DOI: 10.3724/EE.1672-9250.2026.54.105 **CSTR:** 32253.14.EE.1672-9250.2026.54.105

太原城区细颗粒物组分特征、酸度及液态水含量研究

赵小丫[1]，陈盈巧[1]，刘 澎[2]，白 璐[3]，赵梓彤[3]，于兴娜[1,*]

(1. 南京信息工程大学 中国气象局气溶胶-云-降水重点开放实验室，南京 210044；2. 太原理工大学 化学与化工学院，山西省生态环境规划和技术研究院，太原 030027；3. 辽宁省生态环境监测中心，沈阳 110161)

摘 要： 基于太原城区2023年在线的水溶性离子数据与同期气象观测资料，分析了太原城区$PM_{2.5}$中水溶性离子组分的时间变化特征，利用ISORROPIA-II模型模拟了气溶胶液态水含量(ALWC)与酸度(pH)，并探讨了其与相对湿度、温度和主要吸湿性离子之间的关系。结果表明：$PM_{2.5}$污染呈现显著的季节差异，冬季平均浓度最高(63.54 μg/m^3)，约为夏季的2.3倍。SO_4^{2-}、NO_3^-和NH_4^+是$PM_{2.5}$的主要组成部分，NO_3^-的季节差异最为突出。日变化上，夏季NO_3^-与SO_4^{2-}的浓度峰值出现在中午前，早于其他季节。硫氧化率(SOR)夏季较高，总体呈现夜间高白天低的日变化特征；氮氧化率(NOR)表现出春季高夏季低、白天高夜晚低的特征。太原城区气溶胶pH年均值为4.07，整体呈弱酸性，ALWC呈现秋冬高春夏低的特点。相对湿度(RH)、温度(T)和总氨($TNH_3=NH_3+NH_4^+$)是调控太原城区ALWC与pH的关键因素。其中，RH和T都能通过影响ALWC改变气溶胶pH。此外，较高的ALWC与pH可能共同促进二次无机盐的生成。

关键词： 气溶胶液态水含量；水溶性离子；酸度；ISORROPIA-II

中图分类号： X51 **文献标识码：** A

细颗粒物($PM_{2.5}$，空气动力学直径≤2.5 μm)因粒径小、表面积大等性质，可以吸附空气中大量的有毒有害物质，对人体健康和空气质量产生严重威胁。水溶性离子作为$PM_{2.5}$的重要组分，通常能占$PM_{2.5}$质量的20%~50%[1]，重污染天气时能达到60%[2]。水溶性离子在环境变化中发挥着重要作用，对大气能见度、酸沉降以及气溶胶酸度(pH)等方面都有重要影响。

受地理位置、产业结构以及气象条件影响，$PM_{2.5}$中的水溶性离子组分和浓度在各地存在较大差异。北京受沙尘影响时$PM_{2.5}$的首要组分为地壳元素(Ca^{2+}和Mg^{2+}等)，次要组分为NO_3^-[3]。厦门受海盐影响显著，Na^+和Cl^-浓度常年维持在1.0 μg/m^{3}左右，整体吸湿性较强[4]。上海和常州以NO_3^-为主要离子组分，冬季NO_3^-和NH_4^+浓度显著上升[5-6]。这些组分差异会进一步影响气溶胶的液态水含量(ALWC)和pH。气溶胶液态水含量是指气溶胶粒子中液态水的占比或浓度值，主要受相对湿度(RH)与吸湿性组分影响[7]。研究表明，SO_4^{2-}、NO_3^-和NH_4^+(SNA)具有较强的吸湿性，可促进ALWC增加[8]，为多相反应提供必要的液相介质，使无机离子发生电离与酸碱平衡，进而对气溶胶pH产生影响[9-14]。此外，无机阳离子(如Ca^{2+}、Mg^{2+}和K^+)可通过与H^+竞争进一步调节气溶胶pH，如上海市$PM_{2.5}$明显呈酸性，且酸度与Ca^{2+}和Mg^{2+}等浓度呈负相关[7]。高ALWC条件下气粒分配及酸碱平衡发生变化，在富氨环境中有利于NH_4^+/NH_3缓冲体系的形成，从而使华北地区气溶胶酸性降低[15-17]。因此ALWC与pH的时空变化及其影响因素是理解区域大气复合污染的关键。

太原市位于山西省中部，三面环山，工业和燃煤污染严重。太原市$PM_{2.5}$中SO_4^{2-}、NO_3^-和NH_4^+占比可达38.3%，其中NO_3^-已经成为冬季$PM_{2.5}$升高的首要驱动组分[18]。然而，现有研究多集中于$PM_{2.5}$及其组分的污染特征和气象条件对二次无机盐生成的影响[2-3,19]，对太原市ALWC与pH的研究较为缺乏。因此，本研究基于太原城区2023年高分辨率水溶性离子监测数据，结合ISORROPIA-II热力学

收稿日期： 2026-03-29；**改回日期：** 2026-05-20

基金项目： 国家重点研发计划项目(2019YFC0214604)。

第一作者简介： 赵小丫(2003—)，女，硕士研究生，主要研究方向为大气环境。email：202512030350@nuist.edu.cn。

***通信作者：** 于兴娜(1979—)，女，博士，教授，研究方向为大气环境、大气化学。email：xnyu@nuist.edu.cn。

© Editorial office of Earth and Environment. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license.

模型，系统模拟并分析ALWC与pH的变化特征，重点阐述其与RH、温度及主要吸湿性离子之间的关联，并探讨在二次无机盐生成过程中ALWC与pH的变化及其反馈调节关系，为当地大气复合污染精准防控提供科学依据。

1 材料与方法

1.1 实验材料

本研究数据采样时间为2023年1月1日至12月31日，采样点位于山西省太原市晋源区太原市生态环境局晋源分局，靠近居民生活区。采样数据通过每天24 h连续观测得到，时间分辨率为1 h。观测数据主要包括$PM_{2.5}$质量浓度、水溶性离子（Na^+、NH_4^+、Ca^{2+}、K^+、Mg^{2+}、SO_4^{2-}、NO_3^-、Cl^-和F^-）及气态污染物（SO_2、NO、O_3、NO_2、NO_x和CO）浓度。

