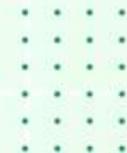


基于分子运动学的水汽在细颗粒表面异质核化的数值模拟

汇报人：

2024-01-19



目 录

- 引言
- 分子运动学理论基础
- 水汽在细颗粒表面异质核化过程分析
- 数值模拟方法与实现
- 结果分析与讨论
- 结论与展望

contents

01

引言



01

大气环境问题

随着工业化和城市化的快速发展，大气污染问题日益严重，细颗粒物（PM2.5）污染已成为影响大气环境质量的重要因素之一。

02

水汽在细颗粒表面的异质核化

水汽在细颗粒表面的异质核化是大气中云、雾和降水形成的关键过程，对气候、环境和人类健康具有重要影响。

03

数值模拟的重要性

数值模拟是研究水汽在细颗粒表面异质核化的有效手段，能够揭示其微观机制和影响因素，为大气污染控制和天气预报提供理论支持。

国内外研究现状及发展趋势

国内外研究现状

目前，国内外学者已经对水汽在细颗粒表面的异质核化进行了大量研究，包括实验观测、理论分析和数值模拟等方面，取得了一系列重要成果。

发展趋势

随着计算机技术和数值方法的不断发展，数值模拟在水汽异质核化研究中的应用将越来越广泛。未来，数值模拟将更加注重多尺度、多物理场耦合和不确定性量化等方面的研究，以提高模拟的准确性和可靠性。



研究内容、目的和意义



研究内容

本研究旨在通过数值模拟方法，深入研究水汽在细颗粒表面异质核化的微观机制和影响因素，揭示其内在规律和控制因素。

研究目的

通过本研究，旨在深入理解水汽在细颗粒表面异质核化的物理和化学过程，为大气污染控制、天气预报和气候变化研究提供理论支持。

研究意义

本研究不仅有助于揭示水汽在细颗粒表面异质核化的内在规律和影响因素，还可为大气污染控制、天气预报和气候变化研究提供新的思路和方法。同时，本研究还可为相关领域的研究提供借鉴和参考。

