Atmospheric POLLUTION

Lecture 9

Sahraei

Physics Departmentr
Razi university

http://www.razi.ac.ir/sahraei

Sources of Hydrocarbons

Photochemical Oxidants

Formation of Photochemical Oxidants

Interact chemically to produce powerful oxidants like

Ozone (O3) and peroxyacetyl nitrate (PAN)

These secondary pollutants are damaging to plant life and lead to the formation of photochemical smog

PAN is primarily responsible for the eye irritation so characteristic of this type of smog.

$$NO^{5}(g) + O^{5}(g) + HC \rightarrow CH^{3} - C(O) - O - O - NO^{5}(g)$$

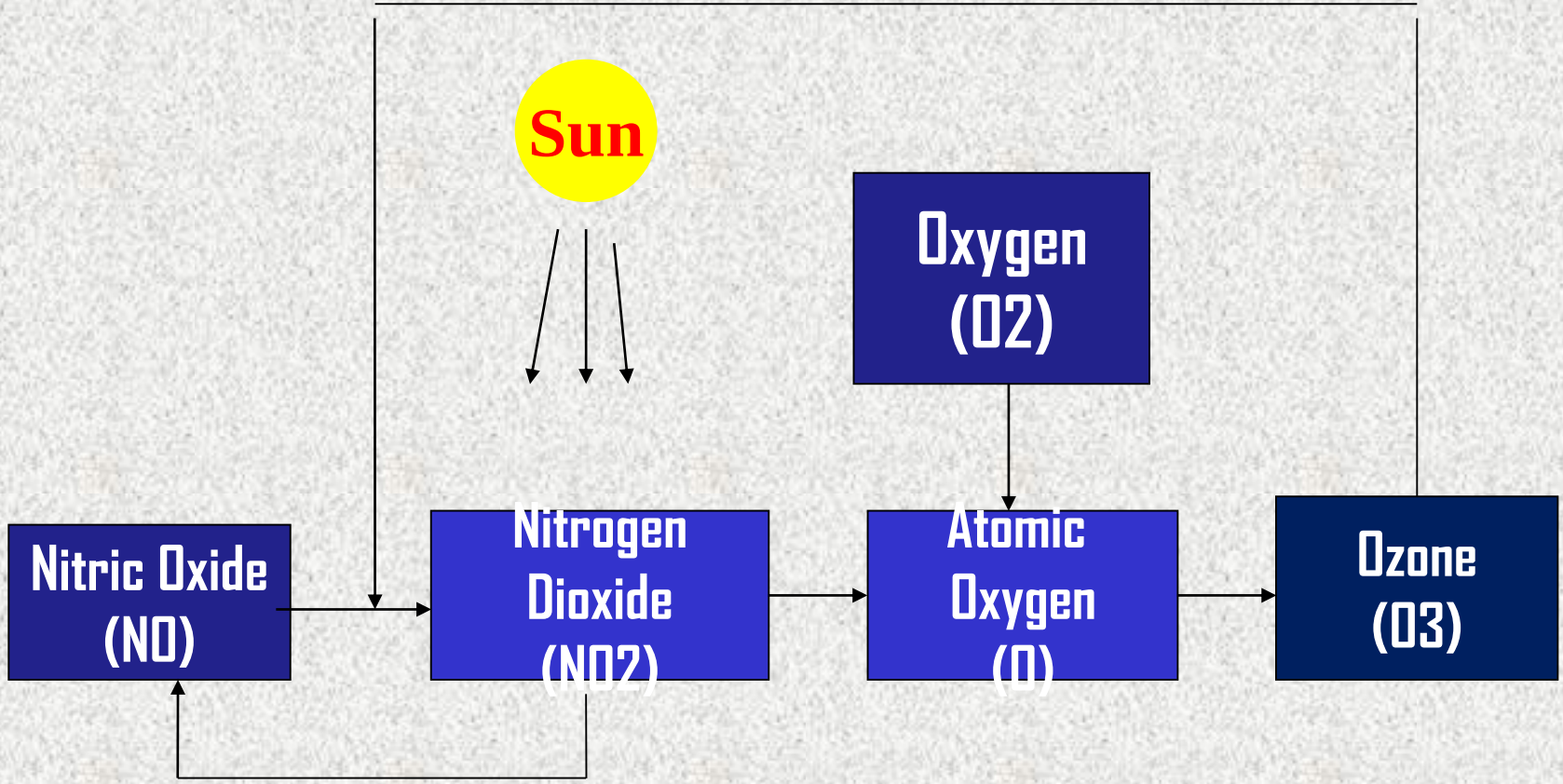
$$CH_3 - CH_2 - C(O) - O - O - NO_2$$

NO_2 Photolytic Cycle

$$NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O$$

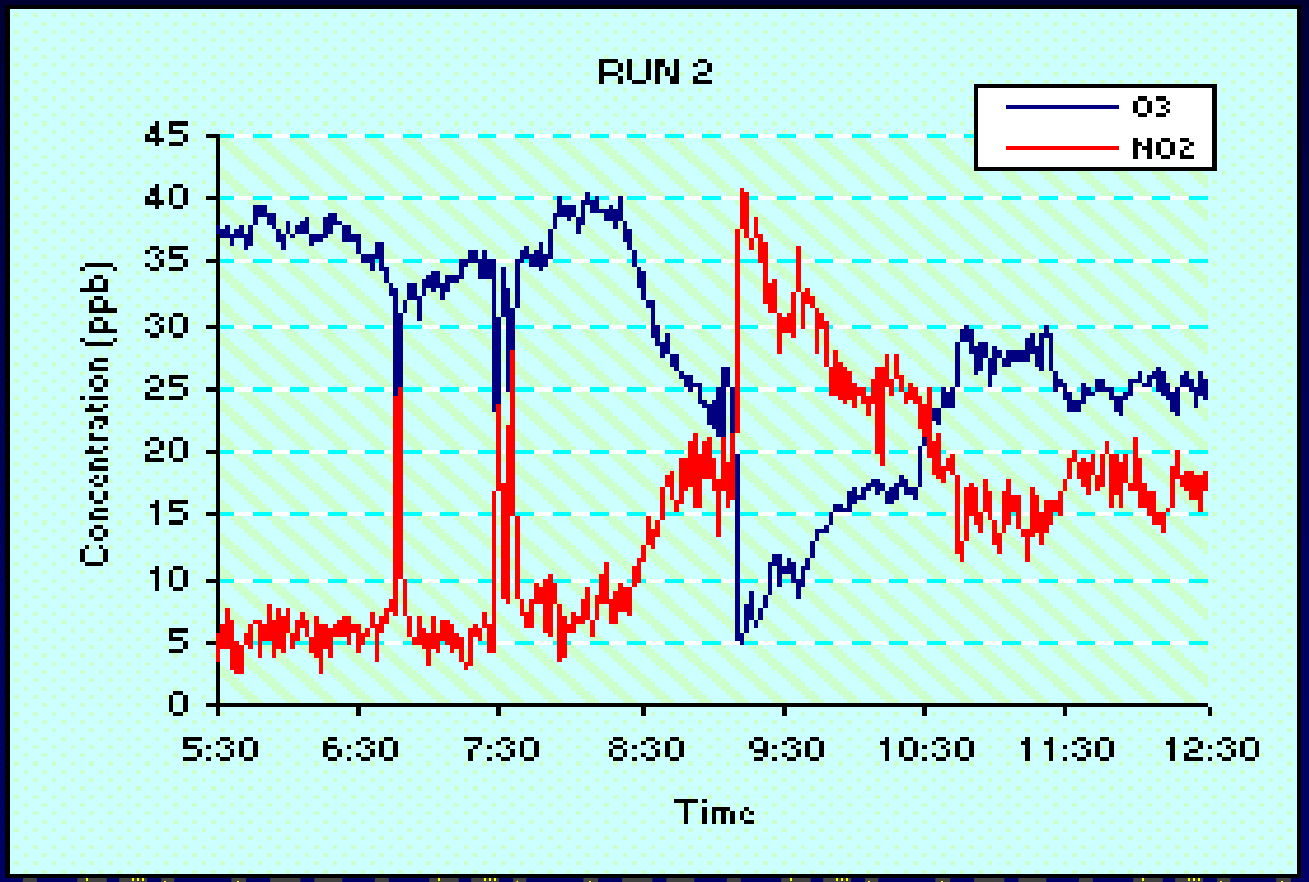
$$O + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$$

