

# 云水酸化数值模式计算\*

莫天麟 邓振勤

(南京大学大气科学系)

## 提 要

假定形成在硫酸、硫酸盐和硝酸盐核上的云滴, 溶解酸、碱性气体在很短时间达到气-液平衡, 进行了云水酸度的数值模式计算。计算结果表明, 云水酸化不仅与云空气中酸、碱性气体和气溶胶粒子组分的初始浓度有关, 而且还与云含水量有关。

## 一、引 言

近年来, 在我国各地区对大气污染及降水化学成分的分析表明, 酸雨污染现象在我国不少地区出现<sup>[1-5]</sup>。酸雨形成的机制很复杂, 目前世界各国尚无较为成熟的理论。而一般来说, 酸雨的形成过程大致可以分为云内成雨清除过程和云下冲刷清除过程。前一过程即在云、雨滴形成过程中, 吸收和转化污染物的过程, 包括水蒸汽冷凝在含有硫酸盐、硝酸盐或氯化物等凝结核上, 云、雨滴吸收  $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_x$ ,  $\text{CO}_2$  和  $\text{NH}_3$  等酸、碱性气体; 在云雾降水形成过程中, 由于气溶胶粒子和水滴互相碰撞、碰并而结合在一起, 互相絮凝。后一过程是微量污染物被雨水从大气中冲刷带走的总机制。

近年来, 国外对酸雨的研究已经进行很多现场测量、实验室模拟和数值模式计算等工作。其中 Ohta 等<sup>[6]</sup>假设形成在硫酸、硫酸盐以及硝酸盐核上的云滴, 吸收并溶解酸、碱性气体后在很短时间内达到气-液平衡, 作了云水酸化的数值模式计算工作, 解释了即使在有碱性气体  $\text{NH}_3$  存在的情况下, 云水 pH 值可小于 3。但该模式未考虑云内含水量变化和  $\text{SO}_2$  的氧化转化, 应用上有其局限性。我们利用其采用的体系和实测资料以及标准大气<sup>[7]</sup>和其它有关文献资料<sup>[8,9]</sup>, 考虑云内含水量变化作了进一步计算, 本文主要介绍这部分的工作。

## 二、云水酸化数值模式的计算

采用文献[6]的假设、体系和实测资料, 该体系的化学平衡方程式及平衡常数列于表1中。然后用 Debye-Hückel 理论计算活度系数  $\gamma_+$ ,  $\gamma_-$  和  $\gamma_{z-}$ :

$$\lg \gamma_{z-} = \lg \gamma_{z-} = -AZ^2\sqrt{I}/(1+\sqrt{I}) + 0.2AZ^2I$$

\* 本文于1984年6月7日收到, 1985年3月20日, 收到修改稿。

$$(Z=1, 2, \dots) \quad (1)$$

这里  $A=0.509$ ,  $I$  为体系的离子强度, 它由下式表示:

$$I = \frac{1}{2} \sum_i [i] Z_i^2 \quad (2)$$

表 1  $\text{CO}_2\text{--SO}_2\text{--NH}_3\text{--HCl--HNO}_3\text{--H}_2\text{O}$  体系中化学平衡<sup>[6]</sup>

