

Таблица 1

Доказательство и опровержение утверждений

$s \Rightarrow p$	$\overline{p} \Rightarrow \overline{s}$	$\overline{s} \Rightarrow p$	$\overline{p} \Rightarrow s$	$s \Rightarrow \overline{p}$	$p \Rightarrow \overline{s}$	$\overline{s} \Rightarrow \overline{p}$	$p \Rightarrow s$
T $s \rightarrow p = 1$	$f_{оп} = 0$ $\overline{p} \rightarrow \overline{s} = 1$	T $\overline{s} \rightarrow p = 1$	$f_{оп} = 0$, $\overline{p} \rightarrow s = 1$	$f_{зак} = 0$	$f_{зак} \in (0,1)$	$f_{зак} = 0$	$f_{зак} \in (0,1)$

Решение (таблица 1). Введем в ЭВМ модель знания $w_{10}(s, p) = 1$:

$$w_{10}(s, p) = k(3,1) = sp \vee \overline{s}p =$$

$$(\overline{s} \vee p)(s \vee p) = p =$$

$$= \underline{(s \rightarrow p)(\overline{s} \rightarrow p)} = \underline{(\overline{p} \rightarrow \overline{s}) * (\overline{p} \rightarrow s)*} = 1.$$

Выражения $s \Rightarrow p$ и $\overline{s} \Rightarrow p$ представляют собой теоремы, обратно-противоположные к ним выражения $\overline{p} \Rightarrow \overline{s}$ и $\overline{p} \Rightarrow s$ теоремами не являются, поскольку в них $f_{оп} = 0$. Утверждения $p \Rightarrow \overline{s}$ и $p \Rightarrow s$ теоремами также не являются, в них при $f_{оп} = 1$ на наборах $(s, p) = (1,1)$ и $(s, p) = (0,1)$ заключение $f_{зак} = 0$. Утверждения $p \Rightarrow \overline{s}$ и $p \Rightarrow s$ превратятся в теоремы только тогда, когда из их областей определения будут удалены эти наборы.

В настоящее время актуальной задачей является разработка оптимальных с позиции пользователя программ реализации универсальных алгоритмов.

Литература

1. Дулепов Е.Г. Логика как инструмент исследования знаний // Системы. Методы. Технологии. 2009. № 1. С. 65-68.
2. Акимов Е.О. Дискретная математика: логика, группы, графы, фракталы. М.: Акимов Е.О., 2005. 645 с.
3. Gentzen K. Untersuchungen über das logische Dchlissen, Math. Zeitschrift, 1934-1935. Т. 39.
4. Куликов Д.О. Программная реализация алгоритма профессора Дулепова // Материалы всерос. науч. метод. конф. Братск, 2005. Ч.1. С. 91-94.

УДК 535.34; 541.15

Т.В. Губарева

РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ГЕТЕРОГЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТМОСФЕРНОГО АЭРОЗОЛЯ

Рассмотрены особенности физического моделирования гетерогенных процессов атмосферного аэрозоля. Приведена структура экспериментально-исследовательского комплекса, разработанного для исследования гетерогенных процессов, стимулированных ионизирующими излучениями. Описаны особенности проведения процессов, а также основные методики исследования для получения экспериментальных данных.

Ключевые слова: физическое моделирование, гетерогенные процессы, вторичный радиоактивный аэрозоль, аэрозольные частицы, оптические свойства, структура кристаллов.

В области метеорологии и климатологии вторая половина XX века ознаменовалась бурным развитием наук об атмосфере, прогнозированием атмосферных и климатических изменений. При этом климатологи в своей деятельности активно используют физико-химические методы исследования [1, 2]. Доклады Межправительственной группы экспертов изменения климата (МГЭИК) отражают возрастающее понимание климатологами всего мира большого значения учета химических, геохимических и биогеохимических процессов в климатической системе Земли для описания изменения климата [3]. В одном из первых

обзоров о состоянии российских исследований в области атмосферной химии [4] описаны гетерогенные процессы в тропосфере, играющие ключевую роль в образовании кислотных дождей и в изменении параметров озонового слоя Земли. Огромное значение для понимания и описания локальных, региональных и глобальных климатических и экологических составляющих имеет изучение химии атмосферы. Описание и классификация аэрозольных эффектов в атмосфере связана со свойствами аэрозолей и с временными и пространственными масштабами изучаемых процессов. Поэтому разработка моделей климата является

ся трудной задачей. Это связано с необходимостью учета гидродинамических и физических процессов, а также химических реакций, протекающих в такой сложной гетерогенной среде, как атмосфера [5].