$$O_3 + NO \rightarrow NO_2 + O_2$$

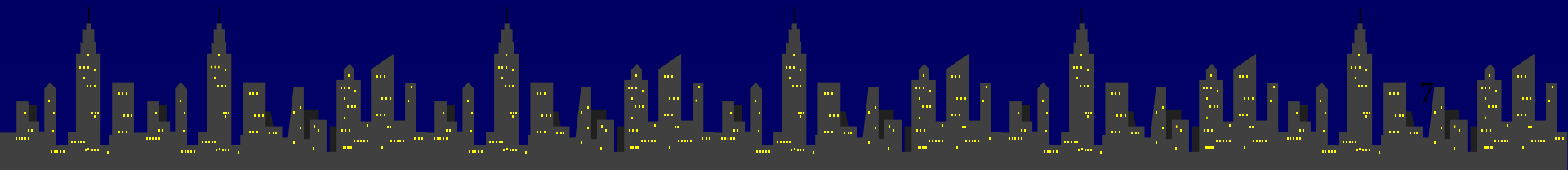

Sun
Oxygen
(O2)
Nitric Oxide
(NO)
Nitrogen
Dioxide
(NO2)
Atomic
Oxygen
(O)
Ozone
(O3)

Near the surface of the Earth, there is anti correlation between O_3 and NO_2 by reaction:

$$O_3 + NO \rightarrow NO_2 + O_2$$



$$Hydrocarbons + NO_x + \text{Sun light} \rightarrow Photochemical\ Smog$$



Pollution is reported in several ways

- Concentration
  - Amount of a particular material in large amount of air
  - Reported as mixing rations: ppm, ppb, volume/volume
  - Parts per million (ppm) 1 in 1,000,000
  - Parts per billion (ppb) 1 in 1,000,000,000
- Mass
  - Mass of impurity in a volume of air
  - Microgram per cubic meter ($\mu g/m^3$) ($\mu g=10^{-6}g$)
  - Milligram per cubic meter (mg/m^3)
- Air Quality Indices
  - Health-related, normalized scaling system
  - Physical units removed
  - Example: Healthy, Unhealthy, Very Unhealthy
  - Air Pollution Index (API), Air Quality Index (AQI), Pollutant Standards Index (PSI)

$$r_i = \frac{c_i}{c_{total}}$$

$$c_{total} = \frac{N}{V} = \frac{p}{RT}$$

$$r_i = \frac{c_i}{p / RT}$$

$$r_i = \frac{p_i / RT}{p / RT} = \frac{p_i}{p}$$

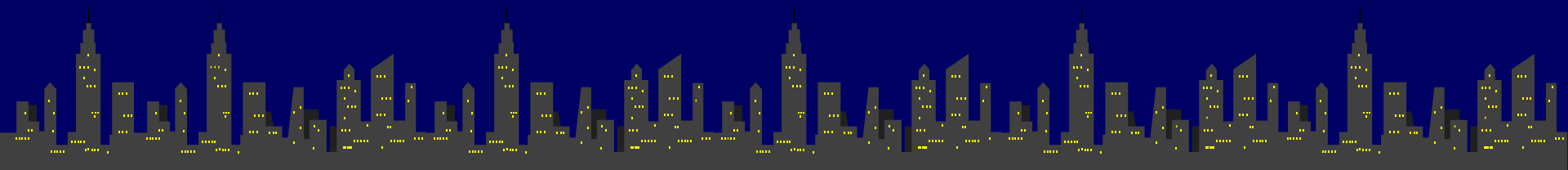
یکاهای نسبت آمیختگی در شیمی جو

$mmol\ mol^{-1}$	10^{-6}	قسمت در میلیون (ppm)
$nmol\ mol^{-1}$	10^{-9}	قسمت در میلیارد (ppb)
$pmol\ mol^{-1}$	10^{-12}	قسمت در تریلیون (ppt)

این یکاها گاهی اوقات توسط اضافه شدن v برای حجم و m برای جرم از هم تشخیص داده می شوند، یعنی:

قسمت در میلیون حجمی	ppmv
قسمت در میلیون جرمی	ppmm

مگر مشخص شده باشد در غیر این صورت همیشه نسبت آمیختگی حجمی بدون استفاده از v مورد استفاده قرار می گیرد.