反 应	平 衡 常 数 表 达 式	平 衡 常 数
$\text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{OH}^-$	$K_w = [\text{H}^+][\text{OH}^+]^{\gamma_+ \gamma_-}$	$1.008 \times 10^{-14}$
$\text{SO}_2(\text{气}) + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{SO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	$K_{1a} = [\text{SO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}] / P_{\text{SO}_2}$	1.24
$\text{SO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{HSO}_3^-$	$K_{11} = [\text{H}^+][\text{HSO}_3^-]^{\gamma_+ \gamma_-} / [\text{SO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]$	$1.27 \times 10^{-2}$
$\text{HSO}_3^- \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{SO}_3^{2-}$	$K_{12} = [\text{H}^+][\text{SO}_3^{2-}]^{\gamma_+ \gamma_2} / [\text{HSO}_3^-]^{\gamma_-}$	$6.24 \times 10^{-8}$
$\text{NH}_3(\text{气}) + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	$K_{1a} = [\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}] / P_{\text{NH}_3}$	92.9
$\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{NH}_4^+ + \text{OH}^-$	$K_{11} = [\text{NH}_4^+][\text{OH}^-]^{\gamma_+ \gamma_-} / [\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}]$	$1.774 \times 10^{-5}$
$\text{CO}_2(\text{气}) + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{CO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	$K_{1a} = [\text{CO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}] / P_{\text{CO}_2}$	$3.4 \times 10^{-2}$
$\text{CO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCO}_3^- + \text{H}^+$	$K_{11} = [\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]^{\gamma_+ \gamma_-} / [\text{CO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]$	$4.45 \times 10^{-7}$
$\text{HCO}_3^- \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-}$	$K_{12} = [\text{H}^+][\text{CO}_3^{2-}]^{\gamma_+ \gamma_2} / [\text{HCO}_3^-]^{\gamma_-}$	$4.68 \times 10^{-11}$
$\text{HCl}(\text{气}) + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCl} \cdot \text{H}_2\text{O}$	$K_{1a} = [\text{HCl} \cdot \text{H}_2\text{O}] / P_{\text{HCl}}$	19.0
$\text{HCl} \cdot \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{Cl}^-$	$K_{11} = [\text{H}^+][\text{Cl}^-]^{\gamma_+ \gamma_-} / [\text{HCl} \cdot \text{H}_2\text{O}]$	$1.3 \times 10^6$
$\text{HNO}_3(\text{气}) + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HNO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	$K_{1a} = [\text{HNO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}] / P_{\text{HNO}_3}$	$2.1 \times 10^6$
$\text{HNO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{NO}_3^-$	$K_{11} = [\text{H}^+][\text{NO}_3^-]^{\gamma_+ \gamma_-} / [\text{HNO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}]$	15.4

式中  $[i]$  和  $Z_i$  分别为  $i$  离子的浓度和化合价。

云水还满足电中性的约束, 则可建立体系的阴、阳离子平衡方程, 再把表 1 中平衡常数式代入阴、阳离子平衡方程, 则得:

$$[\text{H}^+] + \frac{K_{1a} K_{11} [\text{H}^+] P_{\text{NH}_3}}{K_w} = \frac{K_w}{[\text{H}^+]^{\gamma_+ \gamma_-}} + \frac{K_{1a} K_{11} P_{\text{SO}_2}}{[\text{H}^+]^{\gamma_+ \gamma_-}} + \frac{2 K_{2a} K_{1a} K_{11} P_{\text{SO}_2}}{[\text{H}^+]^2 \gamma_+^2 \gamma_2} +$$

$$\frac{K_{1a} K_{1c} P_{\text{CO}_2}}{[\text{H}^+]^{\gamma_+ \gamma_-}} + \frac{2 K_{2c} K_{1a} K_{1c} P_{\text{CO}_2}}{[\text{H}^+]^2 \gamma_+^2 \gamma_2} + \frac{K_{1a} K_{11} P_{\text{HNO}_3}}{[\text{H}^+]^{\gamma_+ \gamma_-}} + \frac{K_{11} K_{11} P_{\text{HCl}}}{[\text{H}^+]^{\gamma_+ \gamma_-}} + 2 [\text{SO}_4^{2-}] \quad (3)$$

我们也假定云滴中  $[\text{SO}_4^{2-}]$  都来自气溶胶, 如果在平衡条件下气体  $K$  的压力  $P_K$  是已知的, 相应于确定值  $\gamma_+$ ,  $\gamma_-$  和  $\gamma_2$  的  $[\text{H}^+]$ , 可以解方程(3)。式(3)中  $P_{\text{NH}_3}$ ,  $P_{\text{SO}_2}$ ,  $P_{\text{CO}_2}$ ,  $P_{\text{HNO}_3}$  和  $P_{\text{HCl}}$  为与云滴平衡时云内空气中  $\text{NH}_3$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{HNO}_3$  和  $\text{HCl}$  的分压。它们与各自初始分压的关系式可参见文献[6]。

云水中  $\text{SO}_4^{2-}$  浓度由式(4)给出

$$[\text{SO}_4^{2-}] = 1000 m_s / M_s W \quad (4)$$

式中  $m_s$  和  $M_s$  分别为气溶胶  $\text{SO}_4^{2-}$  的浓度 ( $\text{g}/\text{m}^3$ ) 和  $\text{SO}_4^{2-}$  的分子量,  $W$  为云的液态含水量 ( $\text{g}/\text{m}^3$ )。将上述微量气体平衡时的分压与初始分压的关系式和式(4)代入方程(3), 然后应用方程(1)和(2), 可以得到  $(\text{H}^+)$ 。于是从表 1 可以计算各种离子的浓度。更为详细的模式计算原理可参阅文献[10]。

