

A levegő aeroszol-tartalmának mennyiségi és minőségi analízise

Gázok dinamikájának alapvető összefüggései

→ Molekula sebesség, szabad úthossz, Reynolds szám

Aeroszol részecskék dinamikai tulajdonságai

→ Lineáris és görbült mozgási pályák, Koaguláció

Részecskeméret-eloszlás

→ A méreteloszlás tulajdonságai

Aeroszolak optikai tulajdonságai

→ Szórás, elnyelés, extinkció

Aeroszol mérési módszerek

→ Az alkalmazások és módszerek áttekintése, mintavételezés hibái

Gázok tulajdonságai: viszkozitás

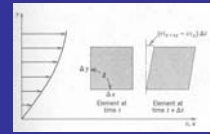
A Newton-féle viszkozitási törvény összefüggést ad a nyíró feszültség és a sebességgradiens között:

$$\mu = \frac{\text{nyírófeszültség}}{\text{sebességgradiens}} = \frac{\tau}{dv/dy} ; \tau = \frac{F}{\Delta x^2}$$

Megmutatható, hogy gázokra:

$$\mu = \frac{2}{3\pi^{3/2}} \frac{\sqrt{mkT}}{d^2}$$

Látható, hogy μ független a nyomástól.



Levegő standard nyomáson:

	Hőmérséklet		
	0°C	20°C	egység
Viszkozitás	1.72×10^{-6}	1.81×10^{-6}	$\text{N m}^{-2} \text{s} = \text{Pa s}$
Sűrűség	1.29	1.2	kg m^{-3}
Diffúziós együttható	0.18	0.19	$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$

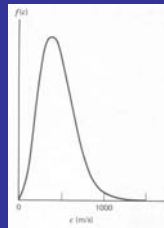
Gázok tulajdonságai: molekuláris sebesség

A kinetikus gázelmélet szerint a sebesség effektív értéke arányos a hőmérséklet négyzetgyökével:

$$c_{rms} = \sqrt{c^2} = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$$

A sebességeloszlást a Maxwell-Boltzmann eloszlással írhatjuk le. Az eloszlás aszimmetrikus, ezért az átlag nem egyezik meg az effektív értékkel c_{rms} :

$$\bar{c} = \int_0^{\infty} cf(c)dc = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}}$$



Gázok sebessége 20°C hőmérsékleten

	M	Átlagssebesség (cm/s)
H ₂	2	176000
Levegő	28	46300
Hg	201	17600

Gázok tulajdonságai: Szabad úthossz (λ)

Az átlagos távolság amit egy molekula két ütközés között megtesz:

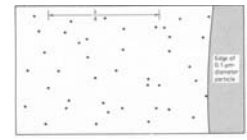
$$\lambda = \frac{\bar{c}}{n_z} \quad \text{ahol} \quad n_z = \sqrt{2}n\pi d_m^2 \bar{c} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{1}{\sqrt{2}n\pi d_m^2}$$

Ahol n_z az átlagos ütközési frekvencia, n a molekulakoncentráció, és d_m a molekula ütközési átmérője. Levegőre $d_m = 0.37 \text{ nm} = 3.7 \text{ \AA}$.

Molekulák mérete és elhelyezkedése standard körülmények között

Jellemző méretviszonyok

	(μm)	Arány (d _{mol})
Átmérő d _{mol}	0.00037	1
Átlagos távolság	0.004	10
Szabad úthossz	0.066	180
100 nm-es aeroszol	0.1	270



Reynolds-szám

Viszkózus áramlás egy csőben vagy egy részecske körül lamináris vagy turbulens.

Az áramlás tulajdonságait az ún. Reynolds-számmal (Re) írjuk le, ami megadja a gyorsító erő arányát a sűrűlő erőhöz képest.

Turbulens áramlásban a gyorsító erő (F_i), lamináris áramlásban a viszkózus erő (F_v) dominál.

