

**1 óra**

*Levegőkémia, légkörkémiail  
folyamatok modellezése*

# I.rész

## A légkör szerkezete

# A légkör függőleges tagozódása

## HOMOSZFÉRA

### **TROPOSZFÉRA:**

A légkör alsó, sűrű, felszíntől átlagosan 12 km magasságig terjedő része. A felhőképződés, csapadékjelenségek itt zajlanak. Felső határa a tropopauza. A légmozgások iránya vízszintes vagy függőleges. A légkör tömegének 4/5-ét foglalja magában.

### **SZTRATOSZFÉRA:**

A tropopauzától 35 km magasságig terjedő része a légkörnek. Hőmérséklete emelkedik, felhőképződés kivételes esetekben zajlik. Vízgőztartalma rendkívül alacsony. A vízszintes irányú mozgások erősek, a szélesebbség eléri a 360 km/h értéket is.

### **MEZOSZFÉRA:**

A homoszféra legfelső része, amelyben a hőmérséklet a növekvő magassággal általában csökkenő irányú. Ennek a rétegnek a magassága kb. 85 km, itt az úgynevezett mezopauzában a hőmérséklet minimumára  $-80\text{ °C}$ -ra csökken.

# HETEROSZFÉRA

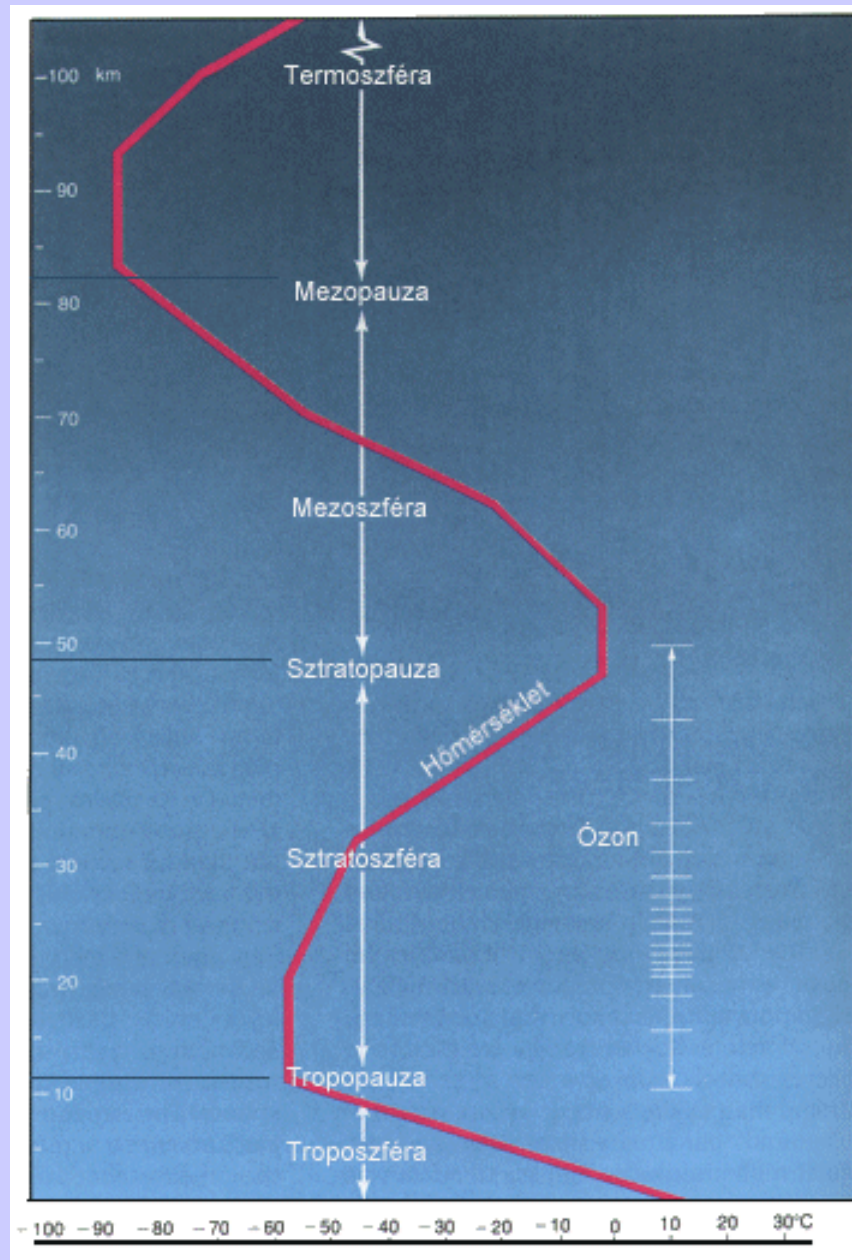
## TERMOSZFÉRA:

A légkör 82 km-től 500 km-ig terjedő része. Az anyagi összetétel lassan változik, az oxigén és a nitrogén nagy mennyiségben van jelen, de már csak magányos molekulák formájában. Hőmérséklete emelkedik, 100 km-en +70 Celsius-fok. Több ionizált réteget tartalmaz, melyek a rádiózásban rendkívül fontosak.

