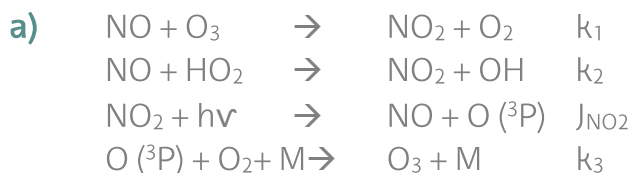


KUTSADURA ATMOSFERIKOAREN KIMIKA

2. UNITATE DIDAKTIKOAREN ARIKETEN EBAZPENA

1 ARIKETA.



b)

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = -k_1 \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{O}_3] - k_2 \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{HO}_2] + J_{\text{NO}_2} \cdot [\text{NO}_2]$$

$$\frac{d[\text{O}_3]}{dt} = -k_1 \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{O}_3] + k_3 \cdot [\text{O}] \cdot [\text{O}_2] \cdot [\text{M}]$$

$$\frac{d[\text{NO}_2]}{dt} = -\frac{d[\text{NO}]}{dt} = k_1 \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{O}_3] + k_2 \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{HO}_2] - J_{\text{NO}_2} \cdot [\text{NO}_2]$$

$$\frac{d[\text{HO}_2]}{dt} = -k_2 \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{HO}_2]$$

$$\frac{d[\text{OH}]}{dt} = k_2 \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{HO}_2]$$

$$\frac{d[\text{O}]}{dt} = J_{\text{NO}_2} \cdot [\text{NO}_2] - k_3 \cdot [\text{O}] \cdot [\text{O}_2] \cdot [\text{M}]$$

c) Egoera fotoegonkorrean

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = -k_1 \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{O}_3] - k_2 \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{HO}_2] + J_{\text{NO}_2} \cdot [\text{NO}_2] = 0$$

$[\text{HO}_2] \approx 0$ bada, ozonoaren kontzentrazioa honakoa da:

$$[\text{O}_3] = \frac{J_{\text{NO}_2} \cdot [\text{NO}_2]}{k_1 \cdot [\text{NO}]}$$

2 ARIKETA.

Deposizio-abiadura ozono-zutabea lurzoruan jalkitze-tasaren parekoa dela suposatuz ($0,4 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$), 5 kilometrotako ozono-geruza agortzeko denbora:

$$\frac{5 \text{ km}}{0,4 \cdot 10^{-5} \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}} = 12,5 \cdot 10^5 \text{ s} = 14,47 \text{ egun}$$

Deposizio-abiadura ≈ 15 egun

Lortutako emaitza, ozonoaren egoitza-denborarekin alderatuz (egunetatik asteetara) hori baino handiago dela egiaztatu daiteke; izan ere, deposizio-abiadurak ez ditu kontuan atmosferatik ozonoa 'kentzen' duten beste mekanismo batzuk.

3 ARIKETA.

Loschmidt – en zenbakia, 1atm eta 288 K,

$$= 6,023 \cdot 10^{23} \text{ molekula} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\cdot \frac{1 \text{ atm}}{0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 288 \text{ K}^{-1}} \cdot \frac{1 \text{ L}}{10 \text{ cm}^{-3}}$$

$$= 2,55 \cdot 10^{19} \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3}$$

$$[\text{CH}_4] = 1,85 \text{ ppm}_v = 1,85 \cdot 10^{-6} \cdot 2,55 \cdot 10^{19} \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3} = 4,72 \cdot 10^{13} \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3}$$

Metanoaren suntsipen-abiadura:

$$-\frac{d[\text{CH}_4]}{dt} = k \cdot [\text{CH}_4] \cdot [\text{OH}]$$

$$= 3,6 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^3 \cdot \text{molekula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot 4,72 \cdot 10^{13} \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot 8,0 \cdot 10^5 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3}$$

$$= 1,36 \cdot 10^5 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3}$$

$$-\frac{d[\text{CH}_4]}{dt} = 1,36 \cdot 10^5 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$$

Suntsipen-abiadura hau eskatutako unitateetan:

$$-\frac{d[\text{CH}_4]}{dt} = 1,36 \cdot 10^5 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \frac{10^3 \text{ cm}^3}{1 \text{ L}} \cdot \frac{16 \text{ g CH}_4}{1 \text{ mol}} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{6,023 \cdot 10^{23} \text{ molekula}}$$

$$-\frac{d[\text{CH}_4]}{dt} = 3,61 \cdot 10^{-15} \text{ gCH}_4 \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$\begin{aligned}
 -\frac{d[CH_4]}{dt} &= 3,61 \cdot 10^{-5} \text{ gCH}_4 \cdot \text{L}^{-1} \text{ s}^{-1} \cdot \left[5 \cdot 10^{21} \text{ g} \cdot \frac{1 \text{ mol}}{29 \text{ g}} \cdot \frac{23,616 \text{ L}}{1 \text{ mol}} \right] \\
 &= 3,61 \cdot 10^{-5} \text{ gCH}_4 \cdot \text{L}^{-1} \text{ s}^{-1} \cdot 4,15 \cdot 10^{21} \text{ L aire} \cdot (3600 \text{ s} \cdot 24 \text{ h} \cdot 365 \text{ egun}) \cdot \frac{1 \text{ Tg}}{10^{12} \text{ g}} \\
 -\frac{d[CH_4]}{dt} &= 473,8 \text{ Tg} \cdot \text{urte}^{-1}
 \end{aligned}$$