02

分子运动学理论基础

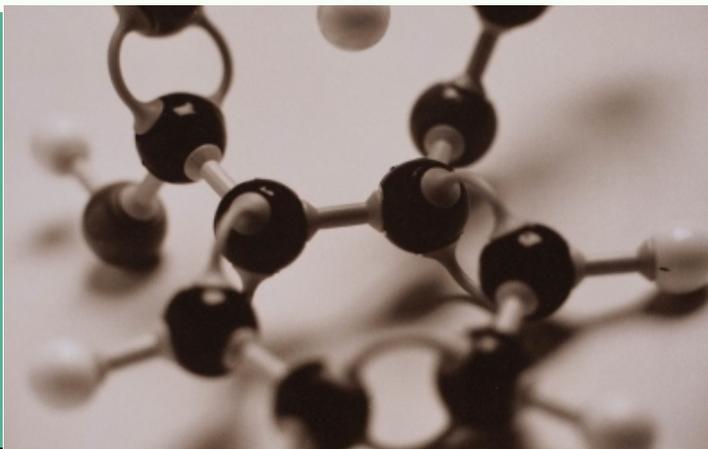




分子运动学基本概念

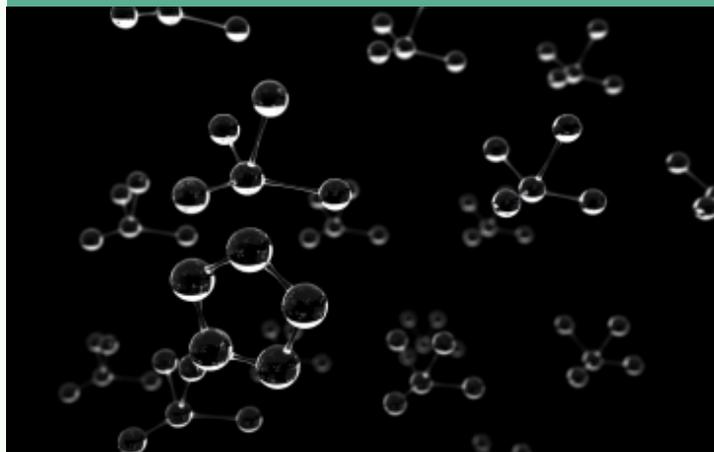
分子运动学

研究分子在空间中位置、速度和加速度随时间变化的科学。



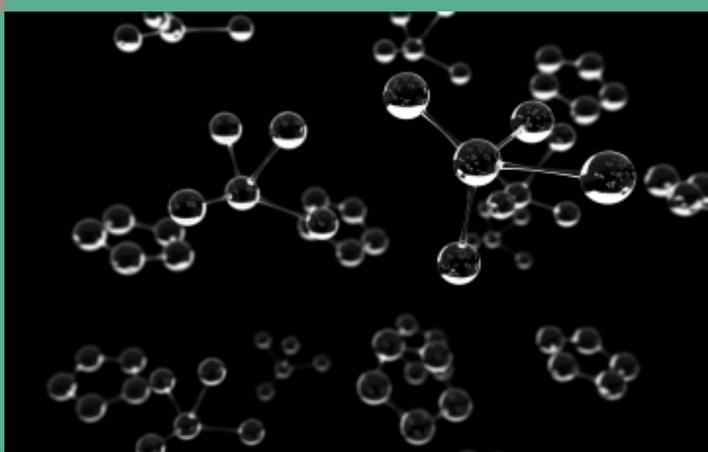
统计规律

大量分子的集体行为遵循统计规律，如玻尔兹曼分布、麦克斯韦速度分布等。



微观状态与宏观性质

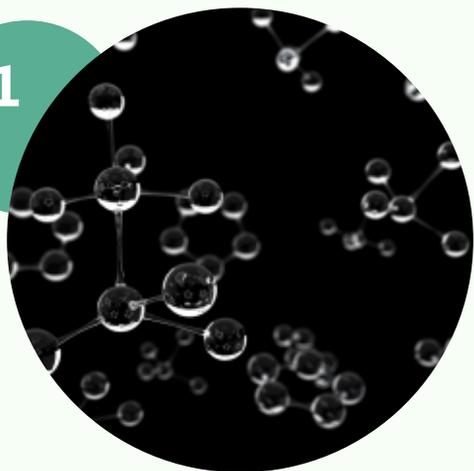
分子的微观状态决定了物质的宏观性质，如温度、压力等。





分子间相互作用力

01

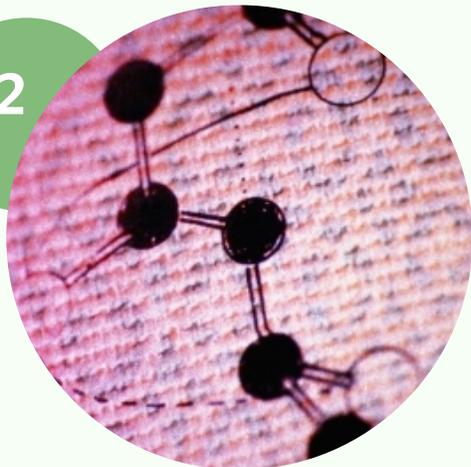


范德华力



分子间普遍存在的吸引力，与分子大小和极性有关。

02

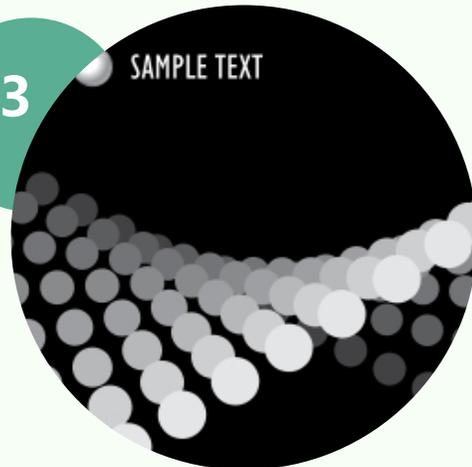


氢键



特定分子间（如水分子）存在的较强吸引力，对物质性质有重要影响。

03



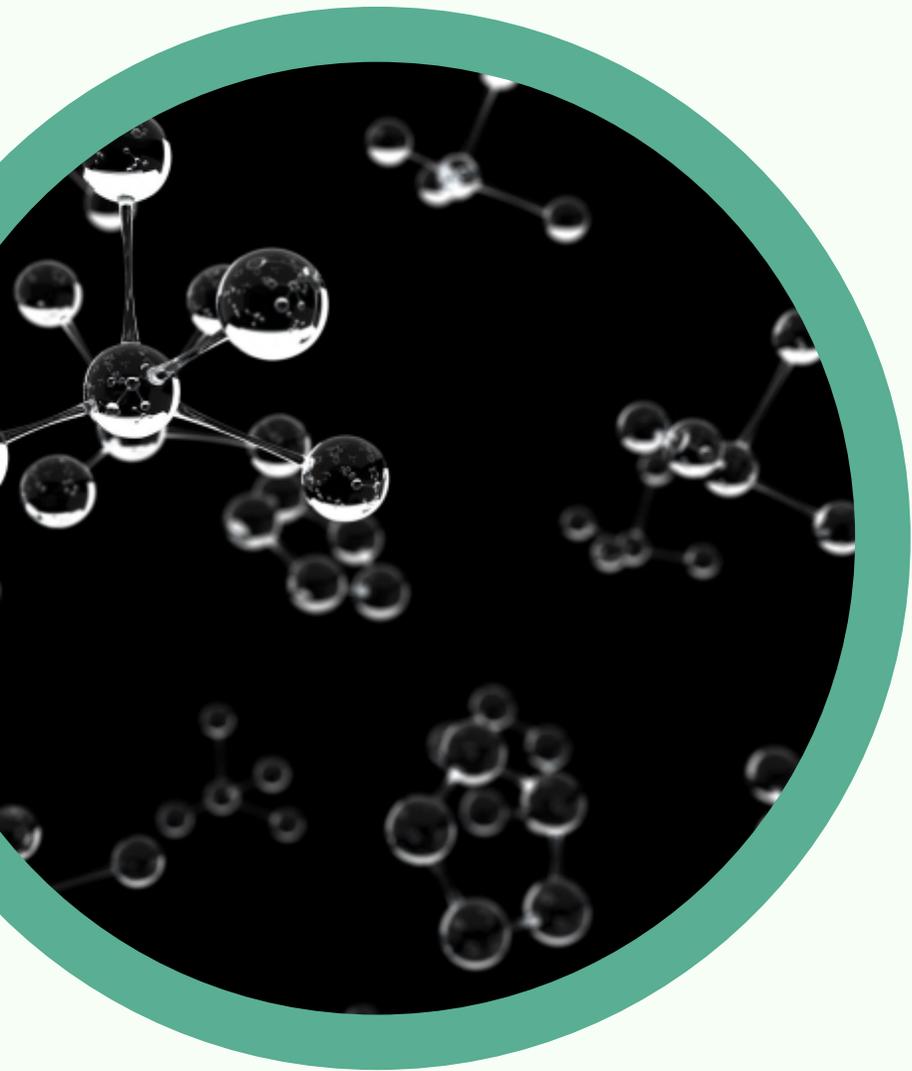
电荷相互作用



带电分子间的相互作用，包括库仑力和偶极相互作用。



扩散与热传导



