

大气污染控制技术
与策略丛书

大气二次有机气溶胶污染 特征及模拟研究

Characterization, Experimental Study,
and Modeling of Atmospheric
Secondary Organic Aerosol

郝吉明 吕子峰 楚碧武 武山 赵喆 等著



科学出版社

大气污染控制技术与策略丛书

大气二次有机气溶胶污染特征 及模拟研究

郝吉明 吕子峰 楚碧武 武山 赵喆 等著



科学出版社

北京

X513
29

内 容 简 介

二次有机气溶胶是大气颗粒物的主要成分之一,对人体健康、空气质量、气候变化等都有严重影响。本书系统地阐述了二次有机气溶胶的概念、形成机制、影响因素、研究方法及模型模拟等。基于外场观测的颗粒物、挥发性有机物等数据,本书研究了典型地区北京的二次有机气溶胶大气污染特征,指认了对二次有机气溶胶生成贡献大的挥发性有机物物种;利用烟雾箱实验系统,考察了二次有机气溶胶各主要前体物的气溶胶生成潜势,研究了无机颗粒物对二次有机气溶胶生成的影响规律;构建了甲苯光氧化生成二次有机气溶胶的箱式模型,分别在箱式模型和大尺度的空气质量模型中引入烟雾箱实验量化结果,并对模拟结果进行了评价。

本书可供从事大气科学、环境科学、大气环境化学和大气污染控制等研究工作的科研人员参考,也可供从事环境保护事业的管理人员阅读。

图书在版编目(CIP)数据

大气二次有机气溶胶污染特征及模拟研究/郝吉明等著. —北京:科学出版社, 2015. 2

(大气污染控制技术与策略丛书)

ISBN 978-7-03-043079-3

I. ①大… II. ①郝… III. ①空气污染-气溶胶-二次污染-研究 IV. X51

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 013191 号

责任编辑:杨 震 刘 冉 / 责任校对:赵桂芬

责任印制:肖 兴 / 封面设计:黄华斌

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京通州皇家印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015 年 2 月第 一 版 开本: 720×1000 1/16

2015 年 2 月第一次印刷 印张: 17 1/4 插页: 4

字数: 350 000

定价: 98.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

丛书编委会

主 编：郝吉明

副主编（按姓氏汉语拼音排序）：

柴发合 陈运法 贺克斌 李 锋 朱 彤

编 委（按姓氏汉语拼音排序）：

白志鹏 鲍晓峰 曹军骥 冯银厂 高 翔

郝郑平 贺 泓 宁 平 王春霞 王金南

王书肖 王新明 王自发 吴忠标 谢绍东

杨 新 杨 震 姚 强 张朝林 张小曳

张寅平 朱天乐

丛书序

当前,我国大气污染形势严峻,灰霾天气频繁发生。以可吸入颗粒物(PM_{10})、细颗粒物($PM_{2.5}$)为特征污染物的区域性大气环境问题日益突出,大气污染已呈现出多污染源多污染物叠加、城市与区域污染复合、污染与气候变化交叉等显著特征。

发达国家在近百年不同发展阶段出现的大气环境问题,我国却在近 20 年间集中爆发,使问题的严重性和复杂性不仅在于排污总量的增加和生态破坏范围的扩大,还表现为生态与环境问题的耦合交互影响,其威胁和风险也更加巨大。可以说,我国大气环境保护的复杂性和严峻性是历史上任何国家工业化过程中所不曾遇到过的。

为改善空气质量和保护公众健康,2013 年 9 月,国务院正式发布了《大气污染防治行动计划》,简称为“大气十条”。该计划由国务院牵头,环境保护部、国家发展和改革委员会等多部委参与,被誉为我国有史以来力度最大的空气清洁行动。“大气十条”明确提出了 2017 年全国与重点区域空气质量改善目标,以及配套的十条 35 项具体措施。从国家层面上对城市与区域大气污染防治进行了全方位、分层次的战略布局。