## EXOSZFÉRA:

A felső légkör 500 km feletti részének neve, mely rendkívül ritka, de ennek ellenére tartalmaz atomos oxigént és nitrogént. Hőmérséklete azonos a termoszféra hőmérsékletével. Három alcsoportra osztható:

- a, Helioszféra,
- b, Protonoszféra,
- c, Magnetoszféra.



## **II. rész**

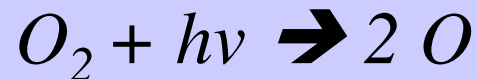
### A légkör kinetikája

Anyagfajták	Koncentráció (ppb)	
	<i>Tiszta levegő</i>	<i>Szennyezett levegő</i>
Nitrogén	$7,81 \times 10^8$	$7,81 \times 10^8$
Oxigén	$2,09 \times 10^8$	$2,09 \times 10^8$
Argon	$9,34 \times 10^6$	$9,34 \times 10^6$
Szén-dioxid	$3,32 \times 10^5$	$3,32 \times 10^5$
Ózon	20-80	100-500
Szén-monoxid	120	$10^3$ - $10^4$
Kén-dioxid	1,0-10	20-200
Nitrogén-dioxid	0,1-0,5	50-250
Nitrogén-monoxid	0,01-0,05	50-750

1.1. táblázat A legfontosabb levegőt alkotó gázok és a légszennyezők átlagos koncentrációja a troposzférában.

# A sztratoszféra kémiája

Az ózont az oxigén kb. 242 nm-nél rövidebb hullámhosszú fény hatására bekövetkező fotodisszociációja és az azt követő, molekuláris oxigénnel lejátszódó trimolekulás kombinációs reakciója termeli:



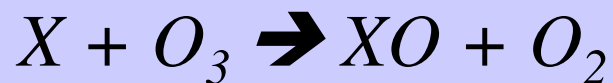
Az ózonkoncentráció nagyságát két további reakció is behatárolja:



*CHAPMAN mechanizmus*



A sztratoszféra jelentős ózonkoncentrációját más anyagok viszonylag kicsi, nyomnyi mennyiségei is megzavarhatják az alábbi típusú katalitikus körfolyamatokon keresztül:

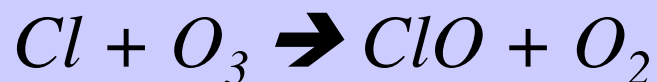


*X: atom vagy szabad gyök*

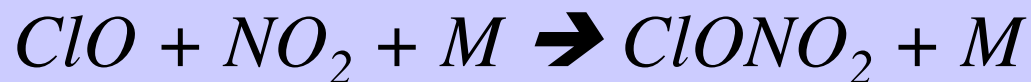
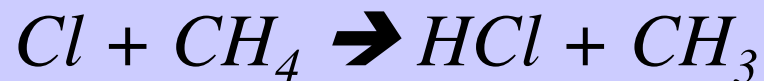
*X: NO, Cl*

*XO: NO<sub>2</sub>, ClO*

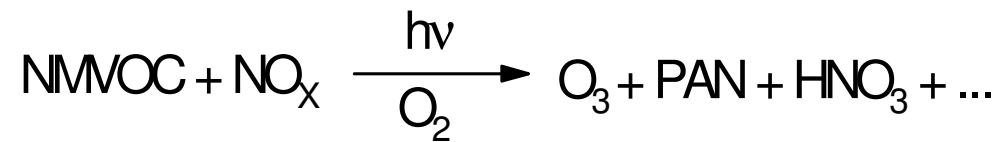
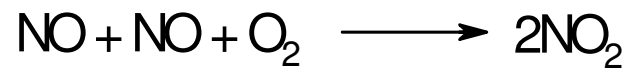
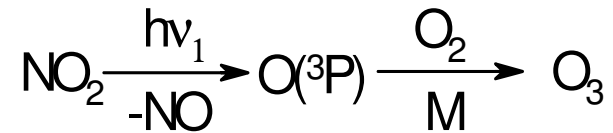
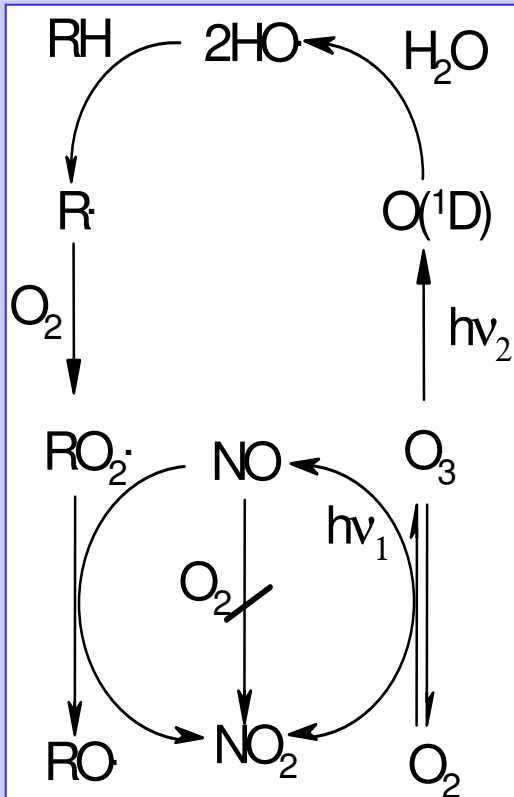
## CFC (1989-es Montreáli Egyezmény)