01

扩散

分子在空间中的无规则运动导致物质浓度的均匀化过程。

02

热传导

分子间碰撞传递能量的过程，导致热量从高温区域向低温区域传递。

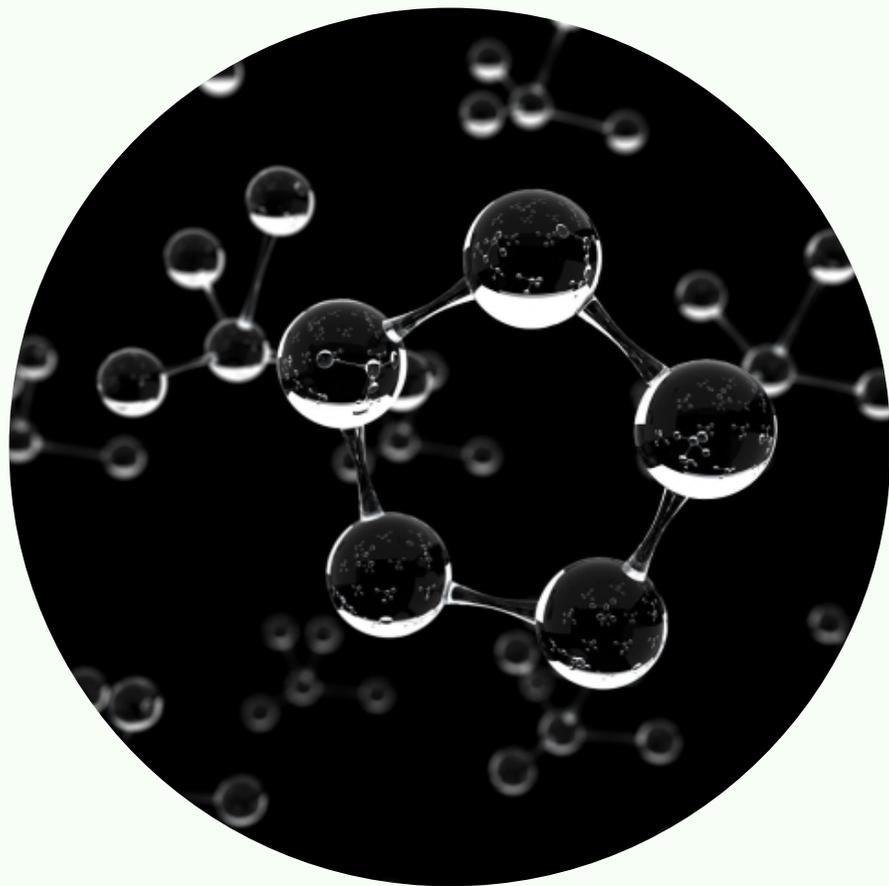
03

扩散系数与热传导系数

描述扩散和热传导过程的重要物理量，与分子性质和环境条件有关。



数值模拟方法简介



分子动力学模拟

通过计算机模拟分子的运动过程，揭示物质微观结构和宏观性质之间的关系。

蒙特卡罗方法

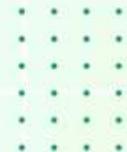
利用随机数进行抽样模拟，研究复杂系统的统计规律和热力学性质。

量子化学计算

基于量子力学原理计算分子的电子结构和性质，为理解分子间相互作用提供理论支持。

03

水汽在细颗粒表面异质核化过程 分析





异质核化现象描述



异质核化定义

异质核化是指水汽在细颗粒表面发生相变，由气态转变为液态或固态的过程。该过程中，细颗粒作为凝结核，促使水汽在其表面聚集并形成液滴或冰晶。

现象特征

异质核化现象具有随机性、快速性和温度依赖性。在适宜的条件下，水汽会迅速在细颗粒表面聚集，形成可见的液滴或冰晶。



影响因素分析

颗粒性质

细颗粒的化学成分、物理性质和表面结构对异质核化过程有显著影响。例如，亲水性颗粒更容易吸附水汽，而疏水性颗粒则相反。