中国大气污染控制技术与对策研究始于 20 世纪 80 年代。2000 年以后科技部首先启动“北京市大气污染控制对策研究”,之后在 863 计划和科技支撑计划中加大了投入,研究范围也从“两控区”(酸雨区和二氧化硫控制区)扩展至京津冀、珠江三角洲、长江三角洲等重点地区;各级政府不断加大大气污染控制的力度,从达标战略研究到区域污染联防联控研究;国家自然科学基金委员会近年来从面上项目、重点项目到重大项目、重大研究计划各个层次上给予立项支持。这些研究取得丰硕成果,使我国的大气污染成因与控制研究取得了长足进步,有力支撑了我国大气污染防治的综合防治。

在学科内容上,由硫氧化物、氮氧化物、挥发性有机物及氨等气态污染物的污染特征扩展到气溶胶科学,从酸沉降控制延伸至区域性复合大气污染的联防联控,由固定污染源治理技术推广到机动车污染物的控制技术研究,逐步深化和开拓了研究的领域,使大气污染控制技术与策略研究的层次不断攀升。

鉴于我国大气环境污染的复杂性和严峻性,我国大气污染控制技术与策略领域研究的成果无疑也应该是世界独特的,总结和凝聚我国大气污染控制方面已有的研究成果,形成共识,已成为当前最迫切的任务。

我们希望本丛书的出版,能够大大促进大气污染控制科学技术成果、科研理论体系、研究方法与手段、基础数据的系统化归纳和总结,通过系统化的知识促进我国大气污染控制科学技术的新发展、新突破,从而推动大气污染控制科学研究进程和技术产业化的进程,为我国大气污染控制相关基础学科和技术领域的科技工作者和广大师生等,提供一套重要的参考文献。

2015年1月

前 言

大气中的二次有机气溶胶(SOA)是挥发性有机物(VOCs)大气氧化的产物,是城区、郊区及偏远地区大气细颗粒物($\text{PM}_{2.5}$,空气动力学直径小于 $2.5\ \mu\text{m}$ 的颗粒)的重要组成部分。它是数千种物理化学性质不同的有机组分的集合体,其中绝大多数具有致癌、致畸和致突变性,对人体健康有严重危害。除此之外,二次有机气溶胶还和能见度降低、光化学烟雾、酸沉降、气候变化等局地、区域乃至全球尺度的环境问题相关,日益引起学术界、公众以及世界各国政府的高度重视。

自 20 世纪 80 年代开始,随着国民经济的高速发展和能源、工业、交通等活动的日益频繁,我国的大气污染类型逐渐由单一的煤烟型污染向以城市群为中心的区域复合型污染转变。复合型污染的最终结果是二次污染物,尤其是以二次有机气溶胶为代表的细颗粒大量增加、大气氧化性增强。与其他国家相比,我国城市细颗粒物污染形势十分严峻。2000 年至今的空气质量监测数据表明,虽然经过了多年、多阶段的大气污染控制,全国重点城市空气质量达标的比例有所上升,但大多数城市空气质量仍没能达到国家环境空气质量标准,而可吸入颗粒物几乎是所有这些城市的首要污染物。此外,我国城市有机气溶胶含量高,约占到 $\text{PM}_{2.5}$ 质量浓度的三分之一,呈现出有机颗粒物污染严重的特征。这些都表明对颗粒物污染的控制,尤其是有机气溶胶污染的控制,将是我国绝大多数城市目前和未来一个相当长时期内大气污染控制的重点和难点。

虽然二次有机气溶胶逐渐成为大气化学领域的研究热点,但由于其成分和生成机理复杂、影响因素众多、大气含量低、分析检测困难,也成为大气化学领域的研究难点。目前,我国针对二次有机气溶胶的研究甚少,研究工具、研究方法等也尚未形成系统。而作为我国城市大气细颗粒物最重要的组成之一,二次有机气溶胶污染的控制对细颗粒物的控制至关重要。在这样的背景下,研究二次有机气溶胶的大气污染特征、形成机制,并对其进行实验室和模型模拟十分必要。