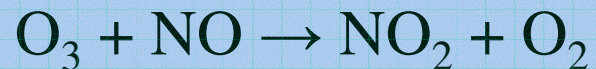
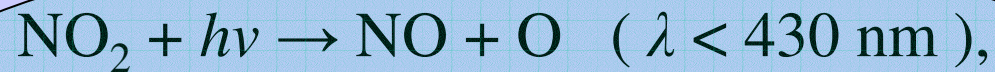


Ez a körfolyamat sokszor megismétlődhet, amíg a klóratomok vagy a ClO-gyökök elreagálnak egy másik anyaggal, és ún. tárolómolekulát adnak:



# A troposzféra kémiája





$$[\text{O}_3] \propto [\text{NO}_2]/[\text{NO}]$$

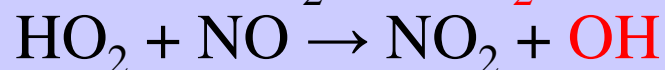
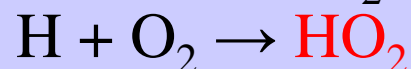
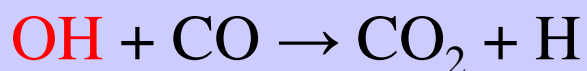
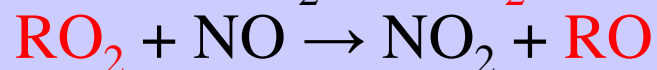
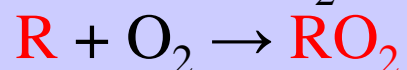
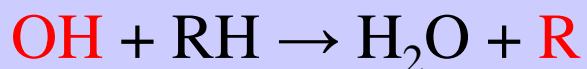
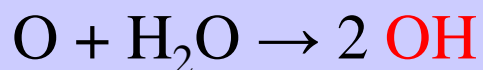
pl. városban nagy az NO koncentráció,  
mivel az emisszió túlnyomó része NO  
formájában emittálódik



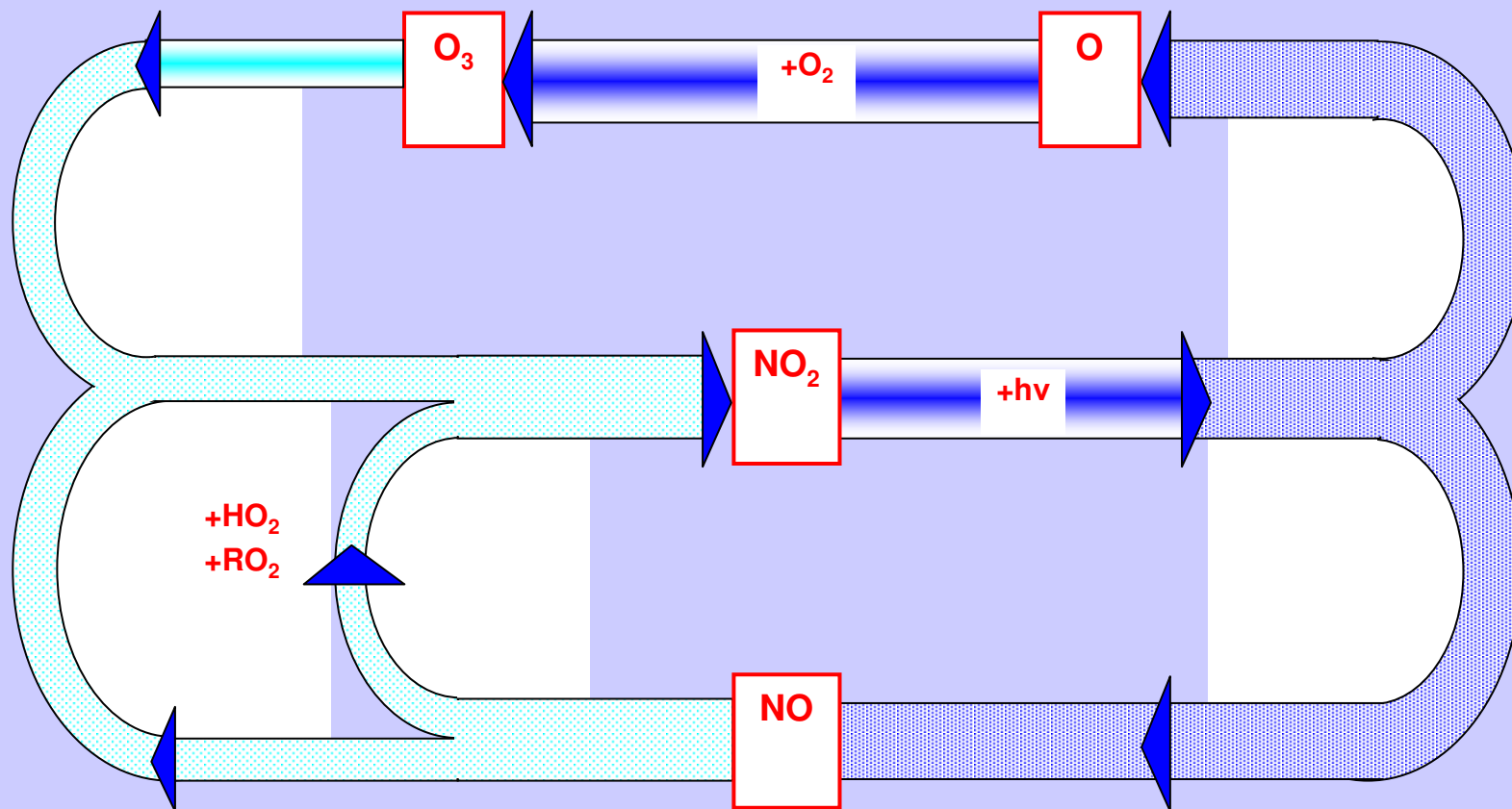
jelentős ózonzahalmozódás csak nagy  $[\text{NO}_2]/[\text{NO}]$   
hányados mellett alakulhat ki