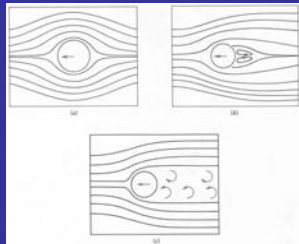
F_i és F_v becslése olyan áramló térfogatra, amelynek karakterisztikus dimenziója L:

$$\frac{dU}{dt} = \frac{\partial U}{\partial t} + U \frac{dU}{dx} ; \frac{\partial U}{\partial t} = 0$$

$$F_i = ma = \rho L^3 U \frac{dU}{dx}$$

$$F_v = \eta L^2 \frac{dU}{dx}$$

$$\text{Re} = \frac{F_i}{F_v} = \frac{\rho V L}{\eta}$$



Reynolds-szám

Aeroszolokra vonatkozó Reynolds szám:

Jellemző méret d = aeroszol átmérő, V = relatív sebesség

$$\text{Re} = \frac{\rho V d}{\eta}$$

Levegőben, 20 °C hőmérsékleten ($\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$, $\eta = 1.81 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$)

$$\text{Re} = 6.6 V d ; [V] = \text{cm/s}, [d] = \text{cm}$$

Lamináris áramlás feltétele: $\text{Re} < 1$.

Reynolds szám csővezetékben áramló gázokra:

Aeroszol átmérő helyére a cső átmérőjét kell behelyettesíteni.

Megjegyzés: Lamináris áramlás: $\text{Re} < 2000$; turbulens áramlás: $\text{Re} > 4000$

Indok: Gyorsító erő szerepe lecsökken az egyenes áramvonalak miatt. Áramlási instabilitások dimenziója sokkal kisebb, mint a cső átmérője.

Aeroszol részecskék dinamikus tulajdonságai

Stokes-törvény és a közegellenállási együttható

A felületen történő megcsúszás hatása

Egyenletes aeroszol mozgás: ülepedési sebesség, mozgékonyaság

Nem gömb-alakú aeroszolok

Aerodinamikai átmérő

Görbült áramvonalak: megállási távolság, tehetetlenségi impaktor

Termikus erők

Koaguláció

Stokes-törvény és a közegellenállási együttható

Stokes-törvény ($Re \ll 1$) az alábbi egyszerűsítések mellett érvényes:

1. Gyorsító erő elhanyagolható: $Re \ll 1$
2. Összenyomhatatlan folyadék
3. Egyetlen részecske, egyenletes mozgás
4. Merev gömb
5. Nulla áramlási sebesség a felületen

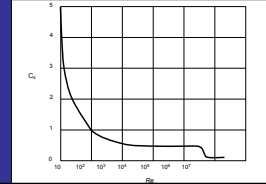
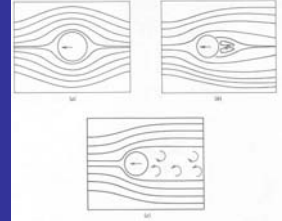
$$F_D = 3\pi\eta Vd$$

Newton törvény ($Re > 1000$):

$$F_D = C_D \frac{\pi}{8} \rho_g d^2 V^2$$

Közegellenállási együttható:

$$C_D = \frac{24\eta}{\rho_g V d} = \frac{24}{Re}$$



A felületen történő megcsúszás hatása

Stokes-törvény feltételezi, hogy:

1. Folytonos közeg áramlik a részecske körül.
2. A közeg relatív sebessége nulla a felületen.

Ezek a feltételezések érvényüket veszítik, ha a részecske átmérő összemérhetővé válik a szabad úthosszal. Stokes ellenállási erő lecsökken, mivel az impulzusátadás lecsökken (a közeg megcsúszik).

Cunningham (1910) meghatározott egy korrekciós faktort, ami egyénnél nagyobb:

$$F_D = \frac{3\pi\eta Vd}{C_c} ; C_c = 1 + \frac{2.52\lambda}{d}$$

Jó egyezés olyan részecskékre, amelyeknek az átmérője nem kisebb, mint 0.1 μm . Még kisebb részecskékre:

$$C_c = 1 + \frac{\lambda}{d} \left[2.514 + 0.8 \exp\left(-0.55 \frac{d}{\lambda}\right) \right]$$

$$C_c = 1 + \frac{1}{Pd} [168.48 + 53.58 \exp(-0.008215 Pd)] ; P \text{ in hPa, } d \text{ in } \mu\text{m}$$