清华大学环境科学与工程系(清华大学环境学院的前身)从 2003 年开始,在日本丰田汽车公司、日本丰田中央研究所的资助下,开始合作开展对大气二次有机气溶胶的研究。课题同时得到国家自然科学基金项目(20637001, 20477020, 20937004, 20625722)及北京市环境保护项目的支持。研究针对我国颗粒物污染,尤其是二次粒子污染严重的特征,综合运用外场观测、烟雾箱实验和模型模拟等手段,重点考察高浓度的颗粒物对大气光化学反应生成二次有机气溶胶的影响。首先,以外场观测积累的颗粒物、挥发性有机物等数据为基础,研究了典型地区北京

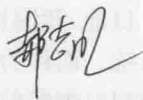
的二次有机气溶胶大气污染特征,并指认了对其生成贡献较大的挥发性有机物物种,为后续烟雾箱实验提供依据。其次,利用烟雾箱实验系统,重点考察了各主要前体物的二次有机气溶胶生成潜势,并在此基础上研究了无机颗粒对二次有机气溶胶生成的影响。最后,在二次有机气溶胶的箱式模型和大尺度空气质量模型中分别引入实验室研究的量化结果,并对模拟结果进行了评价。

作为上述研究的承担者,我们深悉信息的交流与分享是促进科学研究进步与发展的动力,我们有责任将目前国内外二次有机气溶胶的研究进展和我们积累的成果与方法进行总结,供二次有机气溶胶外场观测、实验室模拟和模型模拟的研究者以及二次有机气溶胶污染控制的决策者参考,并向同行专家求教,这便成为写作本书的动力。

全书共 13 章,从外场观测、实验室模拟、模型模拟三个角度展开,主要内容包括二次有机气溶胶的研究意义和方法、大气污染特征、烟雾箱实验技术和结果、箱式模型模拟以及大尺度空气质量模型的模拟等。在编写上既考虑了专业研究人员的需要,又考虑了普通读者的需求。全书力图将二次有机气溶胶的理论研究与其控制决策相关联。愿本书的出版对读者了解二次有机气溶胶污染的形成规律和控制途径有所帮助,并进一步推动该方向的研究和技术发展。

本书的内容主要基于作者完成的相关研究,系集体讨论、分工执笔,最后由吕子峰、楚碧武统稿,郝吉明定稿。除署名者外,第 2 章由段凤魁博士完成,王丽涛和邢佳对第 10 章、藕启胜对第 9 章作出了贡献。本书的出版得到科学出版社的支持,在此一并致以衷心谢意。

大气二次有机气溶胶的相关研究是大气环境化学研究的热点和难点,涉及多学科复杂问题。由于研究条件和作者能力有限,文中若有疏漏及不当之处,敬请各位读者及同行专家指正。



2014 年 12 月于清华园

缩略词及符号说明

ACSM	气溶胶化学组分检测仪(Aerosol Chemical Speciation Monitor)
AMS	气溶胶质谱(Aerosol Mass Spectrometer)
AQSM	空气质量模拟模型(Air Quality Simulation Model)
CACM	加利福尼亚理工学院大气化学机理(Caltech Atmospheric Chemistry Mechanism)
CB-IV	碳键机理版本IV(Carbon Bond IV Mechanism)
CCs	可凝结有机组分(Condensable Organic Compounds)
CCN	云凝结核(Cloud Condensation Nuclei)
CMAQ	多尺度空气质量模型(Community Multiscale Air Quality Model)
CMD	个数中位直径(Count Median Diameter)
CPC	颗粒物计数器(Condensation Particle Counter)
CRH	结晶相对湿度(Crystallization Relative Humidity)
DMA	微分迁移率分析仪(Differential Mobility Analyzer)
DRH	潮解相对湿度(Deliquescence Relative Humidity)
EC	元素碳(Elemental Carbon)
ERH	风化相对湿度(Efflorescence Relative Humidity)
FAC	气溶胶生成系数(Fractional Aerosol Coefficient)
GC	气相色谱(Gas Chromatography)
Gf	吸湿增长因子(Growth Factor)
HC	碳氢化合物(Hydrocarbon)
ICs	非凝结有机气体(Incondensable Organic Compounds)
k_{dep}	沉积速率常数(Deposition Rate Coefficient)