1.2 采样仪器及原理

水溶性离子数据使用瑞士万通（Metrohm）940型离子色谱仪进行分析，配备电导检测器及化学抑制系统，数据采集与处理通过MagIC Net 4.2软件完成。检测器具有优异的温度稳定性（< 0.001 °C）和宽动态范围（0~15 000 μS/cm，无需量程切换），确保检测的高灵敏度和准确性。阴离子采用抑制型电导检测，色谱柱为Metrosep A Supp 5（250 mm×4.0 mm），淋洗液为3.2 mmol/L Na_2CO_3和1 mmol/L $NaHCO_3$混合溶液；阳离子采用非抑制型电导检测器，使用阳离子分析柱及相应保护柱，淋洗液为5.6 mmol/L HNO_3溶液。数据通过多点标准曲线（R^2>0.998）、空白样、质控样及重复样测试（RSD<5%），进行质量控制，并通过加标回收与重复测定实验验证相对标准偏差较小，精密度较好。

1.3 研究方法

1.3.1 硫氧化率与氮氧化率的计算

通过计算硫氧化率（SOR）和氮氧化率（NOR）的比值可判断SO_2和NO_2的二次转化程度，有助于进一步了解SO_2向SO_4^{2-}和NO_2向NO_3^-的转化过程，其计算公式如下[20]：

$$SOR=\frac{n(SO_4^{2-})}{n(SO_4^{2-})+n(SO_2)} \quad (1)$$

$$NOR=\frac{n(NO_3^-)}{n(NO_3^-)+n(NO_2)} \quad (2)$$

式中，n为物质的量，μmol。

1.3.2 气溶胶液态水含量与酸度的计算

本研究采用ISORROPIA-II热力学平衡模型计算气溶胶液态水含量（ALWC）和气溶胶酸度（pH）。模型在给定温度和相对湿度的条件下，基于Na^+、NH_4^+、Ca^{2+}、K^+、Mg^{2+}、SO_4^{2-}、NO_3^-和Cl^-等水溶性离子，可输出得到ALWC、H^+及平衡状态下气相、液相和固相中各物质的含量[21]。该模型有Forward和Reverse两种模式，以及stable（稳态）和metastable（亚稳态）两种颗粒物状态。由于观测期间未获取气态NH_3、HNO_3和HCl数据，直接采用Reverse模式可能导致pH的计算结果存在高估偏差[22-23]。因此，本研究参考太原已有观测的NH_3浓度作为约束[24]，采用Forward模式和metastable（亚稳态）进行模拟，并通过欠松弛方法进行了多次迭代。此外，为降低低湿条件下模拟假设带来的不确定性[15]，剔除了RH<40%的样本。

气溶胶pH是表征气溶胶液相部分酸碱强弱程度更直观的方法。由于气溶胶pH难以直接测量，通常使用热力学平衡模型来估算，计算公式如下[13]：

$$pH=-\lg\left(\frac{1000[H^+]}{ALWC}\right) \quad (3)$$

式中，$[H^+]$为单位体积空气中氢离子的液相平衡浓度，μg/m³。

2 结果与讨论

2.1 $PM_{2.5}$及其组分时间变化特征

图1给出了2023年太原城区大气$PM_{2.5}$质量浓度及其组分的季节变化。很明显，$PM_{2.5}$质量浓度呈现季节差异，冬季平均浓度最高，是夏季的2.3倍。SNA是$PM_{2.5}$的主要水溶性离子，表现出与$PM_{2.5}$一致的季节变化。值得注意的是，NO_3^-平均浓度在春、秋和冬季高于SO_4^{2-}，尤其冬季NO_3^-平均浓度达到了13.05 μg/m³，归因于冬季低温影响了NH_4NO_3的气–粒分配，有利于HNO_3和NH_3向颗粒相转化，促进NO_3^-的积累[25]。除夏季SO_4^{2-}平均浓度略高于NH_4^+外，其他3个季节几乎一致。冬季Cl^-的平均浓度达到2.41 μg/m³，约为其他3个季节的1.6~3.1倍，这是由于太原冬季大量燃煤取暖所致[26]。作为土壤扬尘的标识元素，春季Ca^{2+}浓度较高，与春季大风导致的扬尘或者远距离传输的沙尘有关。Mg^{2+}、Na^+和F^-平均浓度较低，浓度变化范围为0.41~0.6 μg/m³。

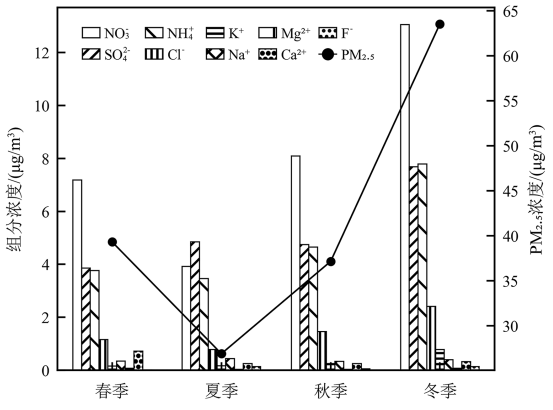


图1 2023年太原城区$PM_{2.5}$及各组分浓度季节变化

Fig. 1 Seasonal variations of $PM_{2.5}$ and its components concentrations in urban Taiyuan in 2023

从日变化特征来看(图2),$PM_{2.5}$在春夏季有1个峰值,其他季节变化较为平缓。NO_3^-在四季表现出不同的日变化规律,其中春秋季日变化特征相似,夏季NO_3^-峰值较春秋季早2 h,而冬季变化平缓且峰值出现最晚。NH_4^+的日变化特征与NO_3^-相似,可能与NH_4^+主要以NH_4NO_3形式停留在颗粒相有关。SO_4^{2-}的变化特征在春秋季相对平缓,夏季于中午前出现峰值,而冬季在14:00出现峰值后仍保持较高值;夏季较早出现峰值主要是日出早且光照强,有利于SO_2经光化学氧化转化为SO_4^{2-}[3]。由于太原春季多风、天气干燥,使得春季Ca^{2+}的日变化规律较为明显,其他3个季节波动较小。细粒子中Cl^-的日变化规律不明显,冬季Cl^-的浓度随时间变化出现连续波动,可能与城区燃煤取暖、机动车等排放以及边界层条件有关。