Представление о стратегии моделирования влияния аэрозолей на атмосферные процессы дает рис. 1. Из приведенной схемы следует, что лабораторные эксперименты обеспечивают данные для лучшего понимания процессов в аэрозоле и определяют модели этих процессов. Полевые изучения обеспечивают данные для проверки модели процесса. Набор всех моделей процесса, управляющих циклами аэрозолей, применяется к региональным моделям атмосферы. Полученные объединенные модели также оцениваются по данным полевых исследований. Модели процесса применяются к глобальным моделям после оценки полевыми и спутниковыми данными.

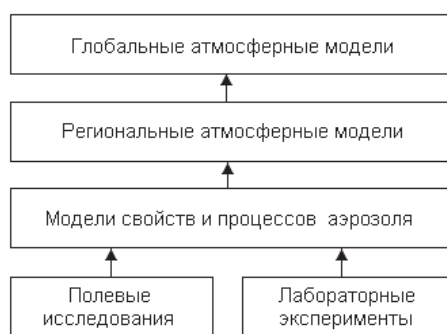
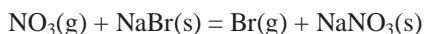
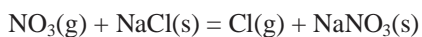


Рис. 1. Стратегия для улучшения представлений свойств аэрозоля и процессов в моделях климата.

Наиболее важные достижения в области атмосферной химии последних лет связаны с изучением гетерогенных процессов, протекающих с участием аэрозольных частиц и играющих важную роль в образовании кислотных дождей, а также в разрушении озонового слоя. В связи с наблюдаемыми аномалиями концентрации озона в прибрежных морских зонах авторами работ [6, 7] были проведены лабораторные эксперименты. Методом масс-спектрометрии были исследованы механизмы захвата газов-реактивов NO_3 и ClNO_2 на покрытиях, имитирующих морские аэрозоли. Получены данные вероятности захвата газов-реактивов на покрытиях в зависимости от внешних условий: концентрации газа-реактива, относительной влажности, температуры и состава солевого покрытия. Предложена модель процесса, обусловленного реакциями, приводящими к прямому выделению в газовую фазу разрушающих озон галогенов:



Радиоактивность всегда присутствует в атмосфере. Наибольший вклад в атмосферную радиоактивность вносят источники, имеющие естественное происхождение: космические лучи, естественная радиоактивность земли и радиоактивные продукты распада радона в воздухе. Источниками искусственной радиоактивности являются атомные электростанции, промышленные предприятия и средства обслуживания исследований. Эта эмиссия является очень маленькой в нормальных условиях, однако большие количества радиоактивных веществ могут быть выброшены в окружающую среду во время аварий.

В изучении атмосферной радиоактивности можно выделить три самостоятельных направления. Первое направление занимается исследованием выделения эманаций радона и торона из почвы и образования в атмосфере продуктов их распада. Долгоживущие продукты распада, такие, как RaD и RaF , могут быть использованы в качестве трассеров при изучении глобальной и стратосферной циркуляции атмосферы. В связи с этим проводятся измерения высотных и глобальных распределений этих продуктов. Второе направление касается изучения тех радиоактивных изотопов, которые возникают главным образом в нижней стратосфере и верхней тропосфере под действием космических лучей. В результате ядерных испытаний возникло третье направление исследований, связанное с вопросами распределения и распространения в атмосфере радиоактивных продуктов ядерных взрывов. Это направление привлекло к себе широкое внимание из-за потенциальной радиационной опасности, которую представляют собой крупномасштабные радиоактивные выпадения для человечества. Все указанные направления заметно способствовали развитию атмосферных исследований. Исследования продуктов распада торона показали, что большая их часть оседает на аэрозольных частицах, и лишь небольшая доля существует в виде первичных частиц. Детальное изучение захвата первичных радиоактивных частиц аэрозольными нерадиоактивными частицами с использованием нескольких теорий коагуляции рассмотрены в работе [8].