K_{om}	经 M_o 标准化的分配系数
MCM	近全面化学机理(Master Chemical Mechanism)
MIR	最大增量反应活性法(Maximum Incremental Reactivity)
M_o	有机气溶胶质量(Organic Aerosol Mass)
NMHCs	非甲烷碳氢化合物(Non-Methane Hydrocarbons)
OA	有机气溶胶(Organic Aerosol)
OC	有机碳(Organic Carbon)
PM	颗粒物(Particulate Matter)
$PM_{2.5}$	空气动力学直径小于 $2.5\ \mu\text{m}$ 的颗粒
PM_{10}	空气动力学直径小于 $10\ \mu\text{m}$ 的颗粒
$PM_{s,g}$	当 SOA 开始生成时的颗粒物表面积浓度
$PM_{v,g}$	当 SOA 开始生成时的颗粒物体积浓度
PMF	正交矩阵因子分析法(Positive Matrix Factorization)
RADM	区域酸沉降模型(Regional Acid Deposition Model)
RH	相对湿度(Relative Humidity)
$RO\cdot$	烷氧自由基(Alkoxy Radical)
$RO_2\cdot$	有机过氧自由基(Organic Peroxy Radical)
ROG	活性有机气体(Reactive Organic Gas)
SAPRC	州际空气污染研究中心机理(Statewide Air Pollution Research Center Mechanism)
SEM	扫描电子显微镜(Scanning Electron Microscope)
SMPS	扫描迁移率粒子测定仪(Scanning Mobility Particle Sizer)
SOA	二次有机气溶胶(Secondary Organic Aerosol)
SOC	二次有机碳(Secondary Organic Carbon)
SVOCs	半挥发性有机物(Semivolatile Organic Compounds)

TCRDL	日本丰田中央研究所(Toyota Central Research and Development Laboratory)
TDMA	串联差分电迁移率吸湿性测量系统(Tandem Differential Mobility Analyzer)
TMB	三甲苯(Trimethylbenzene)
USEPA	美国环境保护局(U. S. Environmental Protection Agency)
VOCs	挥发性有机物(Volatile Organic Compounds)
Y	气溶胶产率(Aerosol Yield)
α	基于质量的化学反应计量系数(Mass-Based Stoichiometric Coefficient)
σ_g	几何标准偏差(Geometric Standard Deviation)

目 录

丛书序

前言

缩略词及符号说明

第 1 章 绪论	1
1.1 大气中的气溶胶	1
1.2 大气中的二次有机气溶胶	5
1.2.1 SOA 的前体物	5
1.2.2 SOA 的形成过程	8
1.2.3 SOA 生成潜势的表达方法	12
1.2.4 影响气溶胶产率的因素	16
1.3 我国颗粒物及二次有机气溶胶污染情况	19
1.4 SOA 的研究方法	24
1.4.1 外场观测研究	24
1.4.2 实验室(烟雾箱)模拟研究	25
1.4.3 模型模拟研究	26
1.5 本书的研究目的、意义和内容	27
第 2 章 大气 SOA 污染特征研究: I. OC/EC 最小比值法	29
2.1 样品的采集与测定	29
2.1.1 采样点的设置	29
2.1.2 采样系统	30
2.1.3 碳质组分 OC、EC 的测定	31
2.2 北京市 OC、EC 浓度水平及时空变化	33
2.3 OC、EC 相关性	39
2.4 OC、EC 比值	41
2.5 北京市大气环境中 SOC 的估算	42
2.6 本章小结	43
第 3 章 大气 SOA 污染特征研究: II. 气溶胶生成系数法	45
3.1 VOCs 样品的采集、分析及质量保证和控制	45
3.2 SOA 的计算方法	47
3.2.1 气溶胶生成系数	47