我们已对表 2 中的 9 种情况进行了计算, 其中引入  $R = a / (a + b)$ , 表示  $\text{H}_2\text{SO}_4$  对总的硫酸盐的贡献, 式中  $a$  和  $b$  分别为  $\text{H}_2\text{SO}_4$  和  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  的浓度 ( $\text{mol}/\text{dm}^3$ )。利用标准

大气和其它文献资料所作的计算情况 10 也列在表 2 中。

### 三、计算结果与讨论

模式计算的结果分情况叙述如下:表 2 中情况 2 和 5 是与文献[6]的计算结果相同,这里就不加讨论了。

情况 1:这是考虑云的液态含水量  $w$  变化对云水 pH 的影响。如图 1 所示,云水中  $[H^+]$ 、 $[SO_4^{2-}]$ 、 $[NH_4^+]$ 、 $[NO_3^-]$  和  $[Cl^-]$  在强酸性条件下都随云含水量的增大而减小,即其 pH 值随云含水量的增大而增加,且曲线斜率的绝对值也随云含水量的增大而减少,即当云含水量较小时,  $[H^+]$  等对含水量的变化较敏感,而当云含水量较大时,它们对含水量变化的敏感程度减小。

表 2 气体和气溶胶的初始浓度以及云含水量

情 况	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$P_{SO_2}^{\circ}$ (atm)	$2 \times 10^{-8}$	$2 \times 10^{-8}$	$2 \times 10^{-8}$	$2 \times 10^{-8}$	可变	$1.4 \times 10^{-7(10)}$				
$P_{NH_3}^{\circ}$ (atm)	$2 \times 10^{-8}$	$2 \times 10^{-8}$	$2 \times 10^{-8}$	可变	$2 \times 10^{-9}$	$4.0 \times 10^{-9(17)}$				
$P_{HCl}^{\circ}$ (atm)	$10^{-9}$	$10^{-9}$	$10^{-9}$	$10^{-9}$	$10^{-9}$	$10^{-9}$	可变	$10^{-9}$	$10^{-9}$	$1.2 \times 10^{-9(18)}$
$P_{CO_2}^{\circ}$ (atm)	$3.3 \times 10^{-4}$	可变	$3.3 \times 10^{-4}$	$3.3 \times 10^{-4}$	$3.3 \times 10^{-4}$	$3.35 \times 10^{-4(17)}$				
$P_{HNO_3}^{\circ}$ (atm)	$5 \times 10^{-9}$	$5 \times 10^{-9}$	$5 \times 10^{-9}$	$5 \times 10^{-9}$	可变	$5 \times 10^{-9}$	$5 \times 10^{-9}$	$5 \times 10^{-9}$	$5 \times 10^{-9}$	$6 \times 10^{-11(17)}$
$m_s$ ( $\mu g/m^3$ )	20	20	20	可变	20	20	20	20	20	0
$m_s^*$ ( $\mu g/m^3$ )	0.6	0.6	可变	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0.6	0
$R = \frac{a}{a+b}$	0.5	可变	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	—
$w$ ( $g/m^3$ )	可变	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	可变

\*  $m_s$  为气溶胶  $NO_3^-$  的浓度。

云的液态含水量  $w$  是云物理的重要参数之一,不同地区,不同季节,不同类型的云,甚至同一块云的不同部位,云含水量  $w$  也是不同的。由此可知,云水酸化的程度既与云含水量相关,故也随地区、季节以及云型的不同而异。

情况 3:这种情况是考虑在强酸性条件下空气中硝酸盐气溶胶粒子浓度对云水酸度的影响。由计算结果得到在强酸性条件下,空气中硝酸盐气溶胶粒子浓度在  $10^{-1} \mu g/m^3$  量级上变化时,对本模式中的云水酸度影响不大。但这并不是说它们对云水酸化没有影响,随着云水体系酸性的降低,硝酸盐气溶胶粒子浓度的增加,其作用就会显得明显了。