مثال: در دمای $T = 298\ K$ و $p = 1\ atm$ غلظت بر حسب مولکول بر سانتی متر مکعب عبارت است از:

$$c = \frac{۱/۰۱۳۲۵\times۱۰^{۵}\ N/m^{2}}{(۸/۳۱۴\ \frac{Nm}{mol\ K})(۲۹۸\ K)} = ۴۰/۸۹۷\ \frac{mol}{m^{3}}$$

$$= (۴۰/۸۹۷\ \frac{mol}{m^{۳}})(\frac{m^{۳}}{۱۰^{۶}\ cm^{۳}})(\frac{۶/۰۲۲\times۱۰^{۲۳}\ molecules}{mol})$$

$$= ۲/۴۶۳\times۱۰^{۱۹}\ \frac{molecules}{cm^{۳}}$$

بنابراین در $T = 298\ \mathrm{K}$ و $p = 1\ \mathrm{atm}$ نسبت‌های آمیختگی و غلظت های متناظرشان عبارتند از:

1 ppm $2/463 \times 10^{13}\ \mathrm{molecules\ cm^{-3}}$

1 ppb $2/463 \times 10^{10}\ \mathrm{molecules\ cm^{-3}}$

مثال: تبدیل از نسبت آمیختگی به $mg\ cm^{-3}$

$$c_i = \frac{۱۰^{-۶} m_i}{M_i}$$

که در آن M_i وزن مولکولی جزء i است

غلظت مولی کل هوا در فشار p و دمای T برابر با $c = p / RT$ است،

$$\text{غلظت i بر حسب } \mu g\ cm^{-۳} \times \frac{RT}{pM_i} = \text{نسبت آمیختگی i برحسب ppm}$$

$$\text{غلظت i بر حسب } \mu g\ cm^{-۳} \times \frac{۸/۳۱۴T}{pM_i} = \text{نسبت آمیختگی i بر حسب ppm}$$

مثال: برای به دست آوردن غلظت بر حسب $mg\ cm^{-3}$ برای O_3 که نسبت آمیختگی آن 120 ppb در فشار 1 جو و دمای 298 کلوین است خواهیم داشت:

$$\text{غلظت بر حسب } \mu g\ cm^{-3} = \frac{p\ M_i}{۸/۳۱۴\ T} \times \text{نسبت آمیختگی بر حسب ppm}$$

$$= \frac{(۱/۰۱۳۳ \times ۱۰^{۵})(۴۸)}{۸/۳۱۴(۲۹۸)} \times ۰/۱۲$$

$$= ۲۳۵/۶\ \mu g\ m^{-۳}$$

اکنون برای تبدیل $365\ mg\ m^{-3}$ گوگرد دی اکسید (SO_2) در همان دما و فشار به ppm خواهیم داشت:

$$\text{نسبت آمیختگی بر حسب ppm} = \frac{(۸/۳۱۴)(۲۹۸)}{(۱/۰۱۳۳ \times ۱۰^{۵})(۶۴)} \times ۳۶۵ = ۰/۱۳۹\ \text{ppm}$$

تاثیرات آلایتده های اصلی بر سلامت انسان

آلاینده	اثرات
کربن منواکسید	مسموم شدن سیستم مرکزی عصبی و قلب، سردرد، سرگیجه، تاثیر بر جنین، محدود شدن اکسیژن مصرفی، مرگ
گوگرد دی اکسید	تحریکات چشم، بینی وگلو- آسم و برنشیت
نیتروژن دی اکسید	تجمع مایعات زیاد در ریه ها، مشکلات تنفسی
ازن	مشکلات تنفسی، سرفه، درد قفسه سینه، سوزش چشم
ذرات معلق	آسم، سرطان ریه، مشکلات قلبی- عروقی
هیدروکربن ها	در غلظت زیاد آسیب به دستگاه تنفسی، تاثیر بر جنین

Air quality standards

The legislative basis for air pollution abatement in the USA is the *1963 Clean Air Act and its amendments.*

The Act and its amendments provide for the establishment of two kinds of national ambient air quality standards.

Primary ambient air quality standards: those measures to protect *public health.*

Secondary ambient air quality standards: specify a level of pollutant concentrations requisite to the *public welfare* from any known or anticipated adverse effects associated with the presence of such air pollutants in the air.

These effects include damage to crops and vegetation, wildlife, visibility, climate and economy.