3.2.2	光化学反应情景假设	50
3.2.3	$\cdot\text{OH}$ 浓度的确定	51
3.3	北京市高臭氧浓度期间 SOA 生成潜势的估算	51
3.3.1	对苯和异戊二烯的处理	51
3.3.2	SOA 浓度的估算	52
3.3.3	SOA 化学成分的估算	53
3.3.4	SOA 前体物的环境浓度和 O_3 生成潜势	54
3.3.5	与相关研究的比较和讨论	55
3.4	本章小结	56
第4章	清华大学室内烟雾箱实验系统的构建和表征	57
4.1	国内外的烟雾箱实验系统	57
4.1.1	国外的烟雾箱实验系统	57
4.1.2	国内的烟雾箱实验系统	59
4.2	清华大学室内烟雾箱实验系统的构建	61
4.2.1	Teflon 反应器	62
4.2.2	空气净化系统	64
4.2.3	注样系统	65
4.2.4	分析检测仪器	65
4.2.5	其他	66
4.3	清华大学室内烟雾箱实验系统的表征	66
4.3.1	清洁空气的表征	67
4.3.2	气相物种在烟雾箱内沉积速率常数的表征	68
4.3.3	颗粒物沉积的表征	72
4.3.4	烟雾箱内紫外光强度的表征	74
4.3.5	烟雾箱壁反应性的表征	78
4.3.6	实验重复性的表征	79
4.4	烟雾箱的清洗及实验的准备过程	81
4.5	本章小结	81
第5章	主要前体 VOCs 氧化生成 SOA 的烟雾箱实验研究	83
5.1	主要前体 VOCs 氧化生成 SOA 的机理概述	83
5.1.1	芳香烃前体物	83
5.1.2	α -蒎烯	87
5.1.3	异戊二烯	91
5.1.4	长链正构烷烃	94

5.2	SOA 产率的计算和典型 SOA 生成实验的结果	96
5.3	主要前体 VOCs 氧化生成 SOA 的研究	99
5.3.1	各前体物 SOA 产率与相关研究的比较	100
5.3.2	各前体物 SOA 产率之间的比较	104
5.4	本章小结	106
第 6 章	无机颗粒和 SOA 相互影响的研究: I. 无机离子颗粒对间二甲苯 SOA 生成的影响	107
6.1	对无机离子气溶胶的分类和选取	107
6.1.1	无机离子气溶胶的含水特性	107
6.1.2	无机离子气溶胶的分类和选取	109
6.2	无机离子颗粒影响的检验性实验结果	109
6.3	中性粒子和干燥酸性粒子对 SOA 生成的影响	113
6.4	干燥酸性粒子对 SOA 生成影响的原因	116
6.5	本章小结	118
第 7 章	无机颗粒和 SOA 相互影响的研究: II. 干燥硫酸铵颗粒对 SOA 生成的影响	120
7.1	干燥硫酸铵颗粒对甲苯光氧化生成 SOA 的影响	120
7.2	干燥硫酸铵颗粒对间二甲苯光氧化生成 SOA 的影响	124
7.3	干燥硫酸铵颗粒对 1,2,4-三甲苯光氧化生成 SOA 的影响	124
7.4	干燥硫酸铵颗粒对 α -蒎烯光氧化体系生成 SOA 的影响	127
7.5	干燥硫酸铵颗粒对异戊二烯和正十一烷光氧化体系生成 SOA 的影响	130
7.6	干燥硫酸铵颗粒对不同前体物影响不同的原因分析	132
7.7	本章小结	133
第 8 章	无机颗粒和 SOA 相互影响的研究: III. 硫酸锌和硫酸锰对甲苯 SOA 生成的影响	134
8.1	硫酸锌对甲苯光氧化生成 SOA 的影响	134
8.2	硫酸锰对甲苯光氧化生成 SOA 的影响	138
8.3	硫酸锌和硫酸锰对 SOA 产率的影响	140
8.4	硫酸锌和硫酸锰对碳氢光氧化过程中 SOA 生成的影响机制	141
8.5	本章小结	144
第 9 章	无机颗粒和 SOA 相互影响的研究: IV. 硫酸亚铁对光氧化 SOA 生成的影响	145
9.1	硫酸亚铁对 α -蒎烯光氧化过程中 SOA 生成的影响	145

