

Moln, molekyler och miljöundervisning

Thomas Hede, fil. lic., gymnasielärare i kemi och matematik på grundskolan Maestroskolan, forskarstuderande vid Meteorologiska institutionen, Stockholms universitet

Klimatet på jorden håller gradvis på att förändras och människan är en del av orsaken till detta. Det är forskarna bakom rapporten AR4 från IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change) ense om (IPCC, 2007). Genom att samla all tillgänglig kunskap inom detta område och, med denna som bakgrund, simulera hur klimatet utvecklas i framtiden med så kallade GCMs (General Circulation Models) kan vi få en fingervisning om vad som väntar. Självfallet kan inte en så komplex bild tas med i detalj, utan den måste *parameteriseras* det vill säga förenklas och omvandlas till en modell. I detta ligger en del av svagheten, och IPCC hävdar att den största osäkerheten rör moln och molnbildning (IPCC, 2007).



Thomas Hede

MOLN ÄR VIKTIGA i energibalansen då de både reflekterar inkommande solljus (så kallad albedo) samt fångar upp och återsänder jordens utgående värmestrålning (så kallad växthuseffekt) (Wallace & Hobbs, 2006). Å andra sidan är moln så pass små, så att om man delar in jorden på det sätt som man gör i en GCM, i ett rutnät med rutor på ca 110 km i kvadrat, betyder detta att det ryms många moln av olika sort i varje ruta!

Moln bildas genom att avdunstande vattenånga kondenseras till molndroppar. Detta sker då den relativa luftfuktigheten är hög. Faktum är att det krävs långt över 100 procent relativ luftfuktighet (så kallad övermättnad) för att vattenånga ska kunna kondensera. Finns det däremot nano- till mikroströra partiklar i luften, till exempel i aerosoler, så underlättas molnbildningen genom att övermättnaden som krävs för kondensation sänks kraftigt.

Dessa partiklar benämns *CCN* (Cloud Condensation Nuclei) och kan bestå av till exempel havssalt, damm, pollen, föroreningar med mera. De kemiska och fysikaliska egenskaperna hos dessa CCN påverkar hur bra de fungerar som kondensationskärnor.

Den teori som hanterar molnbildning och som ofta används i GCMs kallas *Köhlerteori* efter den svenske meteorologen Hilding Köhler som utvecklade den på trettioalet (Köhler, 1936). Teorin bygger på två termer: Raults term som behandlar lösta ämnen i molndroppen och Kelvins term som beskriver den sfäriska formens påverkan på kondensationen. Ursprungligen antog man att de lösta ämnena bestod av oorganiskt material, men på senare tid har man även tagit in organiskt material i beräkningen (t ex Novakov and Penner, 1993; Shulman m fl, 1996; Facchini m fl, 1999; Rodhe, 1999; O'Dowd, 2002; Leck & Bigg, 2005a, 2005b).

Dessa organiska ämnen komplicerar bilden av kondensationskärnornas utseende, eftersom de kan ackumuleras på ytan, aggregera inuti och på olika sätt blandas i partikeln. Bland annat kan en viktig komponent i Raults term påverkas av detta, och det är ytspänningen. Ytaktiva ämnen kan sänka ytspänningen och genom detta också sänka den övermättnad som behövs för molnbildning. Det ger i sin tur upphov till att fler, men mindre, molndroppar kan bildas och detta förändrar molnets optiska egenskaper till att bli mer reflekterande.

Molekyldynamiksimuleringar

Det är givetvis svårt att studera så små partiklar som CCN experimentellt, även om flera studier har lyckats ge goda resultat (Shulman m fl, 1996; Tuckerman, 2007; Kiss m fl, 2005). Som ett komplement till experimentella studier har vi utfört så kallade molekyldynamiksimuleringar (MD) av nanostora vattendroppar innehållande ytaktiva ämnen. MD är en metod som utvecklats i takt med datorutvecklingen och man har funnit tillämpningar inom fysik, kemi, medicin och molekylärbioologi. Metoden bygger på att beskriva ett *system* av molekyler genom deras atomers koordinater, massa och hastigheter i en datorfil. Genom att tillämpa Newtons rörelselagar och molekylära interaktioner kan man simulera i tidssteg på femtosekundskalan hur molekylerna påverkar varandra och hur de förflyttar sig inbördes. Genom att tillämpa periodiska gränsvillkoren förhindras att molekylerna rör sig ut ur boxen, i och med att de i så fall kommer in på motsatt sida igen.

MD-simuleringen genererar på detta sätt en trajektoriefil som kan analyseras och ur denna datamängd kan man beskriva egenskaper hos systemet så som tryck, temperatur, fördelning, ytspänning, ordning med mera. Vi använde MD-simuleringspaketet GROMACS (Hess m fl, 2008; Spoel m fl,

2005). De simuleringar vi gjorde tog cirka 14 dagar vardera på superdatorn Ekman.