情况 4:这是在其它条件固定,改变空气中硫酸盐气溶胶的浓度,且假定其中一半是硫酸另一半是硫酸铵,云水中  $[H^+]$  等的变化情况。如图 2 所示,  $[H^+]$ 、 $[SO_4^{2-}]$  和  $[NH_4^+]$  随  $m_s$  (硫酸盐气溶胶粒子浓度) 的增加而增加,且  $[H^+]$  对  $m_s$  的斜率不随云水中  $[SO_4^{2-}]$  的大小而变化,如表 3 所示;而云水中  $[NO_3^-]$  和  $[Cl^-]$  不依赖于  $m_s$ 。

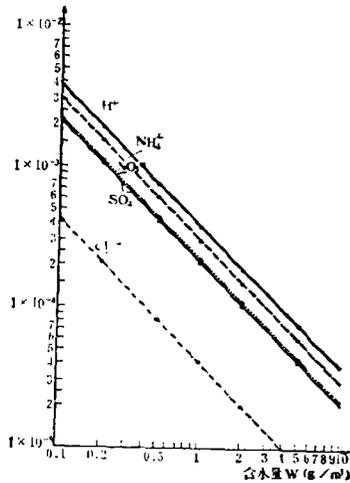


图 1 离子浓度与云含水量关系

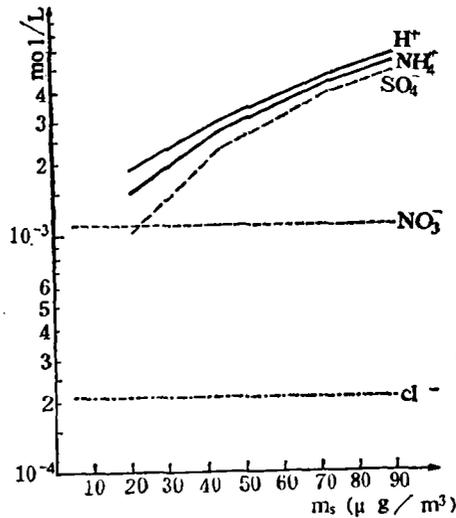


图 2 离子浓度与硫酸盐含量关系

表 3 [H<sup>+</sup>] 随 m<sub>s</sub> 的改变率

m <sub>s</sub> 变化区间 ( $\frac{\mu\text{g}}{\text{m}^3}$ )	13—23	23—33	33—43	43—53
$\frac{\Delta[\text{H}^+]}{\Delta m_s} (\frac{\text{mol}/\text{dm}^3}{\mu\text{g}/\text{m}^3})$	$10^{-4}$	$10^{-4}$	$10^{-4}$	$10^{-4}$

情况 6, 这是大气中 CO<sub>2</sub> 初始浓度改变对云水酸化的影响情况。计算结果表明, 在强酸性条件下, 大气中 CO<sub>2</sub> 初始浓度的变化对云水 [H<sup>+</sup>] 没有什么影响, 同时云水中 [SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>], [NH<sub>4</sub><sup>+</sup>], [Cl<sup>-</sup>] 也不受其值变化的影响。说明 CO<sub>2</sub> 对云水酸化并不起主要作用。

情况 7, 这是考虑云空气中 HCl 气体初始值 P<sub>HCl</sub><sup>0</sup> 变化对云水酸度的影响。由图 3 可以看出, 当 P<sub>HCl</sub><sup>0</sup> 为零时, 云水 pH 为 2.8, 当 pH=10<sup>-9</sup>atm 时, 云水 pH=2.7; 当 P<sub>HCl</sub><sup>0</sup>=10<sup>-8</sup>atm 时, 云水 pH=2.4。表明云水酸度随 HCl 初始值的增加而上升, 且 [H<sup>+</sup>] 对 P<sub>HCl</sub><sup>0</sup> 变化的斜率不随 P<sub>HCl</sub><sup>0</sup> 或云水中的 [H<sup>+</sup>] 的大小变化。此外, [Cl<sup>-</sup>] 值也随 P<sub>HCl</sub><sup>0</sup> 增大而增大, 且增大的速率比 [H<sup>+</sup>] 的增大速率快。因此可以推断, 云水中 Cl<sup>-</sup> 离子除以 HCl 形式存在外, 还有一些其它氯化物存在。而 [NH<sub>4</sub><sup>+</sup>], [NO<sub>3</sub><sup>-</sup>] 和 [SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>] 并不随 P<sub>HCl</sub><sup>0</sup> 的变化而变化。