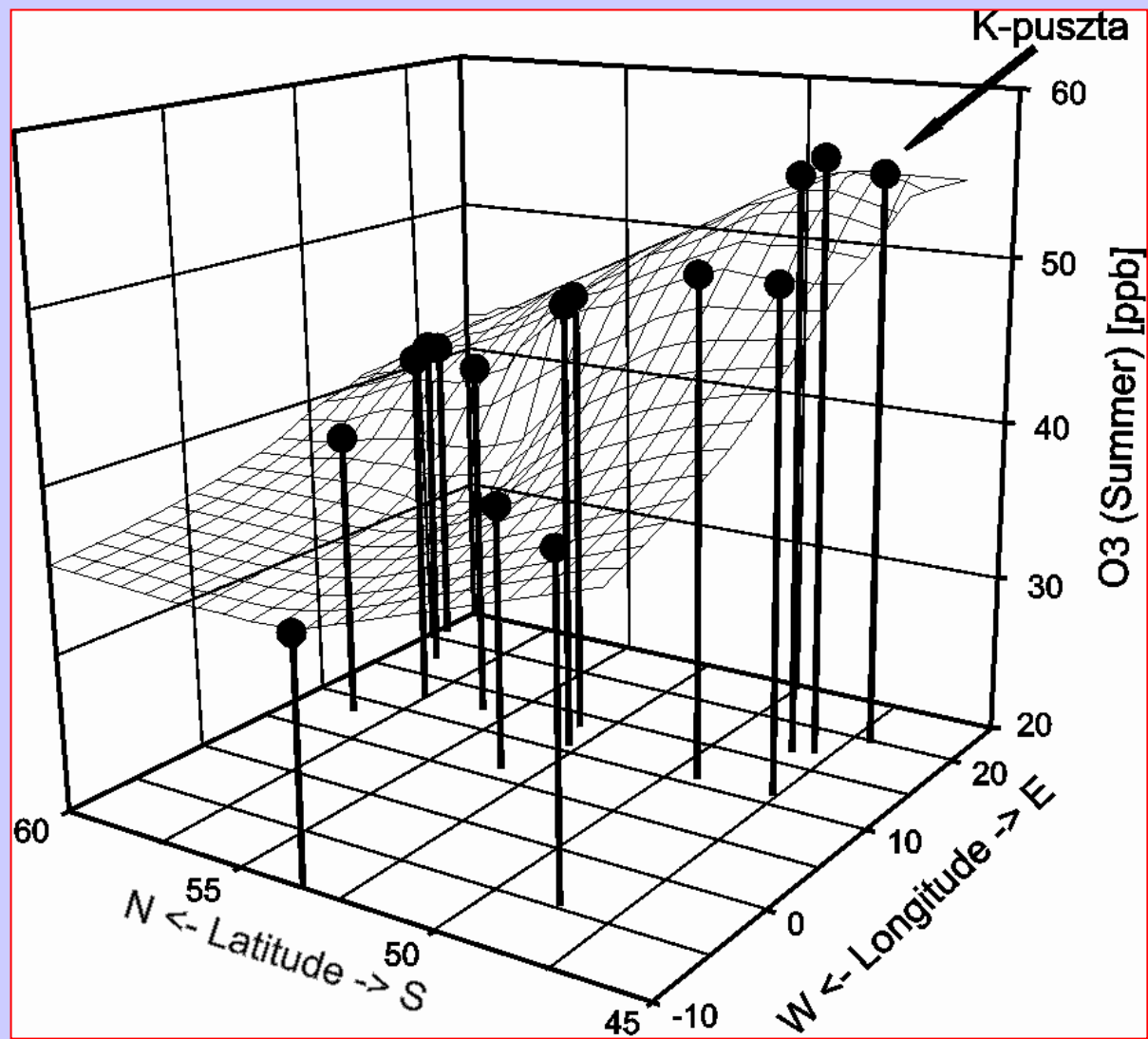
Az antropogén eredetű NO<sub>x</sub> túlnyomó része NO formában kerül a légkörbe.  
Ezért nagy  $[\text{NO}_2]/[\text{NO}]$  hányados kialakulásához létezniük kell a troposzférában olyan oxidáló anyagfajtáknak, amelyek gyors reakcióban képesek a nitrogén-monoxidot nitrogén-dioxiddá oxidálni.

Ezt a szerepet a peroxi-gyökök ( $\text{HO}_2$  és  $\text{RO}_2$ ) töltik be, ahol R tetszőleges szerves csoportot jelöl. A peroxi-gyökök a troposzférában az illékony szerves vegyületek és a szén-monoxid oxidációs folyamatában képződnek. Ezen reakciókban az OH-gyökök fontos szerepet játszanak.