Ytaktiva modellämnena för HULIS

Vi valde att studera ytaktiva ämnen som brukar väljas som modeller för en grupp organiska ämnen som kallas HULIS (Humic-like substances). Dessa ämnen kan bildas genom att barrträd avdunstar alfa-pinen till atmosfären. Där genomgår det oxidation av ozon eller hydroxylradikaler till cis-pinonisk syra (CPA), pinisk syra (PAD) och pinonaldehyd (PAL).

Karaktäristiskt för dessa ämnen är att de är *amfifila*, det vill säga löser sig i både fett och vatten. En del av molekylen är hydrofil och löser sig gärna i vatten, medan en annan del av molekylen är hydrofob och löser sig helt i fettliknande ämnen. Det är denna amfifila egenskap som gör ämnet ytaktivt och med möjlighet att sänka ytspänningen hos vattendroppen. Antingen samlas de på ytan av vattentestet eller så aggregerar de inuti. I båda fallen vänds de hydrofila delarna mot vattentestet och de hydrofoba delarna utåt respektive på insidan av aggregatet.

Resultat

I två artiklar (Li m fl, 2010; Hede m fl, 2011) presenteras studierna kring hur modellämnena för HULIS uppträder i vattendroppar av storleken 1 000–10 000 vattenmolekyler (1–8,6 nm i diameter). I den första artikeln visas att CPA spontant ackumulerar vid droppens yta för 1 000, 2 000 och 5 000 vattenmolekylers droppstorlek. Genom att beräkna ytspänningen kan man bestämma de så kallade Szyszkowski-parametrarna för CPA. Szyszkowski-parametrarna avgör hur kraftig ytspänningsnedsättning som uppnås vid en viss koncentration av ämnet i vattendroppen. Vi kunde i den första artikeln visa att detta är möjligt att reprodu-

cera med MD-simuleringar och att ytspänningsreduktionen är beroende av både storleken på vattendropparna och koncentrationen på ytaktivt ämne. I den andra artikeln ökades antalet vattenmolekyler till 10 000 och alla tre ytaktiva ämnen studerades (CPA, PAD och PAL). Den intressanta effekten som uppstod i dessa något större system var att de ytaktiva ämnena även aggregerade i en form av micell-liknande strukturer. Det var oväntat och hade vid den tidpunkten inte rapporterats tidigare. Senare under hösten 2010 publicerades en artikel i Nature som experimentellt fastslår liknande resultat (Virtanen, 2010).

Framtiden

I och med att MD-simuleringar körs på datorer, så är kapaciteten hos datorn avgörande för hur pass stora, detaljerade och långa simuleringar som kan vara rimliga att utföra. Datorerna har utvecklats i en hisnande hastighet från mitten av 1900-talet och utvecklingen spås att pågå i en accelererande fart framöver, vilket är mycket lovande för denna typ av forskning med hjälp av MD-simulering. Det närmsta målet är att kunna simulera droppstorlekar uppåt mikrometerskalan, dvs cirka 100 gånger större system. Simuleringstiden brukar sägas växa med kvadraten på storleken av systemet, så det krävs mycket mer kraftfulla datorer för att möjliggöra detta.

I dagsläget har ett par nya studier aktualiserats. Bland annat är vi intresserade av att studera hur de ytaktiva ämnena samverkar med oorganiska salter, eftersom experimentella studier (bl a Tuckermann, 2007, Tuckermann & Cammenga, 2004) visar på extra stora ytspänningsnedsättande effekter hos sådana blandningar. Vi är också intresserade av att studera om amfifila ämnen kan ta upp annars hydrofoba ämnen och inkludera dem i nanoaerosoler. Det skulle kunna öka reflektionen och absorptio-

nen av solljus och värmestrålning och alltså påverka energibalansen i atmosfären.

Miljöundervisning

Jag har ovan beskrivit vad min forskning har syftat till. Men det är mycket mer än själva forskningsprojektet som min del i lärarforskarskolan LKV har inneburit. Jag har genom deltagandet i kurser, studieresor, seminarier och olika samarbeten vuxit på flera olika sätt.

Genom mitt forskningsarbete vid Meteorologiska institutionen har jag fördjupat mig i bland annat meteorologi, miljökunskap, klimat- och klimatförändring och kemisk meteorologi. Detta har jag naturligtvis haft nytta av som lärare. Under en termin samlade jag de fyra NO-ämnena under projektet Miljö i två klasser i åldrarna 12–15 år på Maestro-skolan i Nacka. Vi arbetade ämnesintegrerat och mycket i olika grupper kring områden som väderlära, oceanografi, miljöproblem, energi med mera. Eleverna var till en början avvaktande och ifrågasättande, eftersom de inte alltid kunde hitta rätt i läroboken och ofta fick jag inledningsvis frågan om vilket ämne vi läste. Denna typ av nervositet (särskilt för betygen) släppte så småningom. Det underlättade nog en hel del att jag formulerade tydliga mål och innehåll för de olika momenten.