环境条件

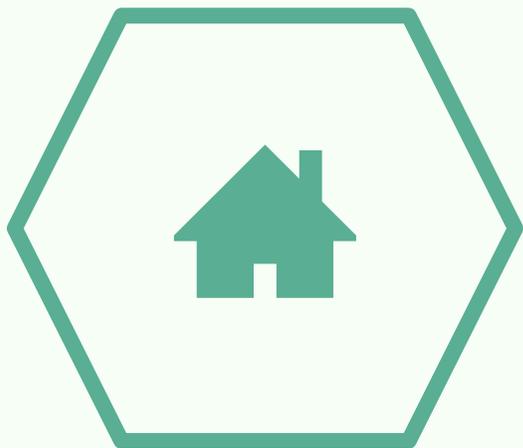
温度、湿度和气压等环境条件对异质核化过程也有重要影响。低温、高湿环境有利于异质核化的发生，而高温、低湿环境则会抑制该过程。

气体成分

大气中的其他气体成分，如二氧化碳、氧气和氮气等，对异质核化过程的影响较小，但某些特定气体（如二氧化硫）可能会与水汽竞争吸附位点，从而影响异质核化的进行。



理论模型建立



01

经典异质核化理论

基于热力学和动力学原理，描述水汽在细颗粒表面异质核化的基本过程。该理论主要考虑温度、湿度和颗粒性质等因素对异质核化的影响。

02

分子运动学模型

从分子层面出发，研究水汽分子在细颗粒表面的吸附、扩散和相变等过程。该模型能够更深入地揭示异质核化的微观机制，为数值模拟提供理论支持。

03

多因素耦合模型

综合考虑颗粒性质、环境条件和气体成分等多种因素对异质核化的影响，建立多因素耦合模型。该模型能够更全面地描述异质核化过程的复杂性和多样性，为实际应用提供更准确的预测和指导。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：
<https://d.book118.com/535332243133011221>