2.2 SOR与NOR的日变化特征

图3给出了2023年太原城区SOR与NOR的日变化特征。四季SOR均呈现夜间高白天低的日变化特征,具体为日出后SOR下降,在10:00—11:00降到最低值,随后升高并在夜间达到峰值;日间谷值归因于午间RH较低,不利于SO_2的液相氧化[27]。夏季SOR通常高于其他3个季节,尤其在中午及午后,这是因为夏季强辐射有利于光化学反应[28]。与

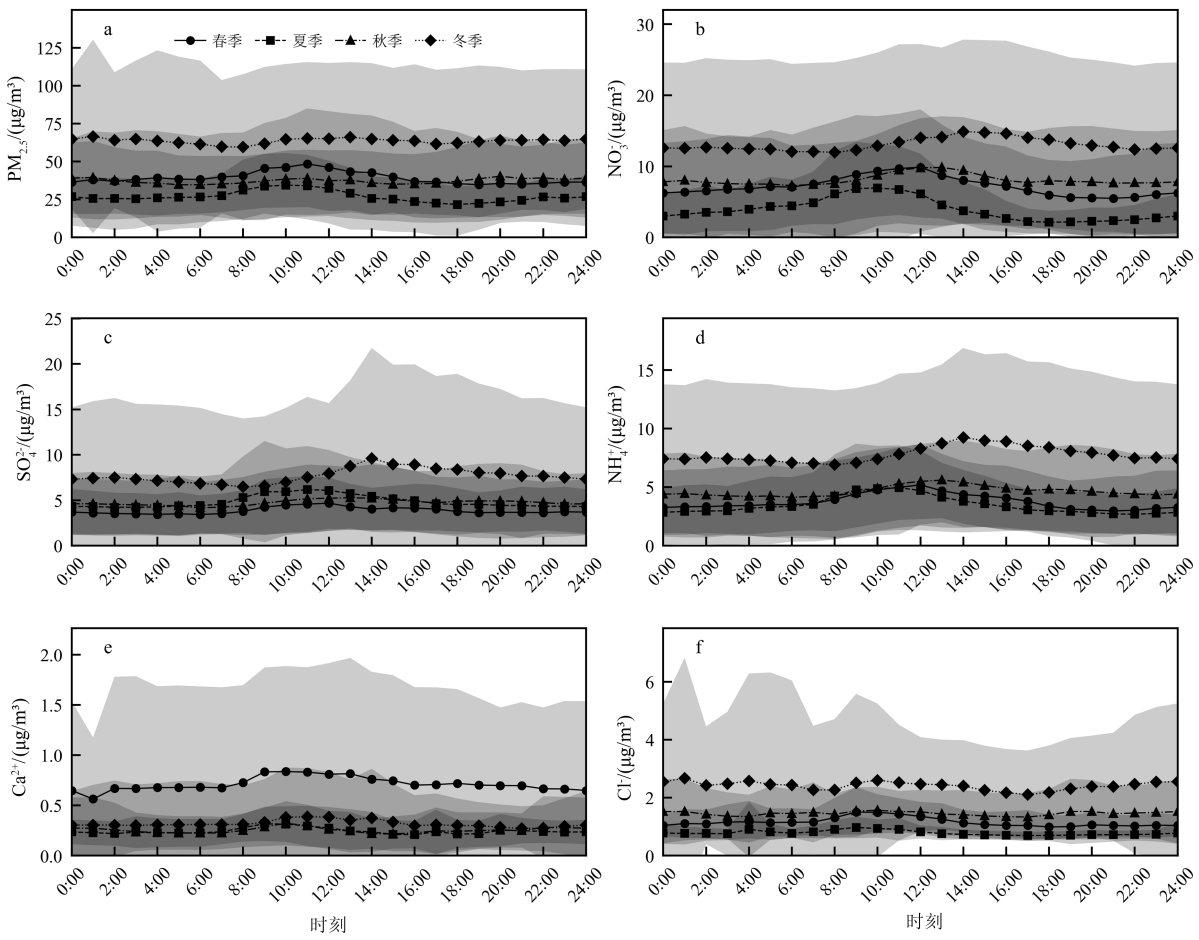


图2 2023年太原城区$PM_{2.5}$及其主要组分的日变化

Fig. 2 Daily variations of $PM_{2.5}$ and its major components in urban Taiyuan in 2023

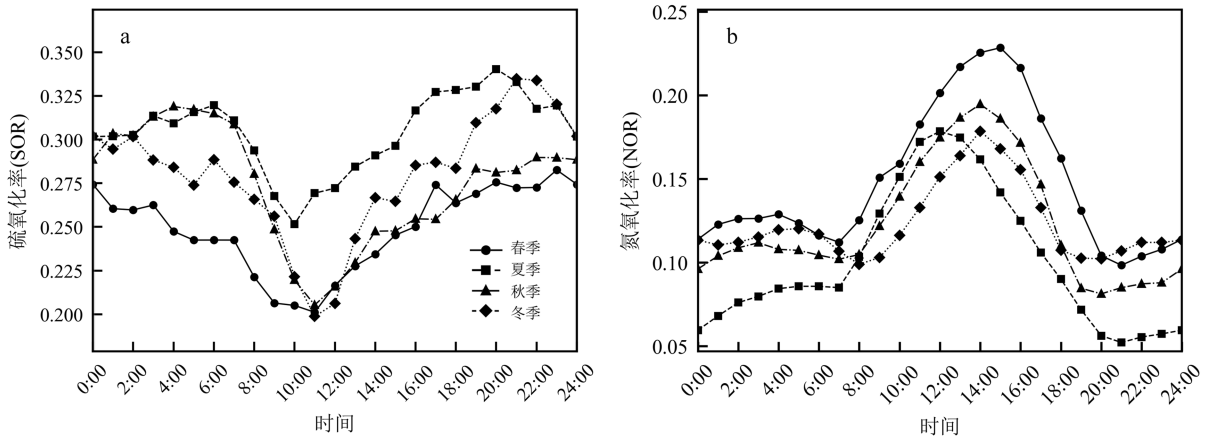


图3 2023年太原城区SOR（a）与NOR（b）日变化

Fig. 3 Diurnal variations of SOR (a) and NOR (b) in urban Taiyuan in 2023

SOR相反，NOR四季均表现出中午高夜晚低的特征，是由于午后大气光化学氧化能力较强，促进NO_2向HNO_3转化。春季NOR最高而夏季最低，可能是因为夏季NO_2浓度最低且夏季高温NH_4NO_3易分解[29]。