Részecske ülepedési-sebessége

Egy gömb alakú részecske, amelynek az átmérője d , tömege m_p és a sűrűsége ρ_p a ρ_g sűrűségű levegőben gyorsan eléri a végső ülepedési sebességet: V_{TS} . V_{TS} értékét az az állandósult állapot határozza meg, amikor a közegellenállási erő F_D és a gravitációs erő $F_g = m_p g$ (mínusz a felhajtó erő) egyenlő nagyságú és ellentétes irányú:

$$\frac{3\pi\eta V_{TS} d}{C_c} = \frac{(\rho_p - \rho_g)\pi d^3 g}{6}$$

Ha a felhajtó erő elhanyagolható ($\rho_g \ll \rho_p$):

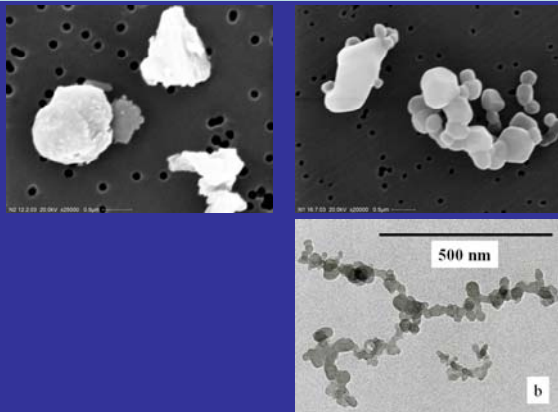
$$V_{TS} = \frac{\rho_p d^2 g C_c}{18\eta} = \frac{mg C_c}{3\pi\eta d}$$

A Stokes tartományban ($Re < 1$), egységnyi sűrűségű gömbökre:

$$V_{TS} \cong 0.03d^2$$

Ahol V_{TS} mm/s és d μm .

A szabálytalan részecskealak hatása



A szabálytalan részecskealak hatása

Az eddigi egyenletek és az ülepedési sebesség számolása során gömb alakú részecskéket feltételeztünk.

Általában teljesen szabálytalan részecskealak.

Dinamikus alakfaktor. A valódi közegellenállási erő és egy ugyanolyan sebességű és térfogatú gömb esetén fellépő közegellenállási erő aránya:

$$\chi = \frac{F_D}{3\pi\eta V d_e}$$

Ahol d_e az ekvivalens térfogat átmérője.

A Stokes-törvényre és az ülepedési-sebességre:

$$F_D = 3\pi\eta V d_e \chi$$

$$V_{TS} = \frac{\rho_p d_e^2 g C_c}{18\eta \chi}$$

Példák a dinamikus alakfaktorra (χ):

Gömb	1.0
Gömbök:	
2 lánc	1.12
3 kompakt	1.15
4 lánc	1.27
Kocka	1.08
Henger (L/D=4)	
horizontális tengely	1.32
Vertikális tengely	1.07
Kvarc	1.36

Aerodinamikai átmérő

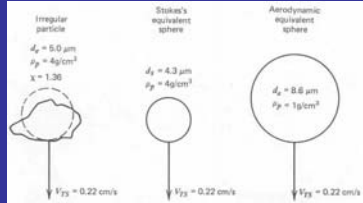
A részecske alakjának és sűrűségének figyelembevétele ekvivalens átmérők alkalmazásával:

1. Stokes átmérő d_s : Átmérője egy olyan gömbnek, aminek ugyanaz a sűrűsége és az ülepedési sebessége.
2. Aerodinamikai átmérő d_a : Átmérője egy egységnyi sűrűségű gömbnek ($\rho_p = \rho_0 = 1 \text{ g/cm}^3$) amelyeknek ugyanaz az ülepedési sebessége.

$$V_{TS} = \frac{\rho_p d_s^2 g C_c}{18 \eta \chi} = \frac{\rho_p d_a^2 g C_c}{18 \eta} = \frac{\rho_0 d_{ae}^2 g C_c}{18 \eta}$$

Különböző műszerekkel különböző ekvivalens átmérőket lehet meghatározni.

$$d_a = d_s \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_0 \chi}} = d_s \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_0}}$$



Relaxációs idő

A relaxációs idő az az idő ami alatt egy részecske sebessége felveszi egy megváltozott külső erőnek megfelelő sebességet. Külső erő: pl. gravitáció, elektromos erő, termikus erő stb.