De laborativa inslagen skilde sig egentligen inte mycket från det som brukar följa med den vanliga NO-undervisningen, skillnaden var att slutsatserna och lärdomarna på ett mer naturligt sätt kunde kopplas till det pågående projektet och därför upplevdes laborationerna som mer befogade och jag tror personligen att kunskaper lättare befästs på detta sätt.

Min uppfattning var att detta ämne är engagerande och kan omfatta flera intressanta vinklingar av naturvetenskap som uppmuntrar till diskussion och självständigt tänkande. Vid ett flertal tillfällen

handlade diskussionen även om etiska problem och det är också ett viktigt ämne för en vetenskapsman, men som sällan får utrymme i vanliga undervisningsformer. Utvärderingen av denna termin visade framför allt att fler av eleverna hade fått upp intresset för naturvetenskap i allmänhet och miljö i synnerhet. Det är i vilket fall mitt främsta mål med NO-undervisning i grundskolan.

Referenser

- Facchini, M. C., Decesari, S., Mircea, M., Fuzzi, S. & Loglio, G. (2000). *Surface tension of atmospheric wet aerosol and cloud/fog droplets in relation to their organic carbon content and chemical composition*. Atmospheric Environment 34, s. 4853–4857.
- Hede, T., Li, X., Leck, C., Tu, Y. & Ågren, H. (2011). *HULIS in nanoaerosol clusters; investigations of surface tension and aggregate formation using Molecular Dynamics simulations*. Atmospheric Chemistry and Physics Discussion, 11, s. 6957–6982.
- Hess, B., Kutzner, C., van der Spoel, D. & Lindahl, E. (2008). *GROMACS 4: algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation*. Journal of Chemical Theory and Computation, 4, s. 435–447.
- IPCC (2007). Summary for Policymakers. I *Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. [S. Solomon, D. Qin, M. Manning, Z. Chen, M. Marquis, K.B. Averyt, M. Tignor & H.L. Miller (red)] Cambridge, United Kingdom & New York, NY, USA: Cambridge University Press.
- Kiss, G., Tombácz, E. & Hansson, H.-C. (2005). *Surface Tension Effects of Humic-Like Substances in the Aqueous Extract of Tropospheric Fine Aerosol*. Journal of Atmospheric Chemistry 50, s. 279–294.
- Köhler, H. (1936). *The nucleus in and the growth of hygroscopic droplets*. Transactions of the Faraday Society 32, s. 1152–1161.
- Leck, C. & Bigg, E.K. (2005a). *Biogenic particles in the surface microlayer and overlying atmosphere in the central Arctic ocean during summer*. Tellus, 57B, 305.
- Leck, C. & Bigg, E.K. (2005b). *Source and evolution of the marine aerosol – a new perspective*. Geophysical Research Letters, 32, 23651.
- Li, X., Hede, T., Tu, Y., Leck, C. & Ågren, H. (2010). *Surface-active cis-pinonic acid in atmospheric droplets: a molecular dynamics study*. Journal of Physical Chemistry Letters, 1 (4), s. 769–773.
- Novakov, T. & Penner, J. E. (1993). *Large contribution of organic aerosols to cloud condensation nuclei concentrations*. Nature 365, s. 823–826.
- O’Dowd, C. D., Aalto, P., Hämeri, K., Kulmala, M. & Hoffmann, T. (2002). *Atmospheric particles from organic vapours*. Nature 416, s. 497–498.
- Rodhe, H. (1999): *Clouds and climate*. Nature 401, s. 223–224.
- Shulman, M. L., Jacobson, M. C., Charlson, R. J., Synovec, R. E. & Young, T. E. (1996). *Dissolution behavior and surface tension effects of organic compounds in nucleating cloud droplets*. Geophysical Research Letters 23, s. 277–280.
- Spoel, van der, D., Lindahl, E., Hess, B., van Buuren, A. R., Apol, E., Meulenhoff, P. J., Tieleman, D. P., Sijbers, A. L. T. M., Feenstra, K. A., van Drunen, R. & Berendsen, H. J. C. (2005). *Gromacs User Manual version 4.0*. www.gromacs.org.
- Tuckermann, R. (2007). *Surface tension of aqueous solutions of water-soluble organic and inorganic*

compounds. Atmospheric Environment 41, s. 6265–6275.

Tuckermann, R. & Cammenga, H. K. (2004). *The surface tension of aqueous solutions of some atmospheric water-soluble organic compounds*. Atmospheric Environment 38, s. 6135–6138.

Virtanen, A., Joutsensaari, J., Koop, T., Kannosto, J., Yli-Pirilä, P., Leskinen, J., Mäkelä, J. M., Holopainen, J. K., Pöschl, U., Kulmala, M., Worsnop, D. R. & Laaksonen, A. (2010). *An amorphous solid state of biogenic secondary organic aerosol particles*. Nature, s. 824–827.

Wallace, J. M. & Hobbs P. V. (2006). *Atmospheric Science – An introductory Survey*, second edition. Academic Press.