The Pollutant Standards Index

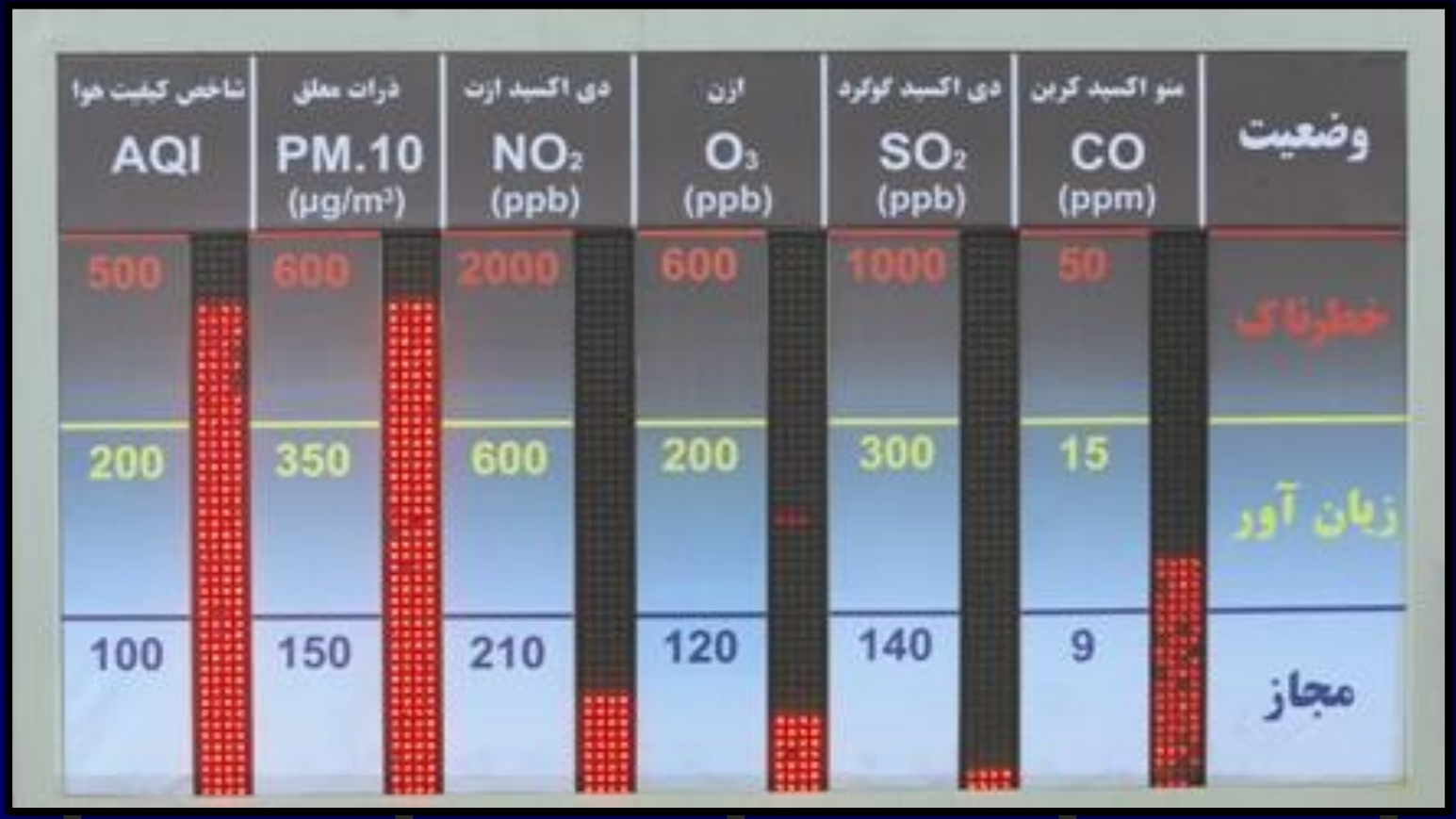
The total air pollution index of a region is calculated using the maximum concentration of the following 5 pollutants:

pollutant (CO, SO_2, NO_2, O_3, PM_{10}) measurement is converted to a number that ranges from 0 to 500;

Pollutant value = primary ambient air quality standard, then, the pollutant is assigned PSI number

The PSI is based on hourly urban background monitoring and is automatically updated on the www every hour.

The hourly values are raw data.