A Stokes tartományban a V termikus sebesség egyenesen a közegellenállási erővel egyensúlyba hozott teljes külső erővel:

$$V = BF \quad ; \quad B = \frac{V}{F} = \frac{C_c}{3\pi\eta d}$$

A relaxációs idő:

$$\tau = mB = \rho_p \frac{\pi}{6} d^3 \frac{C_c}{3\pi\eta d} = \frac{\rho_p d^2 C_c}{18\eta}$$

Bármilyen külső erő esetén a végső sebesség:

$$V_{IV} = \tau \frac{F}{m}$$

Megállási távolság

Egy kezdetben V_0 sebességű részecske külső erő hiányában ekkora utat tesz meg:

$$S = V_0 \tau = B m V_0$$

Ha a Reynolds-szám 1 és 400 közé esik, a következő empirikus formula érvényes:

$$S = \frac{\rho_p d}{\rho_g} \left[\text{Re}_0^{1/3} - \sqrt{6} \arctan(\text{Re}_0^{1/3} / \sqrt{6}) \right]$$

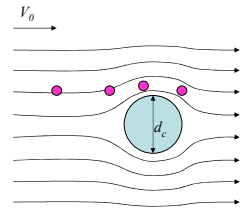
Részecske átmérő (μm)	Re ₀	S ha V ₀ =1000 cm/s (cm)	Idő 90% S (s)
0.01	0.0066	6.8 × 10 ⁻⁶	2.0 × 10 ⁻⁸
0.1	0.066	8.8 × 10 ⁻⁵	2.6 × 10 ⁻⁷
1.0	0.66	3.6 × 10 ⁻³	1.1 × 10 ⁻⁵
10	6.6	2.3 × 10 ⁻¹	8.5 × 10 ⁻⁴
100	66	1.3 × 10 ¹	6.5 × 10 ⁻²

A Stokes-szám

A megállási távolság részecske azon kitarását jellemzi, hogy mennyire tudja követni az áramlási tér áramvonalait, pl. könyökső vagy belső impaktor.

A görbe vonalú mozgást a dimenzió nélküli Stokes-számmal jellemezzük, ami a megállási távolság és az áramlási minta vagy akadály karakterisztikus mértéke.

$$Stk = \frac{S}{d_c} = \frac{\tau V_0}{d_c}$$

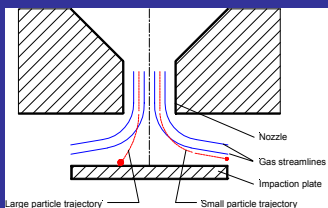


A tehetetlenségi impaktor

A tehetetlenségi impaktor elve széles körben alkalmazott aeroszol részecskék összegyűjtésében és mérésében.

Az általában használt fúvóka impaktor Stokes száma, ha a fúvóka átmérője D_j és a fúvóka kilépő sebessége V :

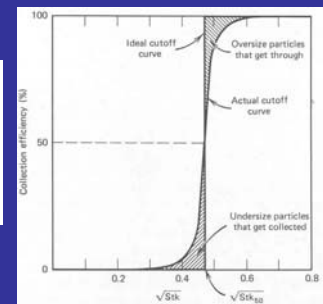
$$Stk = \frac{\tau V}{D_j / 2} = \frac{\rho_p d_p^2 V C_c}{9 \eta D_j}$$



Impaktor becsapódási határméret

Egy megfelelő szerkezetű fúvóka impaktora elvileg tipikusan éles határfüggvénnyel rendelkezik (ábra).

Valójában rendelkezik egy statisztikus hibával – nem tökéletes a működése.



Koaguláció

Részecskék összeülnek az eltérő sebességeik miatt és összeragadnak nagyobb részecskét alkotnak.