情况 8, 这是考虑云空气中 NH<sub>3</sub> 初始值 P<sub>NH<sub>3</sub></sub><sup>0</sup> 变化对云水 pH 影响的情况。计算得到云水中的 [NH<sub>4</sub><sup>+</sup>] 随 P<sub>NH<sub>3</sub></sub><sup>0</sup> 的增加而增加, 而 [H<sup>+</sup>] 随着 P<sub>NH<sub>3</sub></sub><sup>0</sup> 的增加而减少, 且随着 P<sub>NH<sub>3</sub></sub><sup>0</sup> 的变化, 两者的变化速率的符号相反, 绝对值相等, [H<sup>+</sup>] 与 [NH<sub>4</sub><sup>+</sup>] 之和不随 P<sub>NH<sub>3</sub></sub><sup>0</sup> 的变化而变化, 如表 4 所示。这说明云水中阴离子总当量浓度不变。

情况 9, 这是考虑云空气中 SO<sub>2</sub> 初始分压值变化对强酸性云水 pH 的影响。由计算结果得出, [H<sup>+</sup>], [SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>], [NH<sub>4</sub><sup>+</sup>], [NO<sub>3</sub><sup>-</sup>] 和 [Cl<sup>-</sup>] 均不随 SO<sub>2</sub> 初始值的变化而变化。这一点似乎出乎意外地极不合理, 实际上, 这是由于强酸性云水抑制了其对 SO<sub>2</sub> 的吸收, 并且使用原模式的假定, 即未考虑 SO<sub>2</sub> 在云内的氧化转化。如前所述, 这是该模式的局限之

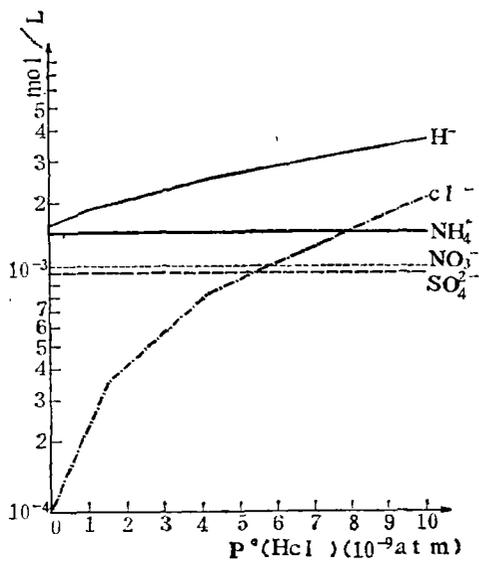
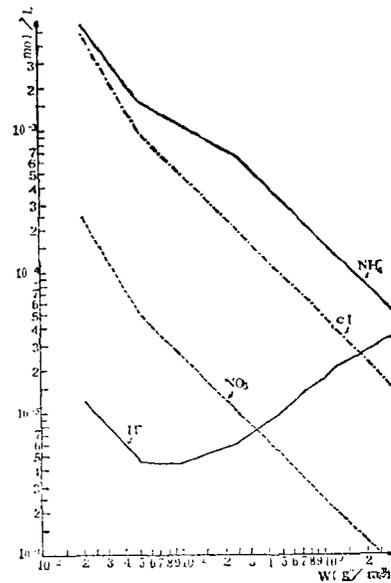
图 3 离子浓度与  $P_{\text{HCl}}^{\circ}$  的关系

图 4 离子浓度与云含水量关系

表 4 云水中  $[\text{H}^+]$  和  $[\text{NH}_4^+]$  与  $P_{\text{NH}_3}^{\circ}$  的关系

$P_{\text{NH}_3}^{\circ}(\text{atm})$	$1.2 \times 10^{-9}$	$2.4 \times 10^{-9}$	$3.6 \times 10^{-9}$	$4.8 \times 10^{-9}$	$6.0 \times 10^{-9}$	$9.0 \times 10^{-9}$
$[\text{H}^+](\text{mol}/\text{dm}^3)$	$2.0 \times 10^{-3}$	$1.8 \times 10^{-3}$	$1.6 \times 10^{-3}$	$1.3 \times 10^{-3}$	$1.0 \times 10^{-3}$	$4.3 \times 10^{-4}$
$[\text{NH}_4^+](\text{mol}/\text{dm}^3)$	$1.4 \times 10^{-3}$	$1.6 \times 10^{-3}$	$1.8 \times 10^{-3}$	$2.1 \times 10^{-3}$	$2.4 \times 10^{-3}$	$3.0 \times 10^{-3}$
$[\text{H}^+] + [\text{NH}_4^+](\text{mol}/\text{dm}^3)$	$3.4 \times 10^{-3}$					