2.3 阴阳离子平衡分析

常用阴阳离子当量比值（AE/CE）来评估$PM_{2.5}$中电荷平衡状况，其中AE为阴离子当量（μeq/m³），CE为阳离子当量（μeq/m³）。计算公式如下[30]：

$$AE=\frac{[SO_4^{2-}]}{48}+\frac{[NO_3^-]}{62}+\frac{[Cl^-]}{35.5}+\frac{[F^-]}{19} \quad (4)$$

$$CE=\frac{[Na^+]}{23}+\frac{[NH_4^+]}{18}+\frac{[K^+]}{39}+\frac{[Mg^{2+}]}{12}+\frac{[Ca^{2+}]}{20} \quad (5)$$

式中，$[x]$表示所测离子的质量浓度，μg/m³。

图4为2023年太原城区水溶性阴阳离子的平衡关系，采用日均值数据进行绘图。4个季节的AE/CE分别为0.84、0.83、0.95、0.88，表明阳离子不能被阴离子完全中和，可能与未检测的CO_3^{2-}和HCO_3^-等阴离子有关[31]。AE与CE呈现较好的相关性（$R^2\geqslant 0.90$），表明此次观测数据的可靠性较好，能够较好地代表太原城区$PM_{2.5}$中主要水溶性离子组成。

2.4 气溶胶液态水含量与酸度的变化特征

基于ISORROPIA-II的模拟结果，图5给出了2023年太原城区ALWC与pH的季节分布。太原ALWC呈秋冬高而春夏低的特征，主要归因于秋冬季高浓度的SNA和较高的RH。厦门受海洋气团和较高的SNA浓度影响，ALWC在2—6月及12月较高[4]；上海地区ALWC表现为冬季偏高、夏季偏低[5]。保定市受高湿度和本地积累的SNA影响，在冬季重污染期间ALWC快速升

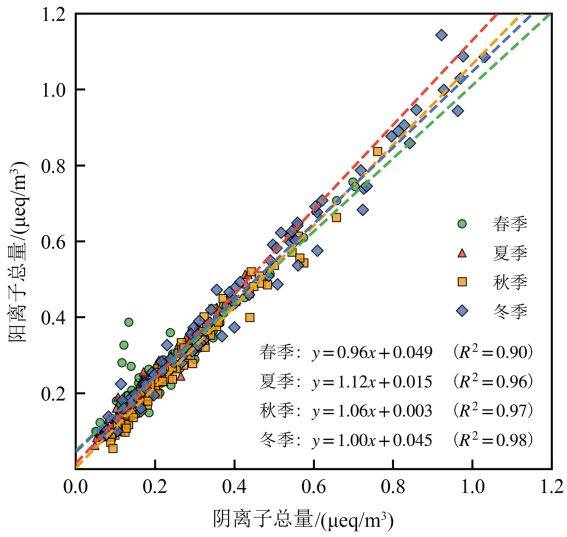


图4 2023年太原城区水溶性阴阳离子平衡关系

Fig. 4 Ion balance of water-soluble ions in urban Taiyuan in 2023

高[32]；北京典型霾污染事件中，ALWC随污染程度加剧呈同步上升趋势[33]。

太原城区气溶胶pH日平均值范围在2.7~7.6之间，全年pH均值为4.07，呈弱酸性，明显高于上海淀山湖（2.96）[5]，与北京市（4.25）[13]和天津市年均pH（3.98）[15]较为相近，略低于西安市（5.20）[34]。太原作为北方典型工业城市，pH呈弱酸性主要归因于较高浓度的NH_3、ALWC和地壳源碱性组分（如Ca^{2+}）[5,35]。太原城区气溶胶pH呈现冬季高、夏季低的季节特征，冬季较高浓度的SO_4^{2-}和NO_3^-促进ALWC吸湿增长，稀释了H^+，使pH升高[11]。

为进一步评估气态前体物输入不确定性对

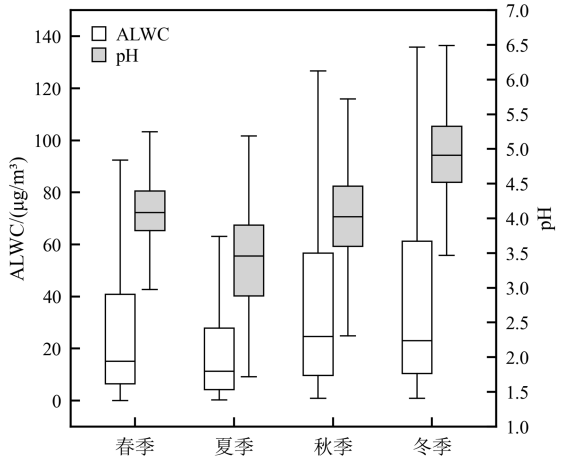


图5 2023年太原城区ALWC与pH的季节分布

Fig. 5 Seasonal distribution of ALWC and pH in urban Taiyuan in 2023

pH的影响，针对太原城区气溶胶pH对NH_3、HNO_3和HCl浓度变化进行了敏感性分析（图6）。总体来看，pH对NH_3变化最为敏感，随着NH_3浓度的增加，气溶胶pH呈上升趋势，最大变化幅度约为0.47。相比之下，HNO_3和HCl浓度变化对pH的影响相对较弱（ΔpH<0.1）。图7给出了太原城区气溶胶pH的月变化趋势及由NH_3（±50%）、HNO_3和HCl（±30%）扰动产生的不确定性范围。可以看出，由NH_3、HNO_3和HCl浓度波动引起的pH变化范围约为0.38~0.49，整体波动幅度较小，pH整体水平仍为弱酸性以及秋冬高、春夏低的季节变化趋势。

2.5 ALWC与pH的影响因素

表1给出了2023年太原城区各季节不同影响因子对气溶胶pH的相对标准偏差（RSD），可用于定量评估pH对各变量的敏感性。其中，TNH_3表示总氨（$TNH_3=NH_3+NH_4^+$），TNO_3表示总硝酸盐（$TNO_3=HNO_3+NO_3^-$）。可以看出，温度和相对湿度是影响太原城区气溶胶pH的主导因素，主要通过影响