Mindkét esetben az OH gyök indítja a reakciósort, amelyben peroxi-gyök képződik, amely képes az NO-t  $\text{NO}_2$ -vé oxidálni





a.)

## Generic Reaction Set (GRS)



**ROC:** **Reaktív szerves anyagok**

**RP:** **Gyökök**

**SGN:** **Stable Gaseous Nitrogen Products**

**SNGN:** **Stable Non-gaseous Nitrogen Products**



**b.) CBM-Leeds**

23 anyagfajta / 59 reakció

**c.) Master Chemical Mechanism (MCM)**

128 anyagfajta / 405 reakció

# III. rész

## Levegőminőség

# Légszennyezők

a.)

**Kén-dioxid:** A légkörbe a nagy kéntartalmú szenek elégetése, kénsav gyártása, a kénsavas fémmaratás, a papírgyártás során kerül. Kisebb mennyiségben az olajtüzelésből származik.

**Nitrogén-oxidok:** Különböző nitrogén-oxidok keletkeznek villámlás, tüzelés, ammónia elégetése, salétromsavas oldás, salétromsavgyártás, műtrágyagyártás során. Tüzelés során a NO keletkezhet a tüzelőanyag nitrogéntartalmából, a levegő nitrogén- és oxigéntartalmából (termikus NO) és a szénhidrogének katalizáló hatására a lángban (prompt NO).

**Szén-monoxid:** Nem tökéletes égés során keletkezik (erőművek, kohók, gépjárművek).

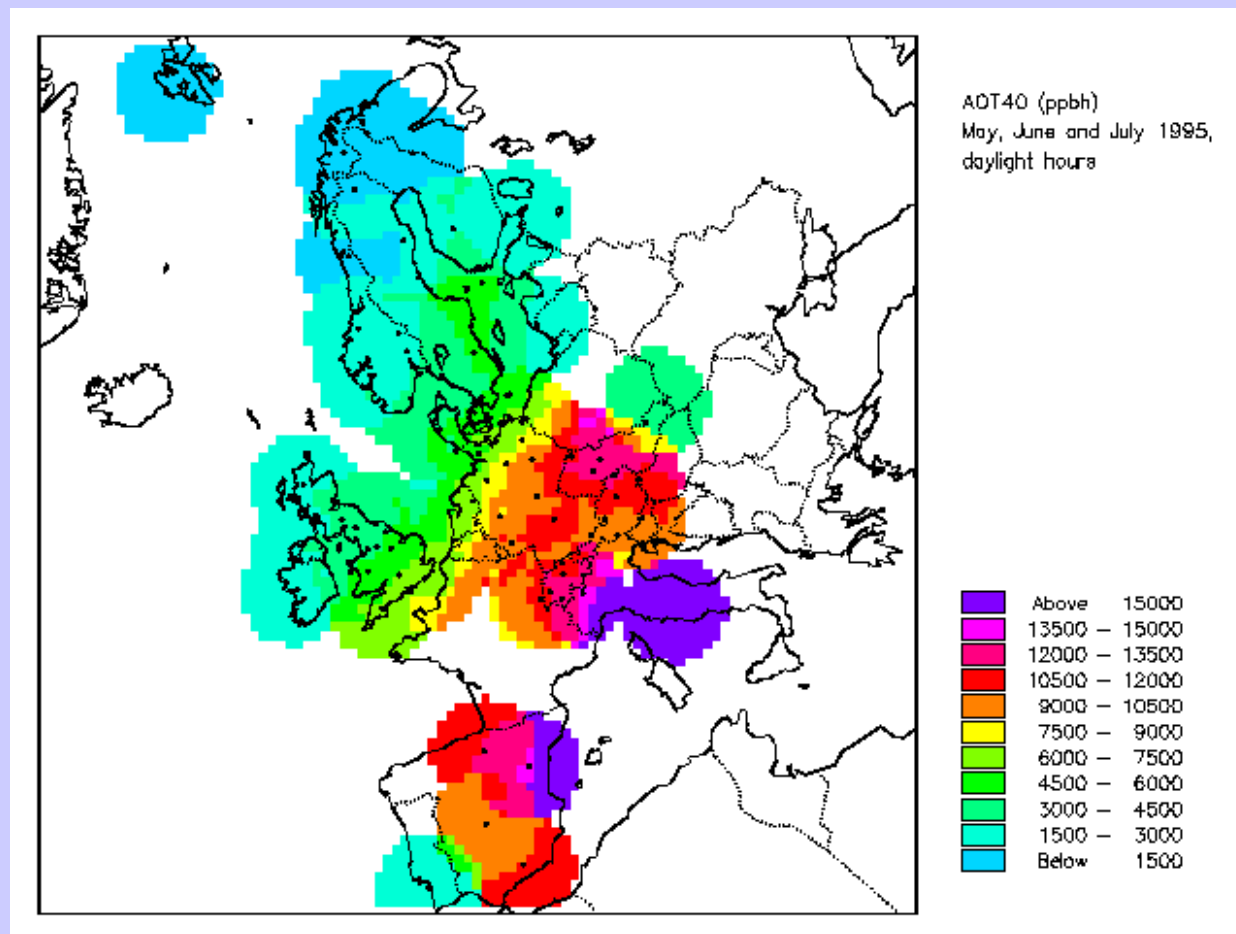
**Ammónia:** Keletkezik rothadásakor, nitrogénműtrágyák előállításakor és felhasználásakor.