The PSI Air Quality Scale

PSI Values	Levels in relation to health	Color scale
When index (AQI) lies in range:	*...the air quality conditions are:*	*...marked by*
0 to 50	Good	Green
51 to 100	Moderate	Yellow
101 to 150	Unhealthy for sensitive groups	Orange
151 to 200	Unhealthy	Red
201 to 300	Very Unhealthy	Purple
301 to 500	Hazardous	Black

Pollutant concentrations are reported as time-averaged values
Examples include

- Hourly
- 8-hr
- 24-hr/Daily
- Seasonal

Forecast objective and standards need to be considered to determine which averaging should be used

Based on the averaging period used, different meteorological processes and information will need to be considered during forecasting

National Ambient Air Quality Standards

Carbon Monoxide (CO)	9 ppm, 8-hr 35 ppm, 1-hr
Ozone (O_3)	0.12 ppm, 1-hr 0.08 ppm, 8-hr
Particulate Matter < 10 μm diameter (PM10)	50 μg/m^3, annual 150 μg/m^3, 24-hr
Particulate Matter < 2.5 μm diameter (PM2.5)	15 μg/m^3, annual 65 μg/m^3, 24-hr

PSI

متوسط 24 ساعته TSP(µm/m^3)	متوسط 24 ساعته SO_2(ppb)	متوسط 24 ساعته PM-10(µm/m^3)	متوسط 8 ساعته CO(ppm)	متوسط 1 ساعته O_3(ppb)	متوسط 24 ساعته NOx(ppb)	شاخص PSI
0.00	**0.00**	**0.00**	**0.00**	**0.00**	**0.00**	0
75.00	**30.00**	**75.00**	**4.50**	**60.00**	**150.00**	50
260.00	**140.00**	**150.00**	**9.00**	**120.00**	**200.00**	100
375.00	**300.00**	**375.00**	**15.00**	**200.00**	**600.00**	200
625.00	**600.00**	**625.00**	**30,00**	**400.00**	**1200.00**	300
875.00	**800.00**	**875.00**	**40.00**	**500.00**	**1600.00**	400
1000.00	**1000.00**	**1000.00**	**50.00**	**600.00**	**2000.00**	500

شاخص استانداردهای آلاینده های هوا

I شاخص استاندارد	TSP (24 ساعته) ($\mu g/m^3$)	SO2 (24 ساعته) ($\mu g/m^3$)	NO2 (1 ساعته) ($\mu g/m^3$)	O3 (1 ساعته) ($\mu g/m^3$)	CO (8 ساعته) (mg/m^3)
0	0	0		0	0
50	75	80		118	5
100	260	350		235	10
200	375	800	1130	400	17
300	625	1600	2260	800	34

شیوه محاسبه PSI

$$I = \frac{I_H - I_L}{C_H - C_L}(C - C_L) + I_L$$

که در این رابطه، I شاخص کیفیت هوا، C غلظت آلاینده است.

C_L نقطه گسستگی غلظت که مساوی یا کوچکتر از C است.

C_H نقطه گسستگی غلظت که مساوی یا بزرگتر از C است.

I_L نقطه گسستگی شاخص متناظر با C_L.

I_H نقطه گسستگی شاخص متناظر با C_H.

مثال: شاخص استاندارد آلاینده‌های هوا را در روزی که غلظت آلاینده‌ها به شرح زیر اندازه‌گیری شده است، تعیین نمایید.

آلاینده	غلظت
CO (8 ساعته)	10 mg/m^3
O_3 (1 ساعته)	220 $\mu g/m^3$
NO_2 (1 ساعته)	650 $\mu g/m^3$
SO_2 (24 ساعته)	120 $\mu g/m^3$
TSP (24 ساعته)	390 $\mu g/m^3$

$$I = \frac{300-200}{625-375}(390-375)+200 = 206$$

PSI برابر 206، بنابراین کیفیت هوا بسیار ناسالم است.

مثال: فرض کنید در یک روز حداکثر غلظت اندازه گیری شده مواد آلاینده به شرح زیر باشد.

O_3 یک ساعته	250 $\mu g/m^3$
CO 8 ساعته	10 mg/m^3
TSP 24 ساعته	50 $\mu g/m^3$
SO_2 24 ساعته	100$\mu g/m^3$

PSI مربوط به روز مورد نظر را محاسبه کرده و کیفیت هوا را بررسی کنید.