表1 2023年太原城区各因子对气溶胶pH的季节相对标准偏差(RSD)

Table 1 Seasonal relative standard deviation (RSD) of factors influencing aerosol pH in urban Taiyuan in 2023 %

项目		SO_4^{2-}	TNO_3	TNH_3	Ca^{2+}	相对湿度	温度
RSD	春季	5.3	8.2	15.7	1.5	14.4	4.9
	夏季	3.5	1.8	2.9	0.3	3.0	6.6
	秋季	4.3	3.0	4.6	0.5	4.4	10.1
	冬季	8.6	1.5	7.5	0.6	2.0	8.7

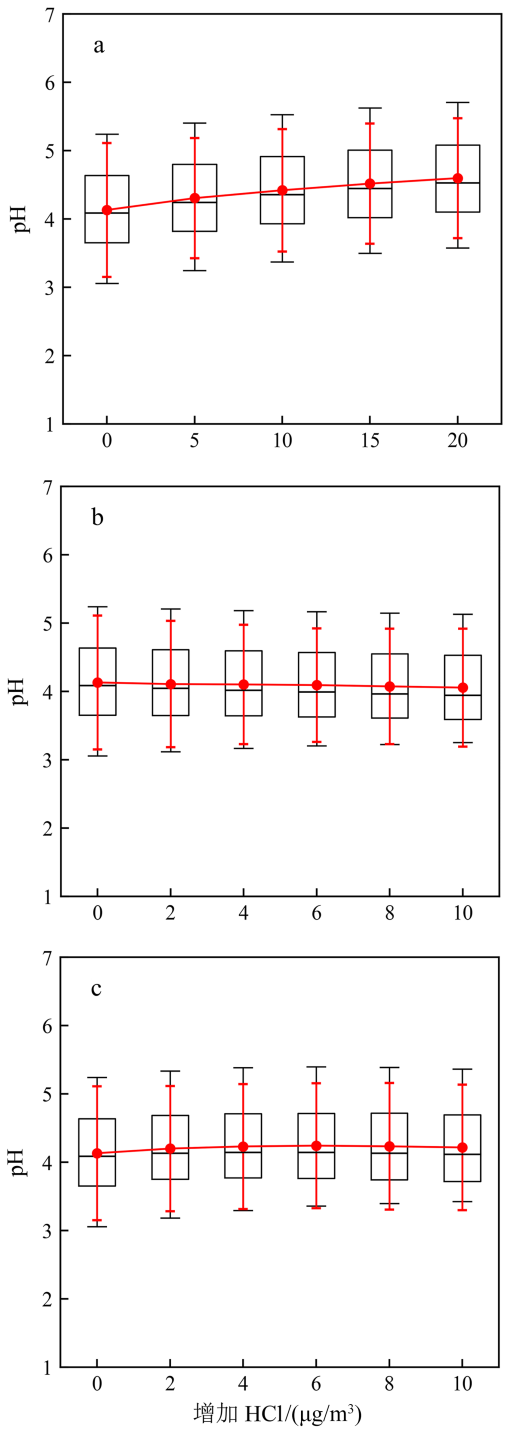


图6 太原城区气溶胶pH对NH_3(a)、HNO_3(b)和HCl(c)浓度变化的敏感性分析

Fig. 6 Sensitivity analysis of aerosol pH to changes in NH_3(a), HNO_3(b) and HCl(c) in urban Taiyuan

ALWC含量及气粒分配平衡改变pH[12-13,36]。TNH_3的敏感性整体较高，表明NH_3/NH_4^+缓冲体系在调节气溶胶酸碱度中起关键作用[17]。此外，春季TNO_3也表现出较高的敏感性，可能是因为春季

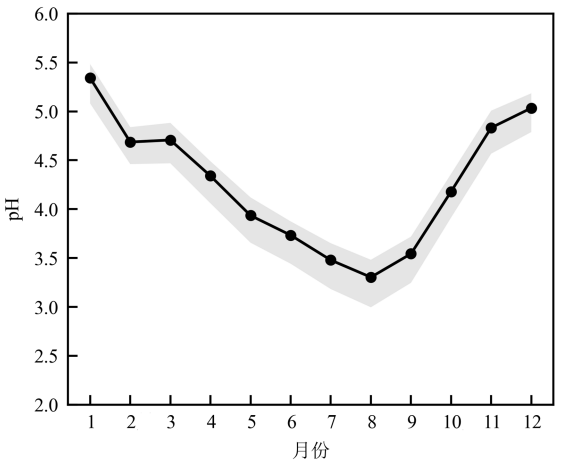


图7 太原城区气溶胶pH的变化及受前体物扰动的不确定性分析

Fig.7 Variations and uncertainty analysis of aerosol pH induced by precursor perturbations in urban Taiyuan

HNO_3/NO_3^-体系对温度和ALWC变化高度敏感[37]。冬季除温度外，SO_4^{2-}对pH的敏感性也较高，反映了冬季供暖期SO_4^{2-}累积对pH的影响。

图8展示了太原城区ALWC和pH随温度和相对湿度的变化，其中温度与相对湿度分别按区间分组并计算其平均占比。ALWC与气溶胶pH整体随温度升高呈下降趋势，其中ALWC的降低归因于高温促进液态水向气态转化，而气溶胶pH下降是由于高温下稀释效应减弱且NH_4NO_3等半挥发性组分易向气态转化，减弱缓冲能力[13]。ALWC随相对湿度升高呈指数增长，可能是因为吸湿性盐类在超过潮解RH时大量吸收水分，从而提升ALWC[38]。气溶胶pH总体随相对湿度升高也呈上升趋势，归因于ALWC增加对H^+产生的稀释作用[14]。此外，pH出现波动可能与SO_2和NO_2等前体物液相氧化产生H^+有关[39]。

图9为气溶胶液态水含量与主要吸湿组分的关系。高RH条件下ALWC随SO_4^{2-}和NO_3^-浓度变化呈现季节差异。比如，春夏秋3季的ALWC对吸湿性组分浓度增加的响应斜率明显高于冬季，尤其夏季更明显；主要原因在于夏季强辐射促进SO_2向SO_4^{2-}的转化，吸湿性强的SO_4^{2-}对ALWC的贡献效率更高[40]；冬季低温则有利于NH_4NO_3向颗粒相分配，较低浓度下通过潮解显著提升ALWC，故响应斜率相对平缓。当相对湿度＞90%时，春、秋两季在较低SO_4^{2-}和NO_3^-浓度（＜15 μg/m³）下仍可观测到较高的ALWC，显著高于夏季相同离子浓度下的ALWC水平。随着相对湿度的升高，ALWC随SO_4^{2-}和NO_3^-浓度增加斜率增大，表明ALWC不仅受这些组分影响，同时也为其二次生成的非均相反应提供场所。