9.2	硫酸亚铁对甲苯光氧化过程中 SOA 生成的影响	149
9.3	硫酸亚铁对 α -蒎烯和甲苯光氧化过程中 SOA 产率的影响	151
9.4	硫酸亚铁抑制光氧化 SOA 生成的机理推测	153
9.5	硫酸亚铁和硫酸铵混合气溶胶种子对 SOA 生成的影响	154
9.6	不同湿度条件下硫酸亚铁对 α -蒎烯光氧化 SOA 生成的影响	157
9.7	本章小结	160
第 10 章	无机颗粒和 SOA 相互影响的研究: V. SOA 与碳黑颗粒压缩重构的关系	161
10.1	团簇状碳黑颗粒的微观结构及描述	161
10.1.1	团簇状碳黑颗粒的微观结构	161
10.1.2	团簇状碳黑颗粒的描述	162
10.2	SOA 生成体系中团簇状碳黑颗粒的压缩重构	163
10.2.1	甲苯光氧化体系	163
10.2.2	α -蒎烯臭氧氧化和光氧化体系	167
10.2.3	间/对二甲苯、1,2,4-三甲苯和正十一烷光氧化体系	170
10.3	非 SOA 生成体系中团簇状碳黑颗粒的压缩重构	172
10.3.1	烟雾箱背景颗粒物的生成	172
10.3.2	丙烯臭氧氧化体系	172
10.3.3	丙烯光氧化体系	176
10.4	引起团簇状碳黑颗粒压缩重构的可能物种	177
10.4.1	非 SOA 生成体系	177
10.4.2	SOA 生成体系	182
10.5	对大气的意义	183
10.6	本章小结	185
第 11 章	碳氢光氧化生成的 SOA 的吸湿性特征	186
11.1	α -蒎烯光氧化过程中生成的 SOA 的吸湿性	186
11.2	气溶胶种子存在下 α -蒎烯光氧化过程中颗粒物的吸湿性	187
11.3	α -蒎烯光氧化生成的颗粒物的吸湿性在老化过程中的变化	189
11.3.1	α -蒎烯光氧化 SOA 的吸湿性在老化过程中的变化	189
11.3.2	气溶胶种子存在下 SOA 吸湿性在老化过程中的变化	190
11.3.3	α -蒎烯光氧化生成的颗粒物在老化过程中的组成变化	192
11.4	本章小结	195
第 12 章	甲苯光氧化生成 SOA 的箱式模型研究	197
12.1	甲苯光氧化生成 SOA 的箱式模型构建	197