Гетерогенные реакции «щелочно-галогидный кристалл/атмосферный воздух» инициируются ионизирующими излучениями и описываются так же, как и в атмосферной химии в прибрежных зонах – реакциями (1) и (2), приводящими к образованию нитратов щелочных металлов и выделению галогенов в атмосферный воздух [9-11]. Их учет является обязательным для научных целей в радиационной физике твердого тела, так как они обеспечивают основную информацию для эффектов доз облучения кристаллов, находящихся в ходе эксперимента в контакте с атмосферным воздухом. Эти исследования обеспечивают широкую перспективу для междисциплинарной темы. До настоящего времени активное воздействие

ионизирующих излучений на гетерогенные процессы аэрозолей в атмосферной химии не исследовано. Поэтому гетерогенные процессы в системе «щелочно-галогидный кристалл/атмосферный воздух», инициированные ионизирующими излучениями, могут внести вклад в атмосферную гетерогенную химию. Определение таких механизмов необходимо для понимания гетерогенных процессов с участием радиоактивного аэрозоля в глобальных и региональных масштабах.

В данной работе разработана методология, помогающая установить набор факторов, актуальных для реальной атмосферы и активно влияющих на гетерогенные процессы в модельной системе «аэрозольная частица/атмосферный воздух». В науке любой эксперимент, производимый для выявления закономерностей изучаемого явления, представляет собой моделирование. Объектом исследования является конкретная модель, обладающая необходимыми физическими свойствами. В ходе эксперимента должны выполняться основные требования, предъявляемые к физическим моделям. К физическому моделированию прибегают, потому что натурные испытания очень трудны или их невозможно осуществить. Физическое моделирование состоит в замене изучения некоторого объекта или явления экспериментальным исследованием его модели, имеющей ту же физическую природу. В настоящей работе моделируется процесс активного воздействия ионизирующего излучения радиоактивных компонентов аэрозоля на стимулирование гетерогенных реакций частица/воздух. Разработанная физическая модель (рис. 2) включает ионизирующее излучение, щелочно-галогидные кристаллы и газовую фазу.



Рис. 2. Физическая модель для изучения воздействия ионизирующего излучения на гетерогенные реакции кристалл/газовая фаза.

Кристаллы для моделирования атмосферных аэрозольных частиц. Для изучения гетерогенных процессов подбирались микрокристаллы, близкие по химическому составу и размерам к

атмосферным аэрозольным частицам. Известно, что атмосферные аэрозольные частицы существуют в масштабе широкого диапазона размеров от 10^{-4} мкм ($1 \text{ мкм} = 10^{-4} \text{ см}$) до 100 мкм и классифицируются (в зависимости от размеров) следующим образом: ядра Айткена (10^{-4} мкм – 10^{-1} мкм), большие частицы (10^{-1} мкм – 1 мкм) и гигантские частицы (1 мкм – 100 мкм) [8]. Аэрозольная щелочно-галогидная частица, находящаяся на волокнистом фильтре, показана на рис. 3.



Рис. 3. Изображение атмосферной аэрозольной щелочно-галогидной частицы, находящейся на волокнистом фильтре.

Для моделирования щелочно-галогидных аэрозольных частиц использовались мелкодисперсные кристаллы: порошки, микрокристаллы после кристаллизации растворов на стеклянной подложке и микрокристаллы в нитевидной форме. Исследовался гомологический ряд щелочно-галогидных солей квалификации «ос. ч.», имеющих состав MX, где M – щелочной металл, X – галоген. Эти соли показаны в таблице 1.

Таблица 1

Соли для исследования

Катион/анион	Cl	Br	I
Na	NaCl	NaBr	NaI
K	KCl	KBr	KI
Rb	RbCl	RbBr	RbI
Cs	CsCl	CsBr	CsI

Микрокристаллы подготавливались следующими способами:

- получением порошков измельчением солей,
- выращивание микрокристаллов путем кристаллизации из водного раствора соответствующей соли на стеклянной подложке,
- выращивание микрокристаллов через пористую перегородку в нитевидной форме.