太原城区ALWC与pH的变化受到气象条件与吸湿性颗粒的共同影响。高湿度是ALWC快速增长的关键，而气溶胶pH受到相对湿度、ALWC、H^+及NH_3的多重调控。在秋冬高湿环境下，吸湿性组分增多促使ALWC上升，同时SO_4^{2-}和NO_3^-等积累导致H^+浓度增加，而在NH_3的中和效应与ALWC对H^+的稀释作用下，气溶胶pH呈现升高趋势[13]。pH升高会提升颗粒物表面水溶液的溶解度，进而加快SO_4^{2-}的生成速率[16]，HNO_3向颗粒相分配致使NO_3^-浓度升高[39]。该过程受NH_3影响，若NH_3供应不足，该机制可能显著减弱[12]。

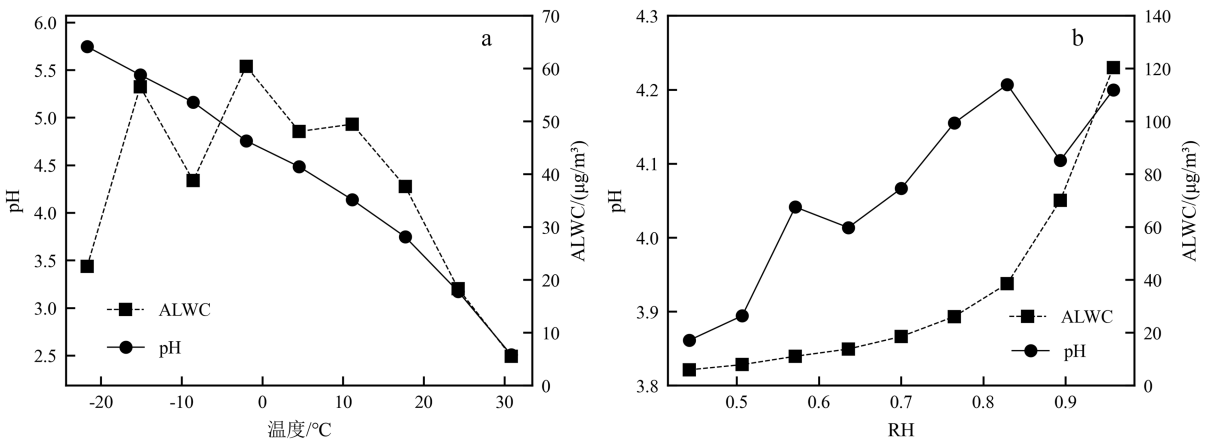


图8 2023年太原城区气溶胶液态水含量、酸度随温度(a)和相对湿度(b)分布

Fig. 8 Distribution of aerosol liquid water content and acidity as a function of (a) temperature and (b) relative humidity in urban Taiyuan in 2023