A legegyszerűbb eset a monodiszperz részecskék termális koagulációja, amikor is minden ütközésnél összeragadnak (Smoluchowski koaguláció). Megmutatható, hogy az aeroszol részecskesűrűségének (N) változása a következő:

$$\frac{dN}{dt} = -4\pi d_p D N^2$$

ahol D a diffúziós együttható és d_p a részecske átmérője, valamint

$$K = 4\pi d_p D = \frac{4kTC_c}{3\eta}$$

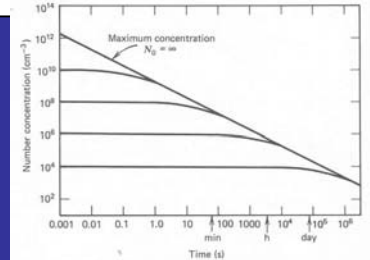
a koagulációs együttható, ami nagyobb méretű részecskék esetében független a részecske méretétől, de kisebb méretű részecskék esetében értéke növekszik a csúszási korrekció miatt.

Konstans K tényezőt feltételezve a kezdeti N_0 aeroszol részecskékonzentráció időfüggése:

$$N(t) = \frac{N_0}{1 + N_0 K t}$$

Koaguláció azonos méretű részecskék között

Átmérő (μm)	K (cm ³ /s)
0.01	67×10^{-10}
0.1	8.6×10^{-10}
1.0	3.5×10^{-10}
10	3.0×10^{-10}



Koaguláció különböző méretű részecskék között

Különböző méretű (d_1 and d_2 átmérőjű) részecskék közötti koagulációs együttható a következő egyenlettel karakterizálható:

$$K_{1,2} = \pi(d_1 + d_2)(D_1 + D_2)$$

A koagulációs együtthatója különböző méretű részecskék esetében nagyobb, mint azonos méretűekre, azaz a nagyobb méretű részecske „súlyesztőként” működik a kisebbekre nézve.

d_1 (μm)	Coagulation coefficient $K_{1,2}$ (10^{-10} cm ³ /s)			
	$d_2=0.01$ μm	$d_2=0.1$ μm	$d_2=1.0$ μm	$d_2=10$ μm
0.01	67			
0.1	180	8.6		
1.0	1700	24	3.5	
10	16000	220	10.3	3.0

Részecske méreteloszlása I.

Aeroszol rendszerek rendszerint különböző méretű részecskékből állnak.

A teljes aeroszol rendszer jellemzésére a ΔD_p méreteloszlást és az N_i részecskesűrűséget:

$$N_i = n_i \Delta D_p$$

Nagy számú aeroszol részecske esetében a méreteloszlási függvény folyamatos és a következő képen van meghatározva:

$$n_N(D_p)dD_p = \text{a részecskék száma } 1 \text{ cm}^3 \text{ térfogatban, amelyek mérete a } D_p \text{ és } D_p+dD_p \text{ tartományban van.}$$

A teljes részecskékonzentráció a következő integrállal adható meg:

$$N = \int_0^{\infty} n_N(D_p)dD_p$$

Az aeroszolok méreteloszlását gyakran a következő formában adják meg

$$n_N(D_p) = \frac{dN}{dD_p}$$

Részecske méreteloszlása II.

Mivel a részecskék mérete akár több nagyságrenddel is eltérhet, sokkal praktikusabb a részecskeloszlást $\ln D_p$ vagy $\log D_p$ függvényeként kifejezni:

$$dN = n_N(D_p)dD_p = n_N^c(\ln D_p)d \ln D_p = n_N^0(\log D_p)d \log D_p$$

Mivel

$$d \log D_p = \frac{d \ln D_p}{2.303} = \frac{dD_p}{2.303 D_p}$$

$$n_N^0(\log D_p) = 2.303 D_p n_N(D_p)$$

$$n_N^c(\ln D_p) = D_p n_N(D_p)$$

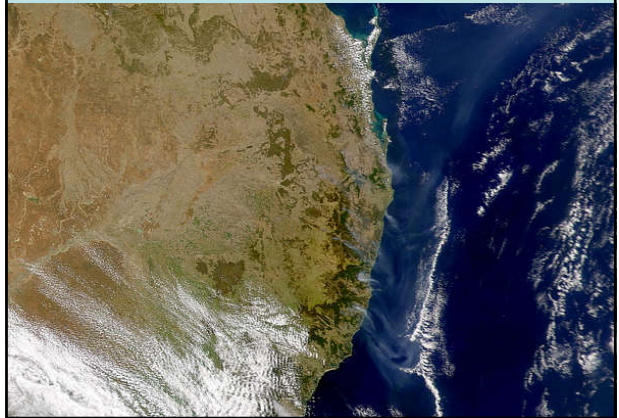
Szaharai homok (<http://visibleearth.nasa.gov/>)



