



## Aerosoly – velká neznámá

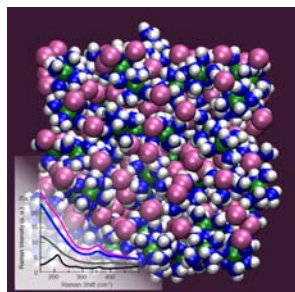
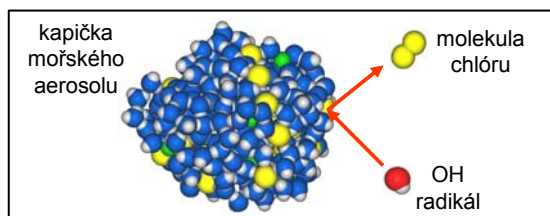
### Počítačové modely na úrovni molekul pomáhají lépe pochopit chemické reakce při vzniku smogu

Atmosférické aerosoly významně ovlivňují kvalitu ovzduší i zemské klima, jsou však zároveň jednou z nejméně prozkoumaných složek atmosféry. V práci nedávno publikované v prestižním mezinárodním vědeckém časopise (viz citace) přichází mezinárodní tým vědců z Kalifornské univerzity v Irvine, Ohioské státní univerzity v Columbusu a Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR s novým 'vylepšeným' modelem částic mořského aerosolu doplněným o kation  $Mg^{2+}$ , jehož přítomnost v mořské vodě dosavadní modely nebraly v úvahu. Vědci na základě studia roztoků chloridu hořečnatého pomocí spektroskopie a počítačových simulací ukázali, že **zvláštní chování kationtů hořčíku  $Mg^{2+}$  ve vodě** ovlivňuje výskyt chloridových aniontů  $Cl^-$  na povrchu roztoku, a **může tak zvyšovat reaktivitu slaných mořských aerosolů rozptýlených v zemské atmosféře.**

**Aerosoly**, tvořené kapalnými nebo pevnými částicemi o velikosti 0.01 – 100 mikrometrů rozptýlenými ve vzduchu, se významně podílejí na důležitých atmosférických dějích, jako je tvorba oblačnosti, vznik srážek a rozptyl slunečního záření, a jejich prostřednictvím mají vliv na zemské klima. Mají také značný dopad na životní prostředí a zdraví člověka. Aerosolové částice jednak často obsahují adsorbované toxické či karcinogenní látky, na jejich povrchu navíc dochází k celé řadě chemických reakcí, při nichž se do ovzduší uvolňují nejrůznější škodliviny. Vzhledem ke komplexnímu a proměnlivému složení aerosolových částic a jejich mikroskopickým rozměrům je jejich studium stále poměrně obtížné.

Zemská atmosféra je nesmírně komplikovaný systém, ve kterém dochází k obrovskému množství vzájemně propojených fyzikálních a chemických procesů. Cílem výzkumu atmosférických chemiků je **porozumět klíčovým procesům na molekulární úrovni**, a soustavně tak zpřesňovat modely používané k předpovídání počasí, kvality ovzduší a klimatických změn.

Mikroskopické **kapičky mořského aerosolu**, obsahující rozpuštěné ionty chloridu sodného a dalších solí, vznikají při lámání vln na pobřeží. Chemickými reakcemi, a to zvláště ve znečištěných oblastech, kde se v ovzduší vyskytuje hodně přízemního ozonu a volných radikálů, se z těchto kapek uvolňují molekuly chlóru. Ty následně reagují s dalšími složkami smogu, a v konečném důsledku může docházet ke zvyšování koncentrace přízemního ozonu a vzniku mnoha jiných škodlivých sloučenin. Tyto děje přitom nejsou omezeny jen na pobřežní oblasti, protože vítr přenáší mořské aerosoly hluboko do vnitrozemí.



Jako model mořského aerosolu se v experimentech i počítačových simulacích často používá pouze roztok chloridu sodného (NaCl). V mořské vodě jsou ale přítomny i další ionty, a ty se mohou navzájem ovlivňovat. V této práci se vědci zaměřili na **dvojnásobně nabitý kationt hořčíku  $Mg^{2+}$**  a prokázali jejich značný vliv na strukturu povrchové vrstvy solného roztoku. Ačkoli jsou kationty  $Mg^{2+}$  v mořské vodě zastoupeny výrazně méně než kationty sodíku  $Na^+$ , tato práce ukazuje, že k přesnému popisu reaktivity mořských aerosolů je třeba vzít přítomnost hořečnatých kationtů v úvahu.

Dr. Martina Roeselová ze skupiny Doc. Pavla Jungwirtha na ÚOCHB AVČR se již řadu let zabývá počítačovými simulacemi atmosféricky významných molekulárních systémů. Oba vědci jsou členy mezinárodního týmu Institutu environmentálních molekulárních věd (AirUCI) se sídlem na Kalifornské univerzitě v Irvine a podílejí se na výzkumu atmosférické chemie aerosolů. „Řada významných procesů v atmosféře se **odehrává na povrchu aerosolových částic**. Chemické reakce, k nimž dochází **na rozhraní mezi plynnou a kapalnou fází**, je ovšem značně obtížné měřit a kvantifikovat, proto se při jejich zkoumání kromě experimentů významně uplatňují i naše počítačové modely a simulace,“ říká Dr. Martina Roeselová.

**Citace:** N.N. Casillas-Ituarte, K.M. Callahan, C.Y. Tang, X. Chen, M. Roeselová, D.J. Tobias, H.C. Allen **Surface organization of aqueous  $MgCl_2$  and application to atmospheric marine aerosol chemistry.** *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2010, **107**(15), 6616-6621