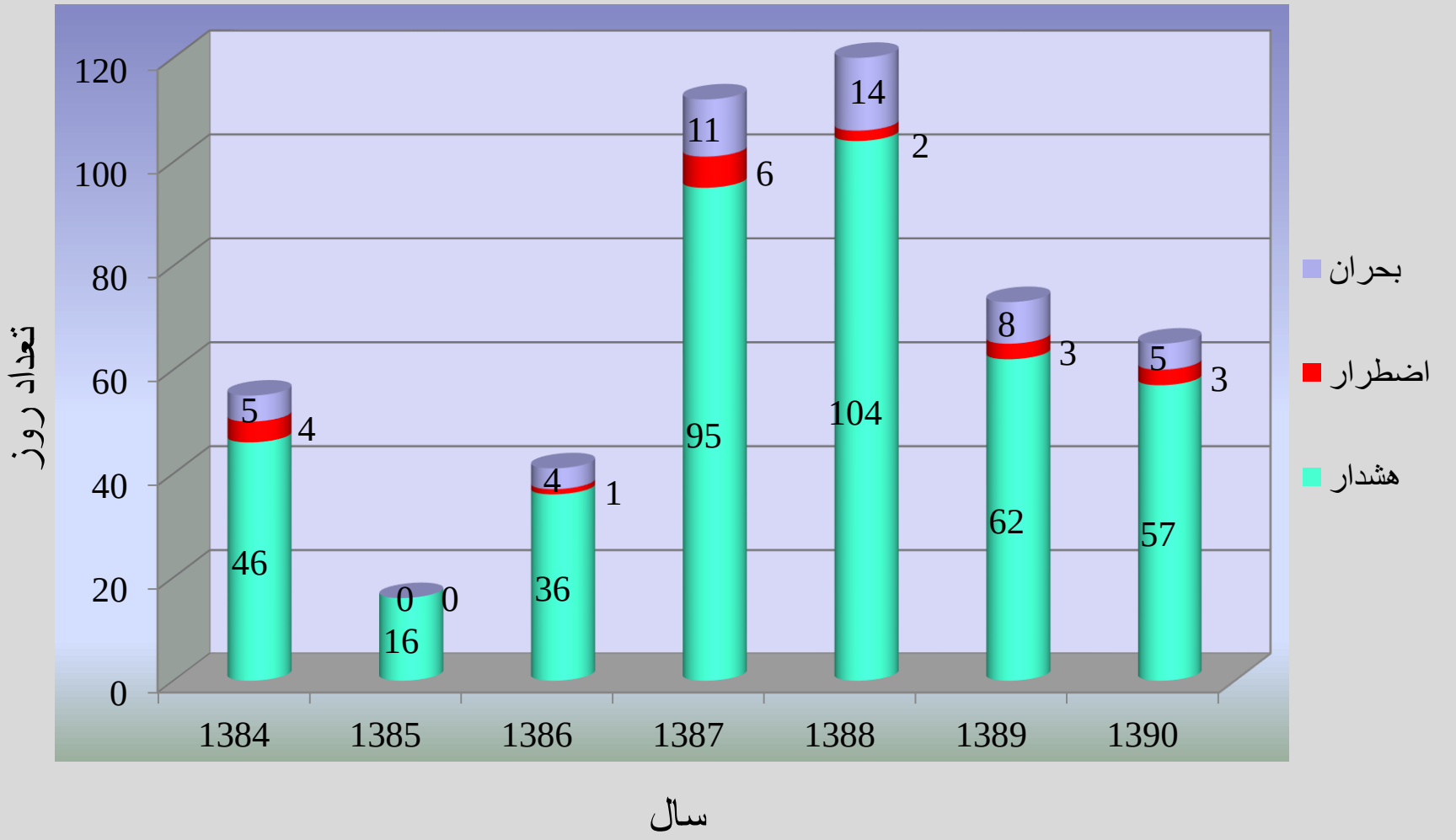
با بررسی زیر شاخص محاسبه شده زیر شاخص ازن بیشترین مقدار را داراست بنابراین PSIکلی در این مورد را زیر شاخص ازن مشخص می کند.

غلظت ازن $\mu g/m^3$	زیر شاخص
235	100
250	X
400	200

PSI=100+(250-235)/(400-235)*(200-100)=109

با PSIبرابر 109 هوا از نظر کیفی نا سالم خواهد بود.

اعلام وضعیت سه گانه در شهر کرمانشاه



100 ≤ PSI ≤ 250 warning conditions
250 ≤ PSI ≤350 emergency condition
PSI ≥ 350 critical condition