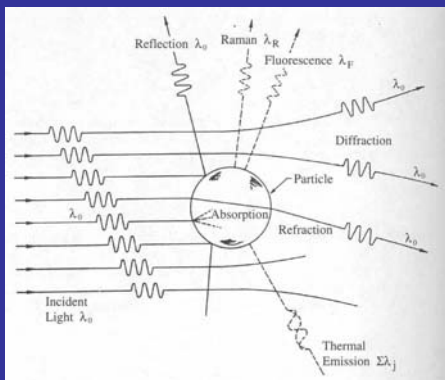
Felhőképződés a szakarai homokból



Füst aeroszol Ausztrália felett



Fény - aeroszol kölcsönhatás



Sugárzásos effektusok: alap összefüggések

Egy részecske által elnyelt vagy szórt teljes intenzitása arányos a beeső fény intenzitásával (W/m^2):

$$\tilde{I}_{scat} = C_{scat} I_0 ; \tilde{I}_{abs} = C_{abs} I_0$$

Ahol C_{scat} and C_{abs} (cm^2 egységekben) az egy részecske szórási és elnyelési hatáskeresztmetszet.

Extinkció az elnyelés és a szórás kombinált effektusa:

$$C_{ext} = C_{scat} + C_{abs}$$

Az extinkciót, a szórást és az elnyelést általában a részecske keresztmetszetével normálják abból a célból, hogy egy a dimenziómentes hatékonysági faktort határozzanak meg:

$$Q_{ext} = \frac{C_{ext}}{A} ; Q_{scat} = \frac{C_{scat}}{A} ; Q_{abs} = \frac{C_{abs}}{A}$$

Q_{scat} és Q_{ext} aránya a szórási albedo:

$$\omega = \frac{Q_{scat}}{Q_{ext}} = \frac{C_{scat}}{C_{ext}}$$

Rayleigh-szórás

A fényszórást az ún. Mie-paraméterrel

$$\alpha = \frac{\pi d}{\lambda}$$

és a törésmutató valós (m) részével.

Fényszórás: valamely közegtől eltérő törésmutatójú, gyengén elnyelő részecskén következik be akkor, amikor a részecske a beeső fény hatására maga is fényforrássá válik, és így fényt sugároz a beeső fénytől eltérő irányokba is.

A hullámhossznál jóval kisebb méretű részecskéken (molekulákon) történő szórást ($\alpha \ll 1$) **Rayleigh-szórásnak** nevezzük.

Ha a molekula mérete és a fény hullámhossza összemérhető nagyságúak, vagy a szóró molekula nagyobb, **Mie-szórásról** beszélünk.

Pl. Az ég színe verőfényes nappal kék, esős időben szürke.

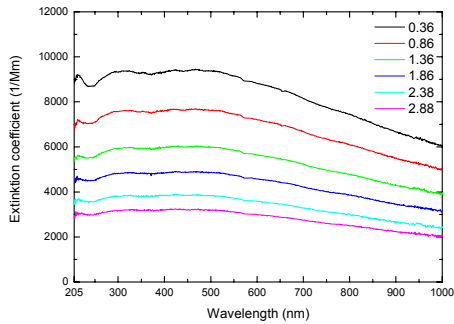
Q_{ext} , Q_{scat} és Q_{abs} A Rayleigh tartományban

Megmutatható:

$$Q_{scat} \propto \frac{1}{\lambda^4} ; Q_{abs} \propto \frac{1}{\lambda}$$

$$C_{scat} \propto d^6 \propto V^2 ; C_{abs} \propto d^3 \propto V$$

Homok aeroszolok mért extinció spektruma



Aeroszol mérési módszerek

Módszerek áttekintése

Kondenzációs részecskeszámoló (CPC)