Многие задачи в настоящей работе решались с использованием образцов в виде порошков, что позволило увеличить удельную поверхность образцов. Измельчением называется механический процесс деления твердого тела на части за счет приложения внешних сил. Измельчение производят методами удара, раздавливания и истирания. Приготовление порошков MX проводилось мето-

дом истирания солей МХ в агатовой ступке. Растирание проводилось не менее 10 минут для получения микрокристаллов (порошков) размером примерно 10 мкм. Этот метод подготовки имеет недостатки, связанные с возможностью внесения изменений в образцы за счет проявления механохимических эффектов.

Микрокристаллы получались также выращиванием путем кристаллизации из водного раствора соответствующей соли на стеклянной подложке. Для этого капля водного раствора нужной соли наносилась на стеклянную пластинку. После испарения воды на стекле можно получить мелкие кристаллы. Они имеют хорошую огранку, часто ориентированы определенным образом на подложке. Размеры таких микрокристаллов составляют примерно 10 мкм.

Особенно перспективными для исследований оказались нитевидные кристаллы (НК) – микроскопические монокристаллы, размеры которых в одном направлении во много раз больше, чем в остальных (типичная длина 1-10 мм, диаметр более 1-2 мкм). Обычно НК МХ растут в определенных кристаллографических направлениях (например, по нормали к плотноупакованной грани); имеют квадратное сечение; встречаются также тонкие ленточки и пластины (толщиной 0,1-10 мкм, шириной 0,1-1 мм). Большой диапазон размеров и высокая химическая чистота НК часто используются для исследования различных эффектов.

Существует более десятка методов выращивания НК. Известен целый ряд способов получения НК МХ: метод кристаллизации через пористую перегородку, метод конденсации из газовой фазы, метод получения из массивных образцов путем раскола и путем последовательного растворения крупных кристаллов в соответствующих водных растворах и другие. В настоящей работе использовался метод Амелинкаса, который заключается в получении НК при испарении через пористую перегородку из пересыщенного водного раствора солей МХ. Скорости роста НК в длину во много раз больше, чем в случае обычных кристаллов. При росте НК из растворов существенную роль играют винтовые дислокации: вершина или основание растущего НК имеют нарастающую ступеньку, воспроизводящую себя по мере поступления вещества к поверхности НК. НК обладают рядом уникальных свойств: они практически не имеют дефектов и их прочность близка к теоретическому пределу и может превосходить прочность обычных монокристаллов в 10^2 - 10^3 раз [12].

Выращивание микрокристаллов в нитевидной форме через пористую перегородку требует приготовления насыщенного водного раствора необходимой соли, который наливался в мешочек, изготовленный из коллодиевой пленки. Стянутый нитью мешочек подвешивался в закрытом сосуде, через некоторое время его внешняя поверхность

покрывалась сетью НК, которые легко осыпались при встряхивании. Из осыпавшихся кристаллов проводился отбор кристаллов для исследований.

Источниками излучения в экспериментах служила рентгеновская трубка БСВ-2 с медным антикатодом и трубка БХВ-7 с хромовым антикатодом. Питание трубок осуществлялось от рентгеновского аппарата УРС-60. Для проведения экспериментов использовались различные режимы работы рентгеновских трубок. Для трубки БСВ-2 использован режим: $U=45$ кВ, $I=20$ мА; для трубки БХВ-7: $U=30$ кВ, $I=10$ мА. Величина мощности экспозиционной дозы при работе в заданных режимах и при неизменном расположении образцов относительно окна трубки составляла $2 \text{ Р}\cdot\text{с}^{-1}$ и $500 \text{ Р}\cdot\text{с}^{-1}$ для трубки БСВ-2 и БХВ-7 соответственно. Дозиметрические измерения были выполнены дозиметром ИДМД-1. Измеренная для условий экспериментов мощность излучения составляла $830 \text{ Р}\cdot\text{с}^{-1}\cdot\text{см}^{-2}$ (для трубки БХВ-7) и $3 \text{ Р}\cdot\text{с}^{-1}\cdot\text{см}^{-2}$ (для трубки БСВ-2).

Исследуемые кристаллы помещались в реактор и облучались рентгеновскими лучами, а затем проводилось исследование методами, показанными на рис. 4.



Рис. 4. Методы контроля свойств микрокристаллов в процессе гетерогенного взаимодействия.