**Fluorvegyületek:** Alumíniumkohászat, üveggyártás, zománcozás, szuperfoszfátgyártás során jutnak a légtérbe.

**Szénhidrogének:** NMCH és metán (!!!). Természetes és antropogén kibocsátás.

**Szén-dioxid:** Természetes (pl.: légzés) és antropogén (égések) kibocsátás.

**Ózon:** másodlagos légszennyező, AOT40, AOT60 (integrált ózommennyiség)



b.)

- **Elsődleges légszennyezők: pl.: NO<sub>x</sub>, SO<sub>2</sub>, CO**
- **Másodlagos légszennyezők: pl.: ózon**

c.)

- **Emisszió: kibocsátás**
- **Transzmisszió: a légkörbe került anyag fizikai és kémiai folyamatokban vesz részt.**
  - kémiai reakciók
  - anyagtranszport (turbulens diffúzió, szélmező)
  - ülepedés (száraz, nedves)
- **Immisszió: a környezeti levegőben kialakult szennyezőanyag-koncentráció**

#### d.) A légszennyezés hatásai:

**Lokális hatás:** pl.: hőerőmű környezetében kialakuló  
környezetkárosító hatás

**Regionális hatás** pl.. fotokémiai szmog

**Kontinentális hatás:** savas esők

**Globális hatás:** globális felmelegedés  
ózonréteg elvékonyodása  
klímaváltozás

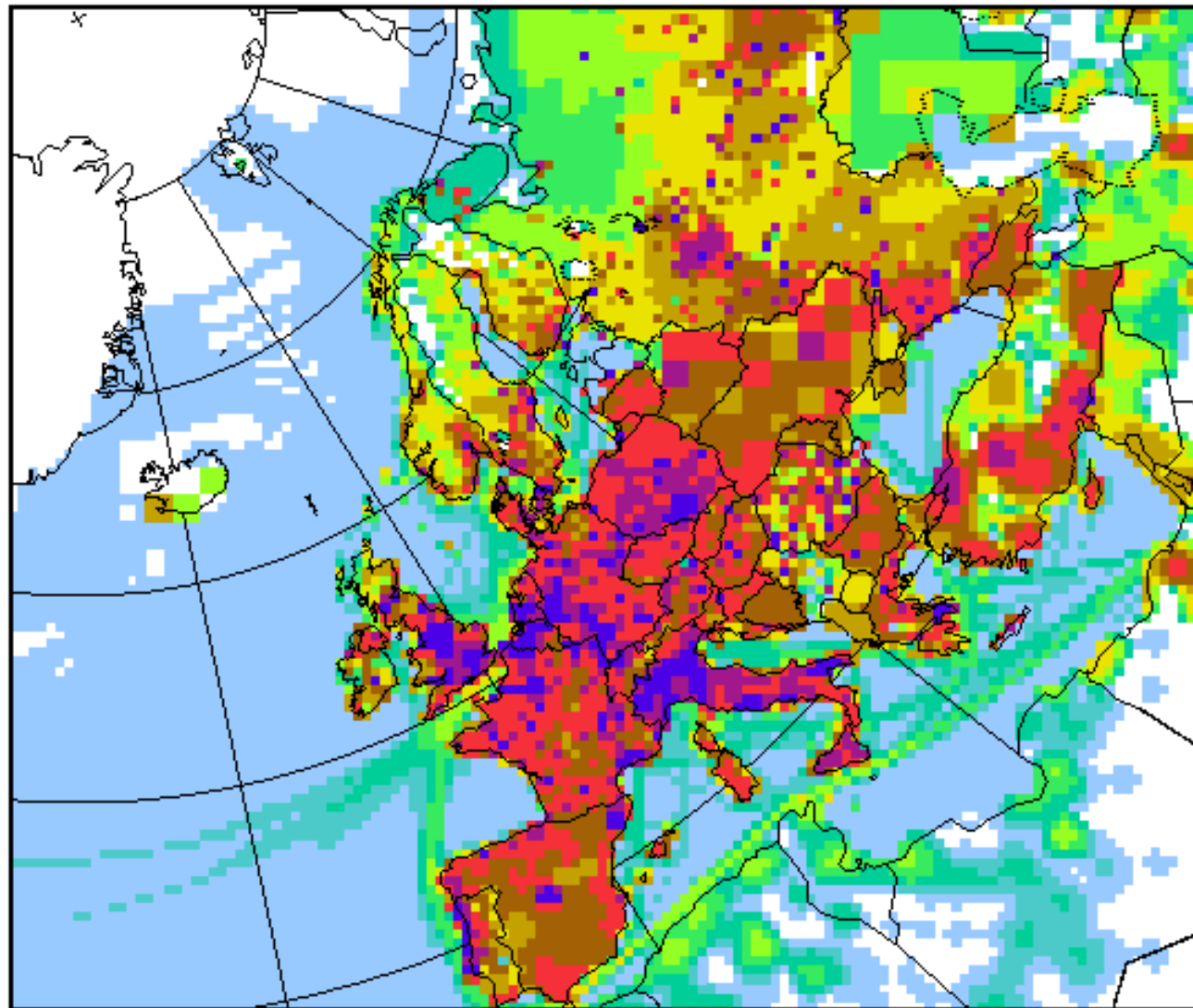
## d.) Légtörri emisszió

**Természetes:** vulkanikus  
erdőtüzek  
tengeri emisszió  
eróziós folyamatok  
biogén kibocsátás

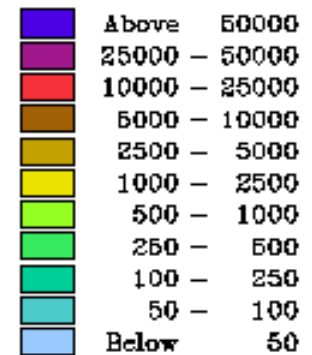
**Antropogén:** energia előállítás  
ipari folyamatok  
közlekedés  
domestic (házi) tüzelés

Források típusa: **pontforrás**; **vonalforrás** (pl.: műút); **területi forrás**

Emission of Carbon monoxide in 1998  
(50km x 50km EMEP grid)



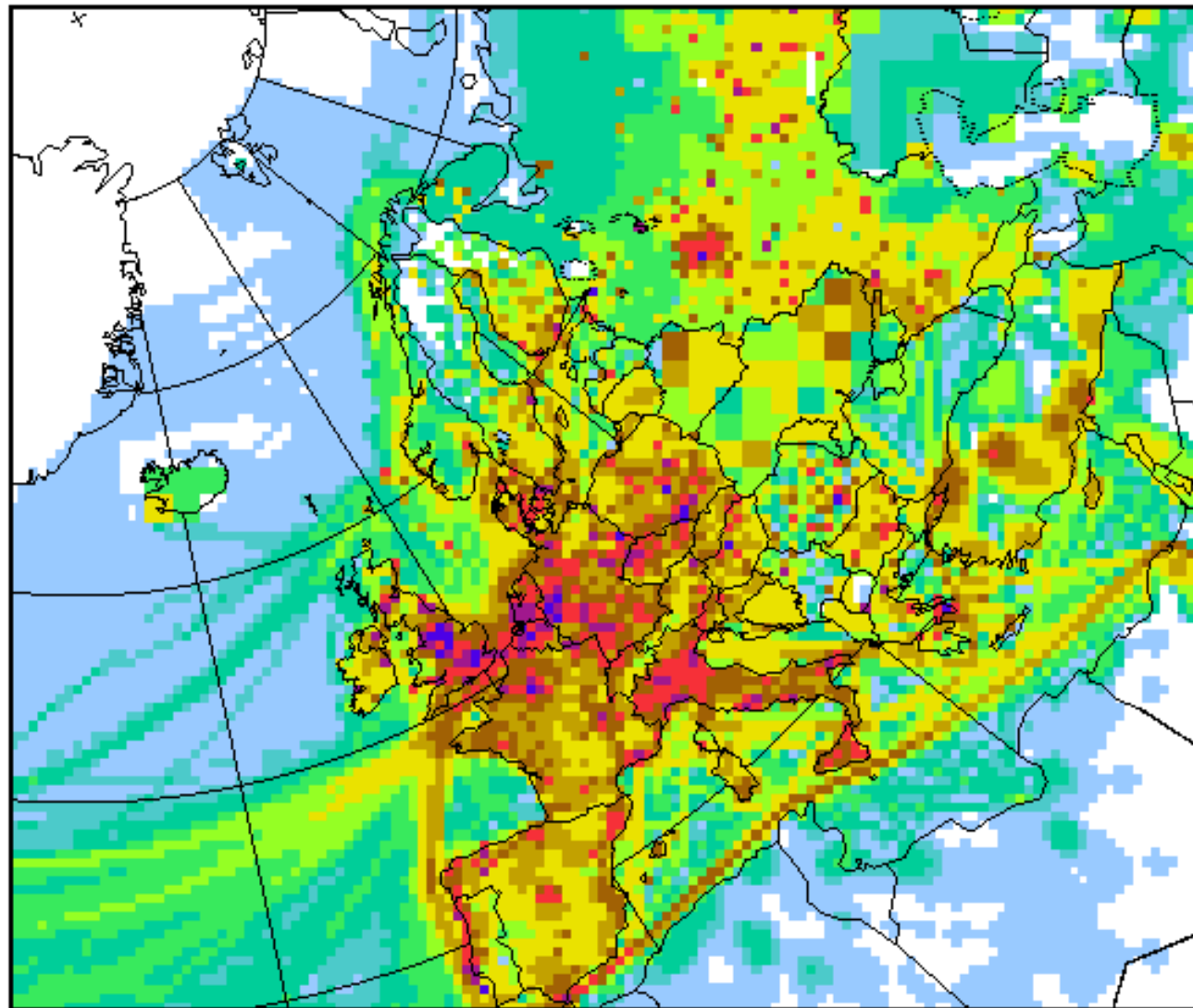
tonnes of CO



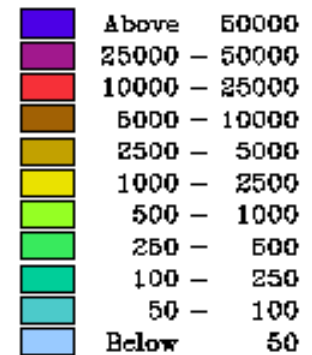
emep/msc-w



Emission of Nitrogen oxides in 1998  
(50km x 50km EMEP grid)