处。

情况 10：这是利用文献[7—9]的资料作为大气中微量气体初始浓度，且假定  $m_s$  和  $m_n$  为零情况下，计算云体系酸度与云含水量的关系，如图 4 所示。

由图 4 可以看到，在该情况下， $[\text{NH}_4^+]$ 、 $[\text{Cl}^-]$  和  $[\text{NO}_3^-]$  都随云含水量增加而减小，而  $[\text{H}^+]$  先随云含水量增大而减小，即酸度先随云含水量增大而减小，在  $w = 0.1 \text{ g}/\text{m}^3$  附近出现一极小值，然后随云含水量增加而增加，即酸度又随云含水量增加而增加，或者说，pH 值又随云含水量增加而降低。与情况 1 比较可知，强酸性云水体系随  $w$  增加酸度单调下降。由此可见，含水量对云水酸度的影响还与原体系情况有关。

从计算的结果来看，pH 的变化幅度如下：当  $w = 0.02 \text{ g}/\text{m}^3$  时，云水 pH = 4.91； $w = 0.1 \text{ g}/\text{m}^3$ ，云水 pH = 5.35；而当  $w = 3 \text{ g}/\text{m}^3$  时，云水 pH = 4.50。表 5 列出了我们计算的一种结果。

情况 11：酸、碱性气体初始浓度同情况 10，并假定云空气中含有硫酸和硫酸盐气溶胶，当它们各占总量的一半时，计算不同的气溶胶浓度条件下云水的酸度，计算结果指出云水酸度随  $m_s$  增大而增大，当固定云含水量为  $0.2 \text{ g}/\text{m}^3$  时，取  $m_s = 10 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ，云水 pH = 4.36，若取  $m_s = 25 \mu\text{g}/\text{m}^3$ ，则云水 pH = 3.13。表明云水酸化对硫酸和硫酸盐气溶胶是很敏感的。

情况 12, 酸、碱性气体的初始浓度同情况 10, 并假定云空气中含有硝酸盐气溶胶, 计算不同气溶胶浓度条件下云水的 pH。计算结果表明, 总的趋势是云水酸度随硝酸盐气溶胶  $m_n$  浓度的增大而增加。由于一般情况下  $m_n$  的浓度比  $m_s$  的浓度小 1—2 个量级, 因而对云水酸度的影响不如硫酸盐气溶胶那样明显。

表 5 情况 10 计算的一种结果

大气中初始值		计 算 结 果	
		云 空 气 中	
SO <sub>2</sub>	$1.4 \times 10^{-7}(\text{atm})$	SO <sub>2</sub>	$1.378 \times 10^{-7}(\text{atm})$
NH <sub>3</sub>	$4.0 \times 10^{-9}(\text{atm})$	NH <sub>3</sub>	$5.529 \times 10^{-10}(\text{atm})$
HNO <sub>3</sub>	$6.0 \times 10^{-11}(\text{atm})$	HNO <sub>3</sub>	$1.853 \times 10^{-17}(\text{atm})$
HCl	$1.2 \times 10^{-8}(\text{atm})$	HCl	$4.853 \times 10^{-17}(\text{atm})$
CO <sub>2</sub>	$3.35 \times 10^{-4}(\text{atm})$	CO <sub>2</sub>	$3.349 \times 10^{-4}(\text{atm})$
W	0.25g/m <sup>3</sup>	云 水 中	
		pH	5.197
		H <sup>+</sup>	$6.343 \times 10^{-8}(\text{mol}/\text{dm}^3)$
		OH <sup>-</sup>	$1.678 \times 10^{-8}(\text{mol}/\text{dm}^3)$
		HSO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	$3.614 \times 10^{-4}(\text{mol}/\text{dm}^3)$
		SO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	$3.969 \times 10^{-9}(\text{mol}/\text{dm}^3)$
		NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	$9.983 \times 10^{-9}(\text{mol}/\text{dm}^3)$
		NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	$5.735 \times 10^{-4}(\text{mol}/\text{dm}^3)$
		HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	$8.44 \times 10^{-7}(\text{mol}/\text{dm}^3)$
		CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	$6.952 \times 10^{-12}(\text{mol}/\text{dm}^3)$
		Cl <sup>-</sup>	$1.996 \times 10^{-4}(\text{mol}/\text{dm}^3)$
		I	$5.83 \times 10^{-4}(\text{mol}/\text{dm}^3)$
		$\gamma_{+}, \gamma_{-}$	0.9728
		$\gamma_{2+}, \gamma_{2-}$	0.8957