12.1.1	模型构建概述	197
12.1.2	气相模块的构建	198
12.1.3	气相/颗粒相分配模块的构建	201
12.1.4	过氧化半缩醛生成模块的构建	203
12.1.5	干燥硫酸铵影响模块的构建	205
12.1.6	烟雾箱辅助机理模块的引入	206
12.2	箱式模型模拟与烟雾箱实验结果的比较	206
12.3	箱式模型模拟不同因素对 SOA 生成的影响	207
12.3.1	温度的影响	207
12.3.2	$[\text{HC}]_0/[\text{NO}_x]_0$ 的影响	209
12.3.3	干燥硫酸铵表面积浓度的影响	211
12.4	本章小结	213
第 13 章	Model-3/CMAQ 模型中 SOA 模块的初步修改	214
13.1	空气质量模型 Models-3/CMAQ 简介	214
13.1.1	CMAQ 模型的结构、特点与应用	214
13.1.2	CMAQ 模型中 SOA 的计算方法	216
13.2	CMAQ 模型的设置及输入参数	217
13.2.1	模拟域、模拟时段和排放数据	217
13.2.2	MM5 和 CMAQ 模型的设置	217
13.3	CMAQ 模型 SOA 模块的修改及结果	221
13.3.1	对 SOA 模块的修改	221
13.3.2	模拟结果	222
13.4	本章小结	228
参考文献		229
索引		254
彩图		

第1章 绪 论

大气气溶胶(也称颗粒物, Particulate Matter, PM)是悬浮在大气中微小的固体或液体微粒的总称。近些年来,大气气溶胶在大气化学、气候变化、空气污染和人体健康等方面的影响逐步引起了人们的广泛关注,成为研究热点。根据粒径的不同,颗粒物可以分为粗颗粒物和细颗粒物($\text{PM}_{2.5}$),一般以空气动力学粒径 $2.5\text{ }\mu\text{m}$ 为界。研究表明,细颗粒物的环境效应远比粗颗粒物大,它可以危害人体健康^[1,2]、降低能见度^[3,4]、影响气候变化^[5-7]等。根据来源的不同,大气气溶胶可以分为一次和二次气溶胶。一次气溶胶是指向大气直接排放的气溶胶,二次气溶胶指通过大气化学过程生成的气溶胶。二次有机气溶胶(Secondary Organic Aerosol, SOA)是二次气溶胶的一部分,由大气中的挥发性有机物(Volatile Organic Compounds, VOCs)经过大气氧化而形成。SOA 是城区及郊区细颗粒物的重要组成部分^[8,9],所占比例较高。一般认为在 $\text{PM}_{2.5}$ 中,有机气溶胶(Organic Aerosol, OA)约占到总质量浓度的 20%~60%,而 SOA 平均可以占到 OA 的 20%~70%,在发生光化学烟雾的条件下甚至可以占到 70%以上^[10]。光化学烟雾在 SOA 的形成过程中起着重要的作用。期间,NO 转化成 NO_2 ,碳氢化合物(Hydrocarbon, HC)被氧化,生成臭氧和其他氧化物(如过氧乙酰硝酸酯等),这些物质后续的复杂物理化学过程就能导致 SOA 的产生。

1.1 大气中的气溶胶

大气气溶胶是指悬浮在大气中微小的固体或液体微粒,通常也称作颗粒物^{[11] 55-62}。其来源可以分为天然源和人为源。天然源过程包括土壤和岩石的风化、火山的喷发、海浪飞沫、生物质的燃烧和大气化学反应等过程^[12]。与天然源相比,人为源排放的绝对量较少,主要来自化石燃料燃烧、工业过程、非工业面源(包括路面扬尘、风蚀、建筑扬尘等)和交通源的排放^{[11] 60}。排放到大气中的颗粒物能够通过干沉降和湿沉降等过程从大气中去除。气溶胶粒子在大气中平均停留时间大概在几天到几周,根据粒径不同有所差别。气溶胶根据形成过程的不同可以分为一次和二次气溶胶。一次气溶胶是各种排放源直接向大气中排放的颗粒物,比如土壤尘、燃烧产生的飞灰与碳黑、海盐颗粒、火山尘等。二次气溶胶是通过大气物理和化学过程产生的颗粒物,主要是一次排放的气态污染物(NO_x , SO_x , VOCs 等)通过大气氧化和气相/颗粒相转化产生^[12]。从成分上分,气溶胶可以分为有机