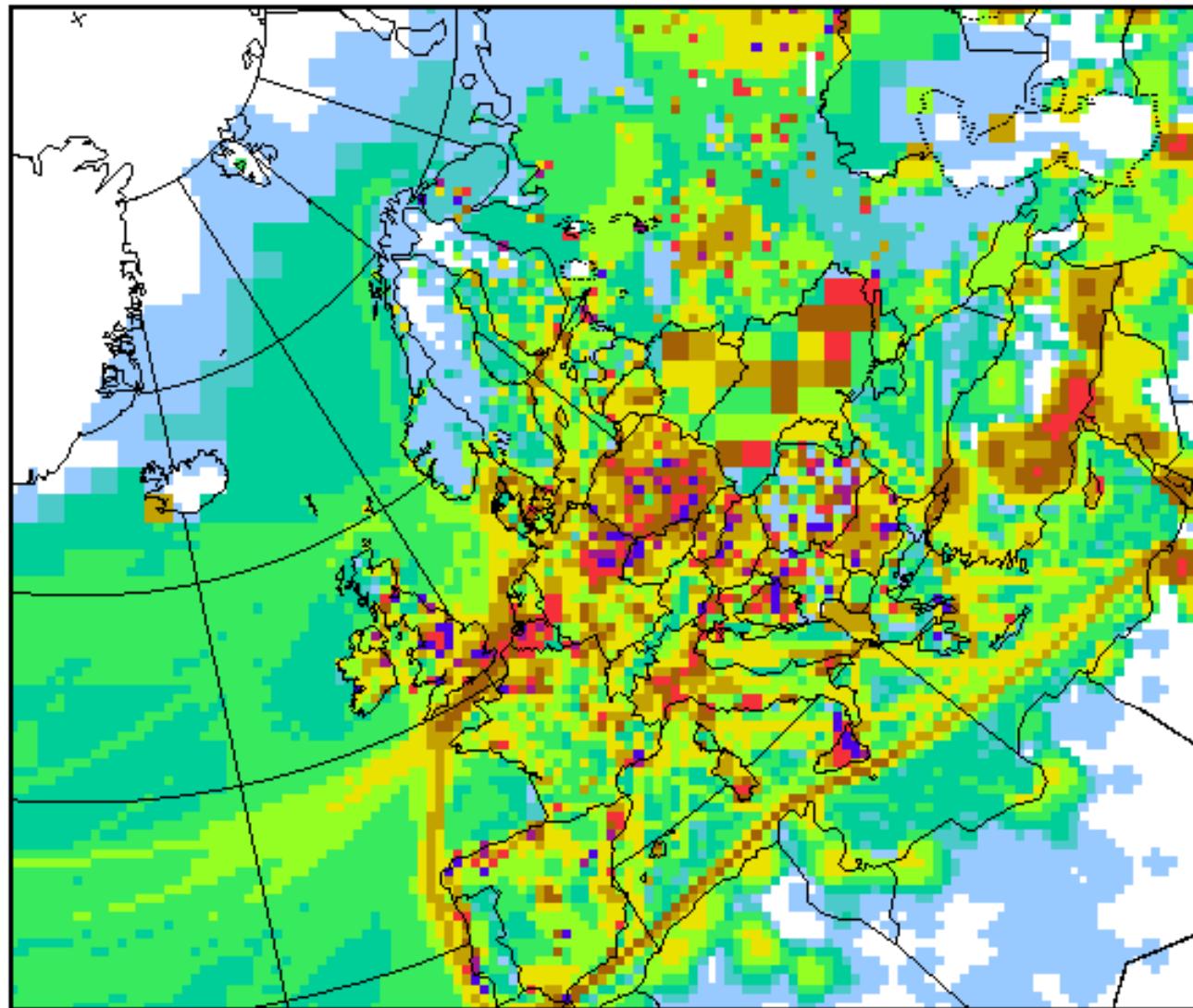


tonnes of NO<sub>2</sub>

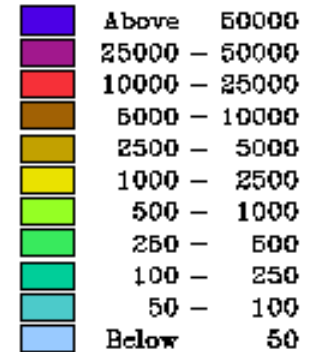


emep/msc-w

Emission of Sulphur dioxide in 1998  
(50km x 50km EMEP grid)



tonnes of SO<sub>2</sub>



emep/msc-w

# **IV. rész**

## Légkörkémiiai folyamatok modellezése

# A légszennyezés mértéke függ

## **Kibocsátási körülmények:**

mennyiség, koncentráció, magasság, hőmérséklet, páratartalom.

## **Levegőkémiai viselkedés:**

légköri élettartam, reakcióképesség, másodlagos folyamatok.

## **Meteorológiai viszonyok:**

-diszperzió (szél, a légkör stabilitása, keveredési réteg vastagsága).

-transzport: turbulens diffúzió, molekuláris diffúzió, ülepedés.

## **Behatolás a receptorba (-ra):**

passzív, aktív.

fizika

kémia

matematika

számítástechnika

meteorológia