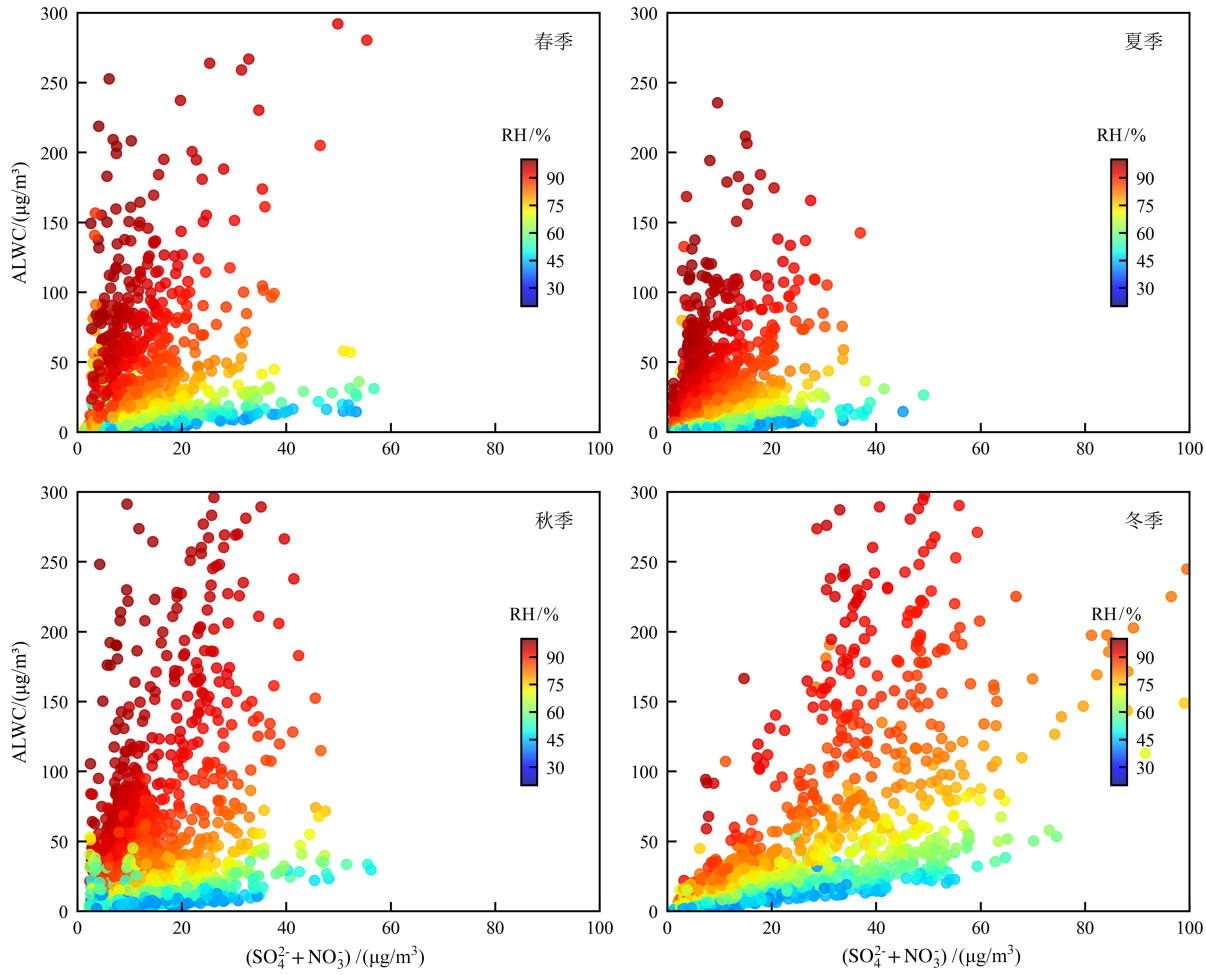


图9 太原城区气溶胶液态水含量与主要吸湿组分(SO_4^{2-}和NO_3^-)浓度的关系

Fig. 9 Relationship between aerosol liquid water content and major hygroscopic components (SO_4^{2-} and NO_3^-) in the urban Taiyuan

3 结论

1)太原城区冬季$PM_{2.5}$的平均浓度达到63.54 μg/m³，约为夏季的2.3倍。SO_4^{2-}、NO_3^-和NH_4^+的浓度明显高于其他离子，其中NO_3^-季节性波动最强。SOR与NOR相反的日变化模式表明SO_4^{2-}和NO_3^-分别受液相或非均相过程与光化学过程主导。

2)太原城区气溶胶整体呈弱酸性，pH年均值为4.07，ALWC秋冬季高而春夏季低。相对湿度和温度是影响ALWC和pH的主要因子，能通过调节ALWC及气粒分配影响pH。TNH_3在酸碱缓冲中起关键作用。

3)在高湿度与富氨条件下，吸湿性组分吸湿增长促进ALWC升高，ALWC的稀释作用与NH_3的中和作用共同提升pH。较高的ALWC与pH能促进SO_4^{2-}和NO_3^-的生成与积累，对$PM_{2.5}$污染有重要影响。

参考文献

[1] 郭家瑜,张英杰,郑海涛,等.北京2015年大气细颗粒物的空间分布特征及变化规律[J].环境科学学报, 2017, 37(7): 2409-2419.

[2] 任娇,赵荣荣,王铭,等.太原市冬季不同污染程度下$PM_{2.5}$的化学组成、消光特征及氧化潜势[J].环境科学, 2022, 43(5): 2317-2328.

[3] 景宽,王友峰,刘保献,等.北京城区大气$PM_{2.5}$组分特征与典型污染过程分析[J].环境科学, 2025, 46(5): 2629-2641.

[4] 张杰儒,张燕茹,苏捷.厦门地区气溶胶液态水含量特征及其对硝酸根生成的影响[J].中国环境监测, 2024, 40(1): 130-138.

[5] 段玉森,赵月,黄凡非,等.长三角东部沿海地区气溶胶液态水含量及酸度的热力学平衡研究:以上海淀山湖为例[J].环境科学研究, 2023, 36(12): 2245-2255.

[6] 刘敬琰,胡彦钧,叶招莲,等.常州市$PM_{2.5}$中水溶性离子组分污染特征及来源分析[J].长江流域资源与环境, 2024, 33(8): 1753-1767.

[7] 冯加良,胡小玲,管晶晶,等.上海市大气细颗粒物的酸度及其与组成的关系[J].上海大学学报(自然科学版), 2010, 16(5): 431-436.