Differenciális mobilitás vizsgáló (DMA, DMPS, SMPS)

Aerodynamic particle sizer (APS)

Impactors (cascade, ELPI, cyclone, CVI)

Optical particle counters

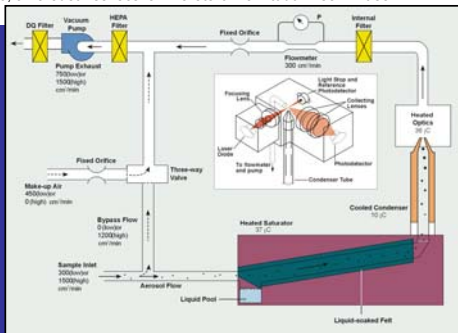
Filter sampling techniques

Mass spectrometric techniques

Sampling artefacts (isokinetic sampling, sampling losses)

Kondenzációs részecskeszámoló (CPC)

A CPC megadja a néhány nm kb. 1 mikron átmérőjű aeroszolok számát fényszórás mérése alapján. A detektálás előtt az aeroszolok méretét meg kell növelni. Ezt túltelített alkoholgőzben való átáramoltatással valósítják meg. Mivel ez a méretnövekedés nem kontrollálható, az eredeti részecskék méretéről nem tudunk semmit sem mondani.



Elektromos mozgékony vizsgáló

E erősségű elektromos térben az n töltésű részecskére ható $F = neE$ gyorsító erőt a közegellenállás egyenlíti ki:

$$neE = 3\pi\eta Vd / C_c$$

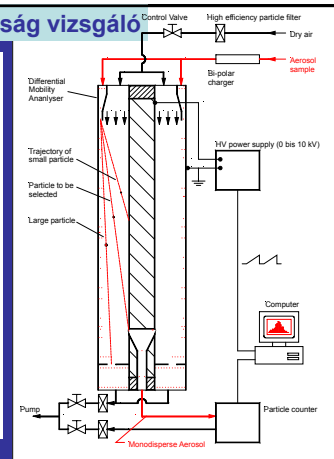
A hőmérsékleti elektrosztatikus sebesség:

$$V_{TE} = \frac{neEC_c}{3\pi\eta d}$$

A DMA rendszer által kiválogatott részecskék elektromos mobilitása:

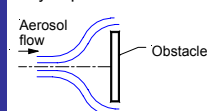
$$B_E = \frac{V_{TE}}{neE} = \frac{(F_1 - F_{se}) \ln(r_2/r_1)}{2\pi U l}$$

ahol F_1 és F_{se} a teljes és aeroszol áramlási sebesség, r_1 és r_2 a belső és külső elektródok sugara, l a DMA hossza és U a két elektróda közötti feszültség.

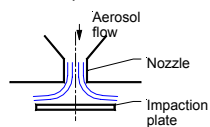


Belső lerakódású készülékek

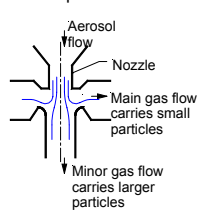
Body impactor



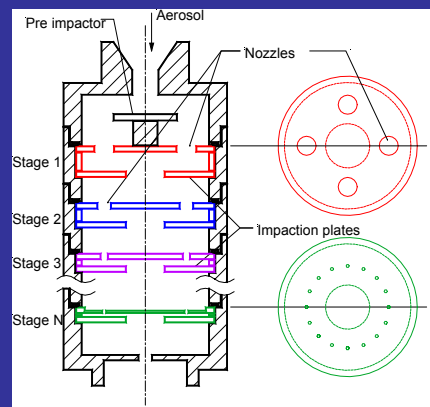
Nozzle impactor



Virtual Impactor

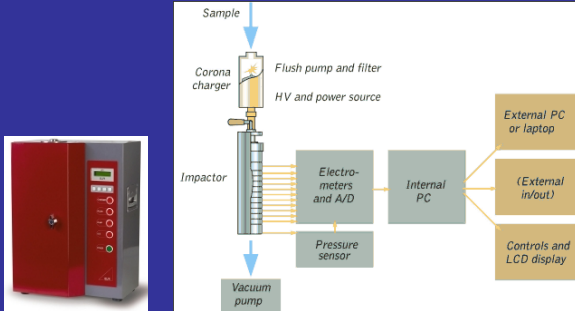


Kaszád impaktor (többlépcsés méreteloszlás)

