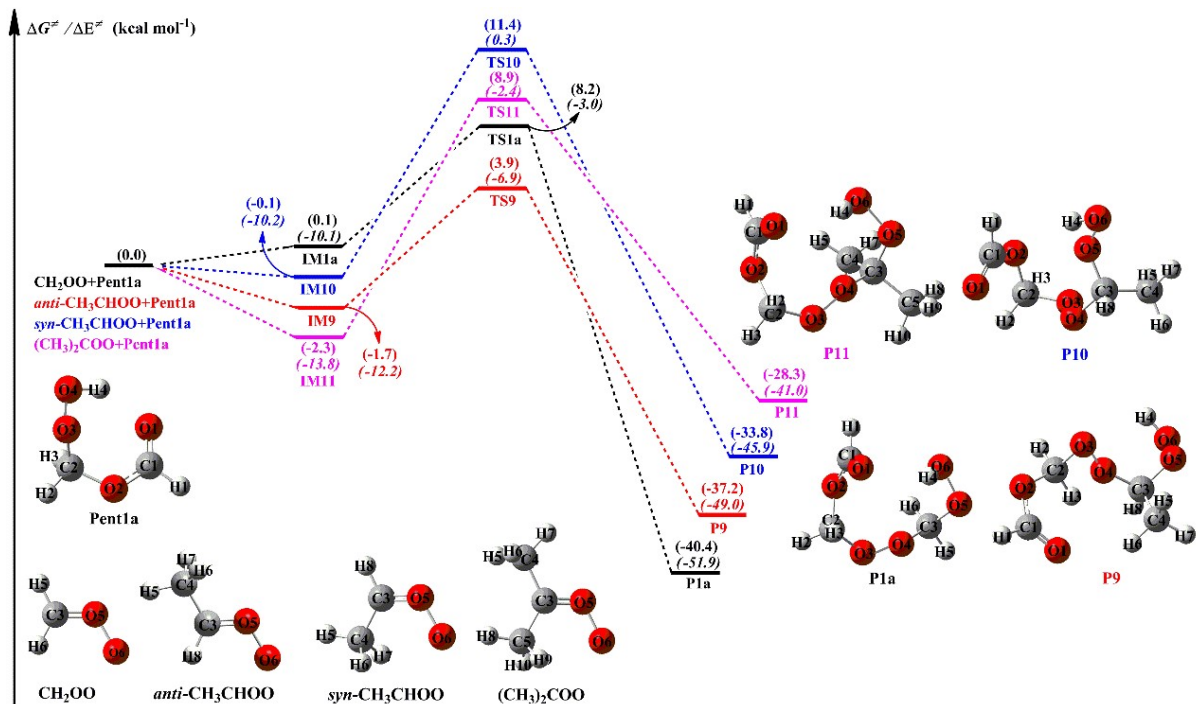


图2. 在M06-2X/ma-TZVP//M06-2X/6-311+G(2df,2p)水平上不同Criegee中间体与氢过氧化  
酯HC(O)OCH<sub>2</sub>OOH聚合反应势能剖面图


=== 政府部门 ===

=== 科研机构 ===

=== 相关单位 ===

(<http://www.cas.cn/>)

版权所有：中国科学院地球环境研究所 网站备案号：陕ICP备11001760号-3 (<https://beian.miit.gov.cn/>)

 公安网备61011302001284 (<http://www.beian.gov.cn/portal/registerSystemInfo?recordcode=61011302001284>)

单位地址：陕西省西安市雁塔区雁翔路97号 单位邮编：710061

电子邮件：[web@ieecas.cn](mailto:web@ieecas.cn) (mailto:[web@ieecas.cn](mailto:web@ieecas.cn)) 传真：029 - 62336234



(<https://bszs.conac.cn/sitename?method=show&id=CB9FE425F37A584EE05310291AACD09B>)