[8] Jin X A, Wang Y Y, Li Z Q, et al. Significant contribution of organics to aerosol liquid water content in winter in Beijing, China[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2020, 20(2): 901-914.
[9] Nguyen T K V, Petters M D, Suda S R, et al. Trends in particle-phase liquid water during the Southern Oxidant and Aerosol Study[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2014, 14(20): 10911-10930.
[10] Kuang Y, He Y, Xu W Y, et al. Distinct diurnal variation in organic aerosol hygroscopicity and its relationship with oxygenated organic aerosol[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2020, 20(2): 865-880.
[11] Cheng Y F, Zheng G J, Wei C, et al. Reactive nitrogen chemistry in aerosol water as a source of sulfate during haze events in China[J]. Science Advances, 2016, 2(12): e1601530.
[12] Guo H, Xu L, Bougiatioti A, et al. Fine-particle water and pH in the southeastern United States[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2015, 15 (9): 5211-5228.
[13] Ding J, Zhao P S, Su J, et al. Aerosol pH and its driving factors in Beijing[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2019, 19(12): 7939-7954.
[14] Ault A P. Aerosol acidity: Novel measurements and implications for atmospheric chemistry[J]. Accounts of Chemical Research, 2020, 53(9): 1703-1714.
[15] 高洁,史旭荣,卫昱婷,等.基于天津市在线数据评估ISORROPIA-II模式结果及气溶胶pH的影响因素[J].环境科学, 2020, 41(8): 3458-3466.
[16] Liu M X, Song Y, Zhou T, et al. Fine particle pH during severe haze episodes in northern China[J]. Geophysical Research Letters, 2017, 44(10): 5213-5221.
[17] Zheng G J, Su H, Wang S W, et al. Multiphase buffer theory explains contrasts in atmospheric aerosol acidity[J]. Science, 369(6509): 1374-1377.
[18] 冯凯琛,崔阳,樊洁,等.太原市城区冬季二次硝酸盐主导下$PM_{2.5}$的形成及防控[J].太原科技大学学报, 2025, 46(1): 88-93.
[19] 兰杰,冯琨,廖楠,等.太原市2023年秋冬季$PM_{2.5}$中水溶性离子污染特征与来源解析[J/OL].环境化学, 2026, 1-13.
[20] 浮天,蒋伯琪,张佳颖,等.南京北郊冬季细颗粒物中水溶性离子的变化趋势[J].环境科学学报, 2024, 44(3): 310-316.
[21] Fountoukis C, Nenes A. ISORROPIA II: a computationally efficient thermodynamic equilibrium model for K^+–Ca^{2+}–Mg^{2+}–NH_4^+–Na^+–SO_4^{2-}–NO_3^-–Cl^-–H_2O aerosols[J].Atmospheric Chemistry and Physics, 2007, 7(17): 4639-4659.
[22] Song S J, Gao M, Xu W Q, et al. Fine-particle pH for Beijing winter haze as inferred from different thermodynamic equilibrium models[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2018, 18(10): 7423-7438.
[23] Tao Y, Murphy J G. The sensitivity of $PM_{2.5}$ acidity to meteorological parameters and chemical composition changes: 10-year records from six Canadian monitoring sites[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2019, 19(14): 9309-9320.
[24] 任明权.太原市大气氨污染特征、潜在源区及减排策略研究[D].太原:太原科技大学, 2024.
[25] Fu X, Wang T, Gao J, et al. Persistent heavy winter nitrate pollution driven by increased photochemical oxidants in northern China[J]. Environmental Science & Technology, 2020, 54(7): 3881-3889.
[26] 张霖琳,王超,朱红霞,等.北京混合功能区夏冬季细颗粒物组分特征及来源比较[J]. 中国环境科学, 2016, 36(1): 36-41.
[27] 马英歌,杨露,狄睿苗,等.周口市2022年冬季重污染过程中细颗粒物污染特征及成因分析[J]. 环境科学, 2023, 44(11): 5986-5996.
[28] 王念飞,陈阳,郝庆菊,等.苏州市$PM_{2.5}$中水溶性离子的季节变化及来源分析[J]. 环境科学, 2016, 37(12): 4482-4489.
[29] 李永麒,张国斌.太原市春季大气$PM_{2.5}$中水溶性离子在线观测分析[J]. 环境化学, 2017, 36(8): 1777-1784.
[30] Zhang T, Cao J J, Tie X X, et al. Water-soluble ions in atmospheric aerosols measured in Xi'an, China: seasonal variations and sources[J]. Atmospheric Research, 2011, 102(1/2): 110-119.
[31] 任娇,尹诗杰,郭淑芬.太原市大气$PM_{2.5}$中水溶性离子的季节污染特征及来源分析[J].环境科学学报, 2020, 40(9): 3120-3130.
[32] 吕文丽,张凯,支敏康,等.冬季NH_3和液态水含量对$PM_{2.5}$中SNA形成的影响与敏感性分析[J].环境科学研究, 2021, 34(5): 1053-1062.
[33] 王爽,王恒阳,程萌田,等.北京地区重霾污染过程颗粒物酸度演变特征及其驱动机制[J].气候与环境研究, 2024, 29(2): 193-204.
[34] 王亚楠,杨舒淇,吴佳霖,等.西安市城郊气溶胶pH的影响因素与源贡献[J].西安交通大学学报, 2025, 59(12): 58-68.
[35] Hennigan C J, Izumi J, Sullivan A P, et al. A critical evaluation of proxy methods used to estimate the acidity of atmospheric particles[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2015, 15(5): 2775-2790.
[36] Guo H Y, Otjes R, Schlag P, et al. Effectiveness of ammonia reduction on control of fine particle nitrate[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2018, 18(16): 12241-12256.
[37] Guo H Y, Liu J M, Froyd K D, et al. Fine particle pH and gas-particle phase partitioning of inorganic species in Pasadena, California, during the 2010 CalNe$_x$ campaign[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2017, 17(9): 5703-5719.
[38] Chen Y K, Wang X, Peng H Y, et al. Hygroscopicity of water-soluble $PM_{2.5}$ in rural northwest China: contrasting contributors between summer and winter[J]. Journal of Geophysical Research: Atmospheres, 2021, 126(15): e2021JD034977.
[39] 王友峰,景宽,沈秀娥,等.北京市四季典型污染过程$PM_{2.5}$酸度与二次硝酸盐形成机制[J].中国环境科学, 2024, 44(8): 4167-4178.
[40] Gysel M, Weingartner E, Baltensperger U. Hygroscopicity of aerosol particles at low temperatures. 2. Theoretical and experimental hygroscopic properties of laboratory generated aerosols[J]. Environmental Science & Technology, 2002, 36(1): 63-68.

Composition, Acidity and Liquid Water Content of Fine Particulate Matter in Urban Taiyuan

ZHAO Xiaoya[1], CHEN Yingqiao[1], LIU Peng[2], BAI Lu[3], ZHAO Zitong[3], YU Xingna[1,*]

(1. Key Laboratory for Aerosol-Cloud-Precipitation of China Meteorological Administration, Nanjing University of Information Science and Technology, Nanjing 210044, China; 2. College of Chemistry and Chemical Engineering of Taiyuan University of Technology, Shanxi Academy of Eco-Environmental Planning and Technology, Taiyuan 030027, China; 3. Liaoning Provincial Ecology & Environment Monitoring, Shenyang 110161, China)

Abstract: Based on online monitoring data of water-soluble ions and meteorological observations in the urban area of Taiyuan in 2023, this study analyzes the temporal variation characteristics of water-soluble ionic components in $PM_{2.5}$. The ISORROPIA-II model was employed to simulate aerosol liquid water content (ALWC) and acidity (pH), and their correlations with relative humidity, temperature, and major hygroscopic ions were examined. The concentration of $PM_{2.5}$ exhibited distinct seasonal variations, with the highest average concentration occurring in winter (63.54 μg/m^3), about 2.3 times higher than in summer. SO_4^{2-}, NO_3^-, and NH_4^+ constituted the dominant ionic species in $PM_{2.5}$, with NO_3^- displaying the most prominent seasonal variation. Diurnally, the concentration peaks of NO_3^- and SO_4^{2-} in summer appeared before noon, earlier than in other seasons. The sulfur oxidation ratio (SOR) was higher in summer and generally exhibited a diurnal pattern, with higher values at night and lower values during the daytime. In contrast, the nitrogen oxidation ratio (NOR) was higher in spring and lowest in summer, with higher levels during the day and lower levels at night. The annual mean pH of aerosols in urban Taiyuan was 4.07, indicating a low acidity. ALWC showed higher values in autumn and winter but lower values in spring and summer. Relative humidity (RH), temperature (T), and total ammonia (TNH_3= NH_3+NH_4^+) were identified as key factors regulating aerosol liquid water content (ALWC) and pH in urban Taiyuan. Among these factors, both RH and temperature can alter aerosol pH by influencing ALWC. In addition, elevated ALWC and pH may synergistically promote the formation of secondary inorganic aerosols.

Keywords: aerosol liquid water content; water-soluble ions; acidity; ISORROPIA-II