综合上述模式计算结果表明, 空气中存在的气态 HNO<sub>3</sub> 和 HCl, 成云后几乎全被云水吸收, 99% 以上的 NH<sub>3</sub> 也被云水吸收; 而 SO<sub>2</sub> 和 CO<sub>2</sub> 被云水吸收得很少, 云水中 HSO<sub>3</sub><sup>-</sup>, SO<sub>3</sub><sup>2-</sup>, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> 和 CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> 的浓度很小。在酸性条件下, 影响云水酸度的主要因子有: (1) 空气中 HCl, HNO<sub>3</sub> 和 NH<sub>3</sub> 气体的初始浓度; (2) 硫酸气溶胶的浓度; (3) 云体系本身的酸度状况; (4) 云含水量的大小。

#### 四、结 束 语

由上述模式计算结果和讨论可以得到如下几点认识:

1. 云水酸化不仅与成云前空气中酸、碱性气体、气溶胶的浓度有关, 而且与云体系本身的酸度和云含水量有关。
2. 影响云水酸度的主要因子为 HCl, HNO<sub>3</sub> 和 NH<sub>3</sub> 三种气体的初始浓度以及硫酸气溶胶浓度。
3. 云内 SO<sub>2</sub> 氧化转化是一重要而又复杂的问题, 因而需要根据云内实测资料, 作出

适合实际情况各种体系的化学模式, 进一步加以深入研究。

4. 本模式尚未计入  $\text{SO}_2$  氧化转化以及其它云物理问题(如未考虑冰相, 不适用冷云), 应用上还有一定局限性。所以应把化学模式与云雾物理参数联系起来考虑。

然而, 为了清楚地了解酸雨形成机制, 有关酸雨的数值模式计算; 需要包括云内和云下清除过程, 更为详细的  $\text{H}_2\text{SO}_4$  气溶胶粒子和酸、碱性气体的垂直和水平分布和它们在大气中形成机理的资料以及环境温、湿等气象条件。因此, 大量的现场测量、实验室模拟试验以及数学模式计算工作尚有待深入探讨。

### 参 考 文 献

- [1] 江研因等, 上海市区降雨酸度及若干离子含量的测定, 环境科学, 2(2), 54—56, 1981。
- [2] 莫天麟等, 南京市降水酸度的初步研究, 气象学报, 39(4), 460—464, 1981。
- [3] 徐渝等, 重庆市降水酸度与空气污染的相关性, 环境化学, 1(3), 208, 1982。
- [4] 熊际翎, 贵阳市降雨酸度的初步研究, 环境化学, 1(3), 201—207, 1982。
- [5] 张延毅等, 武汉市降水酸度的初步研究, 环境科学 4(2), 57—59, 1983。
- [6] Ohta, s., et al., A numerical model of acidification of cloud water, *J. Meteo. Soc. Japan*, 59 (6), 892—901, 1981。
- [7] 美国国家海洋局和大气局, 国家宇航局和美国空军部, 标准大气(美国, 1976), 41—45, 科学出版社, 1982。
- [8] Cicerone, R. J., Halogens in the Atmosphere, *Rev. Geophys. space phys.*, 19 (1), 123—139, 1981。
- [9] G.M. 马斯特斯, (程俊人译), 环境科学技术导论, 192, 科学出版社, 1982。
- [10] Okita, T., et al., Acid Rain, Analysis of Mechanism of Air pollution, Suzuki T. ed. Sangy Toshyo, 203—231(in Japanese), 1980。

## THE CALCULATION OF NUMERICAL MODEL OF ACIDIFICATION OF CLOUD WATER

Mo Tianlin    Deng Zhenqin

(Department of Atmospheric Sciences, Nanjing University)

### Abstract

The numerical model calculation is conducted on the acidity of cloud water under the assumption that the cloud droplets formed on  $\text{H}_2\text{SO}_4$  and other sulfate and nitrate nuclei dissolve acidic and alkaline gases to achieve gas-liquid equilibrium in a very short time. The calculating result shows that the acidification of cloud water is not only related to the initial concentration of acidic and alkaline gases and particulate components in cloud air, but also is related to liquid water content in the cloud.