4 ARIKETA.

Isopreno edo 2-metil-1,3-butadieno (C_5H_8) azkar degradatzen da atmosferan OH erradikalarekin erreazionatzen duenean eta hurrengo erreakzioari jarraiki:

$$\begin{aligned}
 -\frac{d[C_5H_8]}{dt} &= k_{OH} \cdot [OH] \cdot [C_5H_8] = 1 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3 \cdot \text{molekula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot [OH] \cdot 5,9 \cdot 10^{10} \text{ molekula cm}^{-3} \\
 -\frac{d[C_5H_8]}{dt} &= 4,7 \cdot 10^6 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}
 \end{aligned}$$

[OH] bakanduz

$$[OH] = \frac{4,7 \cdot 10^6 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}}{1 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3 \cdot \text{molekula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot 5,9 \cdot 10^{10} \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3}} = 7,97 \cdot 10^5 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3}$$

Loschmidt – en zenbakia, 1atm y 298 K,

$$= 6,023 \cdot 10^{23} \text{ molekula} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\cdot \frac{1 \text{ atm}}{0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 298 \text{ K}^{-1}} \cdot \frac{1 \text{ L}}{10 \text{ cm}^{-3}}$$

$$= 2,46 \cdot 10^{19} \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3}$$

$$[OH] = \frac{7,97 \cdot 10^5 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3}}{2,46 \cdot 10^{19} \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3}} \cdot 10^{12} = 0,03 \text{ pptv}$$

Horrez gain, isoprenoa edo 2-metil-1,3-butadienoa (C_5H_8) azkar degradatzen da atmosferan O_3 -arekin erreazionatzen duenean:

$$\begin{aligned}
 -\frac{d[C_5H_8]}{dt} &= k_{OH} \cdot [O_3] \cdot [C_5H_8] = 1,2 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^3 \cdot \text{molekula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot [O_3] \cdot 5,9 \cdot 10^{10} \text{ molekula cm}^{-3} \\
 -\frac{d[C_5H_8]}{dt} &= 2,0 \cdot 10^6 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}
 \end{aligned}$$

[O_3] bakanduz,

$$[O_3] = \frac{2,0 \cdot 10^6 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}}{1,2 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^3 \cdot \text{molekula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot 5,9 \cdot 10^{10} \text{ moléculas} \cdot \text{cm}^{-3}} = 2,82 \cdot 10^{12} \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3}$$

$$[\text{O}_3] = \frac{2,82 \cdot 10^{12} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3}}{2,46 \cdot 10^{19} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3}} \cdot 10^9 = \mathbf{114,3 \text{ ppb}_v}$$

5 ARIKETA.

$$\begin{aligned} \text{Loschmidt – en zenbakia, 1atm eta 300 K,} \\ = 6,023 \cdot 10^{23} \text{molekula} \cdot \text{mol}^{-1} \\ \cdot \frac{1 \text{ atm}}{0,082 \text{ atm} \cdot \text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot 300 \text{ K}^{-1}} \cdot \frac{1 \text{ L}}{10 \text{ cm}^{-3}} \\ = \mathbf{2,45 \cdot 10^{19} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3}} \end{aligned}$$

Loschmidt-en zenbakia erabiliz, kontzentrazioak molekuletara zentimetro kubikoko alda daitezke. Azken unitate horiek, abiadura-koefizienteekin bateragarriak dira.

$$[\text{NO}] = 80 \text{ ppb}_v = 80 \cdot 10^{-9} \cdot 2,45 \cdot 10^{19} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3} = 1,96 \cdot 10^{12} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3}$$

$$[\text{O}_3] = 40 \text{ ppb}_v = 40 \cdot 10^{-9} \cdot 2,45 \cdot 10^{19} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3} = 9,8 \cdot 10^{11} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3}$$

$$[\text{O}_2] = 0,20946\% = 209460 \text{ ppm}_v = 209460 \cdot 10^{-6} \cdot 2,45 \cdot 10^{19} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3} = 5,13 \cdot 10^{18} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3}$$

Ozonoak eragindako oxido nitrikoaren oxidazioa:



$$\begin{aligned} \frac{d[\text{NO}_2]}{dt} &= k_1 \cdot [\text{NO}] \cdot [\text{O}_3] = 2 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^3 \cdot \text{molekula}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot 1,96 \cdot 10^{12} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \\ &\quad \cdot 9,8 \cdot 10^{11} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3} = 3,84 \cdot 10^{10} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1} \end{aligned}$$

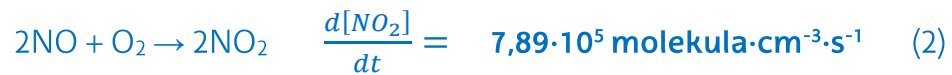
$$\frac{d[\text{NO}_2]}{dt} = \mathbf{3,84 \cdot 10^{10} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}}$$

Oxigenoak eragindako oxido nitrikoaren oxidazioa:



$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \cdot \frac{d[\text{NO}_2]}{dt} &= k_2 \cdot [\text{NO}]^2 \cdot [\text{O}_2] = 2 \cdot 10^{-38} \text{ cm}^6 \cdot \text{molekula}^{-2} \cdot \text{s}^{-1} \cdot [1,96 \cdot 10^{12} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3}]^2 \\ &\quad \cdot 5,13 \cdot 10^{18} \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3} = 3,94 \cdot 10^5 \text{molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1} \end{aligned}$$

$$\frac{d[NO_2]}{dt} = 7,89 \cdot 10^5 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$$



Prozesu menderatzailea (1) ozonoak eragindako oxidazioa da, izan ere **lehen erreakzioak (1) NO₂ ekoizten du**, $3,84 \cdot 10^{10} \text{ molekula cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ / $7,89 \cdot 10^5 \text{ molekula} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ –ko abiadurarekin **bigarren erreakzioa (2) baino $4,87 \cdot 10^4$ aldiz azkarrago**.