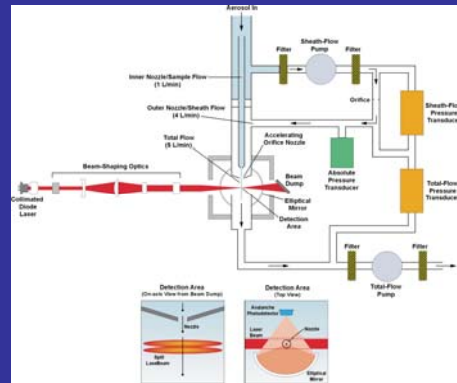


Elektromos alacsony nyomású impaktor (ELPI)

Tömegkoncentráció meghatározására alkalmas készülék, ugyanis az egyes impaktorok részecske gyűjtése a részecskék aerodinamikai méretétől függ. A mért áramértékeket (aerodinamikai) méreteloszlássá alakítják át.

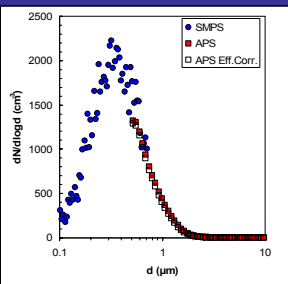


Aerodinamikus részecske osztályozó (APS – aerodynamic particle sizer)

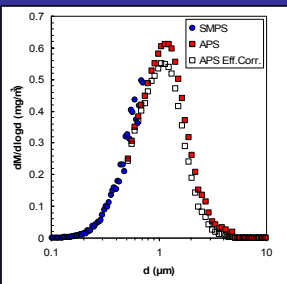


Aerodinamikus részecske osztályozó (APS)

Számkoncentráció eloszlás



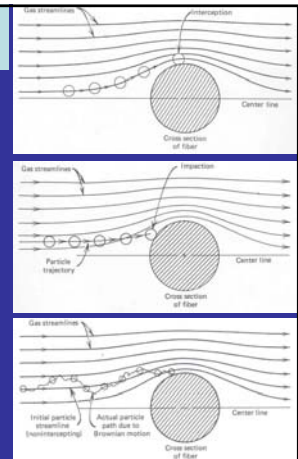
Tömegkoncentráció eloszlás (ρ = 2.6 g/cm³)



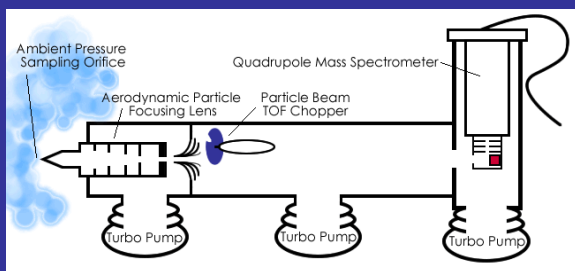
Szűrővel történő mintavételezési technikák

Szűrőn történő mintavételezés történhet:

- Befogással
- Ütközéssel
- Diffúzióval
- Égés
- TOC
- Elemi szén

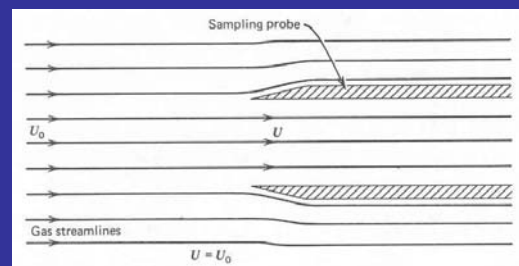


Aerodyne aeroszol tömeg spektrométer



Izokinetikus mintavételezés

Elkerülhetők a mintavételezés okozta hibák. A mintavető cső a gázáramlás irányába áll és nem jön létre sebességváltozás.



Hibás mintavételezés