Для нахождения оптических характеристик (поглощения) микрокристаллов, облученных рентгеновским излучением, использовались спектрально-абсорбционные методы анализа в инфракрасной (ИК), видимой и ультрафиолетовой (УФ) области. Измерение ИК-спектров проводилось с применением образцов в виде порошков, спрессованных в таблетки. ИК-спектры измерялись с помощью спектрофотометров UR-10, UR-20 и Perkin Elmer 2000 в сравнении с исходными необлученными материалами. Для идентификации полос поглощения использовались данные [13]. Измерение спектров поглощения в области 200-800 нм производилось с помощью микроспектрофотометра СФ-4. Для проведения измерений исполь-

зовались отдельные микрокристаллы в нитевидной форме.

Заключение. Исследование разработанной физической модели показало, что под влиянием активного воздействия даже относительно небольших доз ионизирующего излучения на систему «кристалл МХ/атмосферный воздух» естественная химическая устойчивость кристалла нарушается, и в дальнейшем развивается химический процесс, рассматриваемый в атмосферной химии как характерный для трансформации щелочно-галоидных частиц в загрязненных промышленных выбросах – оксидами азота – регионах.

Атмосферные циклы аэрозоля зависят от их взаимодействия с экосистемами поверхности океана и суши так же, как и непосредственно с водной средой океана. Глобальный мониторинг атмосферной радиоактивности однозначно указывает на наличие факторов, формирующих вторичные радиоактивные аэрозольные частицы. Нерадиоактивные аэрозольные частицы переносят 95 % всей атмосферной радиоактивности. Исследование модели показало целесообразность изучения физических и химических атмосферных процессов на основе исследований, включающих теоретические и экспериментальные работы из смежных областей науки, таких как радиационная физика ионных кристаллов. Исследование разработанной модели обеспечивает широкую перспективу междисциплинарной темы, связанной с изучением гетерогенных реакций в атмосфере, стимулированных высокоэнергетическими факторами, например ионизирующим излучением.

Литература

1. Seinfeld J.H., Pandis S.N. Atmospheric Chemistry And Physics: From Air Pollution To Global Climate Change. N.Y.: Wiley, 1998. 1325 p.
2. Гинзбург А.С., Губанова Д.П., Минашкин В.М. Влияние естественных и антропогенных аэрозолей на глобальный и региональный климат // Рос. хим. журн. 2008. Т. 52, № 5. С. 112-119.
3. Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Eds. S. Solomon, D. Qin, M. Manning, Z. Chen, M. Marquis, K.B. Averyt, M. Tignor, H.L. Miller. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA. 2007.
4. Ларин И.К. Российские исследования в области атмосферной химии // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2004. Т. 40, № 5. С. 712 - 720.
5. Кондратьев К.Я. От нано- до глобальных масштабов: свойства, процессы образования и последствия воздействий атмосферного аэрозоля.
7. Аэрозольное радиационное возмущающее воздействие и климат // Оптика атмосферы и океана 2005. Т. 18. № 07. С. 535–556.
6. Кинетические механизмы захвата атмосферных газов поверхностями морских солей. V. Захват NO_3 на покрытия, осаждённом из смеси солей $\text{MgCl}_2/6\text{H}_2\text{O}$ и NaCl / В.В. Зеленов [и др.] // Химическая физика. 2004. Т. 23. № 1. С. 18-26.
7. Кинетические механизмы захвата атмосферных газов поверхностями морских солей. VII. Захват ClNO_2 поверхностью сухой соли NaCl / В.В. Зеленов // Там же. 2006. Т. 25, № 1. С. 35-49.
8. Юнге Х. Химический состав и радиоактивность атмосферы. М.: Мир. 1965. 424 с.
9. Губарева Т.В. Исследование радиационных изменений поверхности ионных нитевидных кристаллов: дис. ... канд. физ.-мат. наук. Рига, 1979. 160 с.
10. Александров А.Б. и др. Введение в радиационную физикохимию поверхности щелочно-галоидных кристаллов / А.Б. Александров. Рига: Зинатне, 1989. 244 с.
11. Gubareva T.V., Korobetsky I.A., Shudrikov E.S. Complex laboratory studies of the marine aerosols: Proc. of SPIE of VII Intern. Symp // Atmospheric and Oceanic Optics. 2000. Vol. 4341. P. 544–549.
12. Бережкова Г. В. Нитевидные кристаллы. М., 1969. 150 с.
13. Накамото К. Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений. М.: Мир, 1991. 430 с.