



ΟΜΙΛΗΤΗΣ: κα Αλεξάνδρα Τσιμπίδη
Υπεύθυνος Διατριβής: Καθηγ. Σ. Πανδής

ΘΕΜΑ: Μοντελοποίηση των πρωτογενών και δευτερογενών ατμοσφαιρικών οργανικών σωματιδίων με χρήση κατανομής πτητικότητας: εφαρμογή στην πόλη του Μεξικού.

Evaluation of the Volatility Basis-Set Approach for the Simulation of Organic Aerosol Formation in the Mexico City Metropolitan Area.

ΤΟΠΟΣ: Αίθουσα Σεμιναρίων ΙΤΕ/ΕΙΧΗΜΥΘ

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ: Τετάρτη, 17 Ιουνίου 2009

ΩΡΑ: 12:00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ:

Η συνεχής αύξηση της ατμοσφαιρικής ρύπανσης έχει σοβαρές επιπτώσεις στην υγεία του ανθρώπου, στη γεωργία και στο κλίμα. Η οργανική μάζα (ΟΜ) αποτελεί σχεδόν το 20-50% των συνολικών ατμοσφαιρικών σωματιδίων στα μέσα ηπειρωτικά γεωγραφικά πλάτη. Στη πόλη του Μεξικού σχεδόν το 50% της συνολικής μάζας των ατμοσφαιρικών σωματιδίων διαμέτρου έως 2.5 μm (PM_{2.5}) αποτελείται από οργανικές ενώσεις. Η κατά μέσο όρο συγκέντρωση σε ΟΜ στο κέντρο της πόλης του Μεξικού ανερχόταν στα 10 μg m⁻³ το Μάρτιο του 1997. Συγκρίσιμα επίπεδα συγκέντρωσης έχουν παρατηρηθεί στο Λος Άντζελες καθώς και στις τρεις μεγαλупόλεις της Κίνας, Πεκίνο, Σαγκάη, και Γκουανγκζού. Παρόλο που η ΟΜ αποτελεί ένα σημαντικό ποσοστό PM_{2.5} παγκοσμίως, η συνεισφορά τόσο των πηγών πρωτογενών όσο και των δευτερογενών οργανικών σωματιδίων είναι δύσκολο να υπολογιστεί. Τα οργανικά σωματίδια προέρχονται από διαφορετικές φυσικές και ανθρωπογενείς πηγές και διεργασίες. Πρωτογενή οργανικά σωματίδια ονομάζονται κατά παράδοση η ΟΜ που εκπέμπεται στην ατμόσφαιρα απευθείας στη σωματιδιακή φάση, όπως γίνεται παραδείγματος χάρη κατά τη καύση βενζίνης, πετρελαίου, ξύλων και άλλων καυσίμων. Δευτερογενή οργανικά σωματίδια (SOA) ονομάζονται τα σωματίδια που σχηματίζονται στην



ατμόσφαιρα από αέριους ρύπους μέσω αέριας, σωματιδιακής και υγρής φάσης αντιδράσεις. Τα πρωτογενή και δευτερογενή οργανικά σωματίδια λόγω αυτών των διαφορετικών μηχανισμών προέλευσης και σχηματισμού τους έχουν διαφορετικές χημικές και φυσικές ιδιότητες. Επομένως, έχοντας σαν απώτερο σκοπό τη αποτελεσματική σχεδίαση στρατηγικών ελέγχου των ατμοσφαιρικών σωματιδίων καθώς επίσης και το προσδιορισμό της σπουδαιότητάς τους τόσο στο τοπικό όσο και στο παγκόσμιο κλίμα, θα πρέπει να προσδιορίσουμε τις συγκεντρώσεις, τις ιδιότητες και τις πηγές αυτών των δυο διαφορετικών τύπων οργανικών σωματιδίων.

Τα χημικά τρισδιάστατα μοντέλα θεωρούσαν μέχρι τώρα ότι τα εκπεμπόμενα πρωτογενή οργανικά σωματίδια είναι μη πτητικά και μη ενεργά, ενώ τα δευτερογενή είναι τα ημιπτητικά προϊόντα της οξειδωσης των πτητικών οργανικών ενώσεων (VOCs). Αυτό όμως δεν ισχύει. Τα πρωτογενή οργανικά σωματίδια στη πραγματικότητα είναι ημιπτητικά και στην ατμόσφαιρα υφίστανται καταμερισμό μεταξύ της αέριας και της σωματιδιακής φάσης συναρτήσει της πτητικότητάς τους, της ήδη υπάρχουσας συγκέντρωσης σε ΟΜ και της θερμοκρασίας. Επιπλέον, σύμφωνα με πρόσφατες μελέτες πεδίου, τα SOA που σχηματίζονται γύρω από το κέντρο μιας αστικής περιοχής είναι υποτιμημένα από τα υπάρχοντα μοντέλα καθώς αυτά βασίζονται στις μέχρι τώρα γνωστές αέριες πρόδρομες οργανικές ενώσεις σχηματισμού τους.

Σε αυτή την εργασία με τη χρήση του τρισδιάστατου χημικού μοντέλου PMCAMx προσομοιώνεται αναλυτικά η πτητικότητα όλων των οργανικών στοιχείων, συμπεριλαμβάνοντας τόσο τις πρωτογενείς οργανικές εκπομπές όσο και τα δευτερογενή προϊόντα αντιδράσεων οξειδωσης. Επίσης μοντελοποιούνται οι αντιδράσεις των ημιπτητικών ενώσεων στην αέρια φάση. Σε κάθε χρονικό βήμα των αντιδράσεων αλλάζει η κατανομή πτητικότητας των οργανικών ενώσεων με αποτέλεσμα να αλλάζει και η συνολική οργανική μάζα. Το μοντέλο εφαρμόστηκε στην ευρύτερη περιοχή της πόλης του Μεξικού για περίπου μια εβδομάδα, 12-16 Απριλίου το 2003.