## Ozonvorming

Ozon is de belangrijkste oxidant in de troposfeer en wordt gevormd door de fotochemische reactie met NOx, VOC’s, methaan of koolstofmonoxide. Het is dus een secundaire polluent waarbij de voornaamste bronnen van de precursor moleculen van antropogene afkomst zijn (transport, verbrandingsprocessen in energieproductie en industrie, solventen,…) maar daar komen we later op terug.

Nu hoe wordt ozon nu eigenlijk gevormd? Wel dit kan verklaard worden aan de hand van de deze figuur en de bijhorende chemische reacties. In de stratosfeer wordt ozon gevormd door de reactie van zuurstofatomen met zuurstofgas (O + O2 + M 🡺 O3 + M + warmte), meestal is er nog een 3de molecule aanwezig (M = N2 of H2O) voor de afvoering van warmte gegenereerd door de exotherme reactie. Voor deze reactie moeten er dus voldoende zuurstofatomen aanwezig zijn en die worden gevormd door de reactie van zuurstofgas met UV-C fotonen afkomstig van de zon. In de troposfeer is er ook vorming van ozon, echter hier is de voornaamste bron van deze zuurstofatomen afkomstig van een andere reactie waarbij stikstofdioxide (NO2) wordt omgezet tot stikstofmonoxide (NO) en een zuurstofatoom (O). Nu voor deze laatste reactie is er energie nodig onder de vorm van licht. Uit onderzoek blijkt dat licht met een golflengte kleiner dan of gelijk aan 391nm voldoende energie bevat. Dit kan men eenvoudig berekenen aan de hand van volgende formules:

**E = h.ν = h.c/λ** (met ν.λ=c)

h= 6.626218 x 10-34 J.s ; c = 2.997925 x 108 m.s-1 🡺 E = 119.627 kJ.µm.mol-1/ λ   
(met 0.119627 = h.c. 6,022 x 1023)  
E = [kJ.mol-1] en λ = [µm]

Algemeen: ΔH°= Σ ΔHf° (producten) - Σ ΔHf° (reactanten)

Voor deze reactie is het product stikstofdioxide en zijn de reactanten stikstofmonoxide en een zuurstofatoom. Dit geeft volgende vergelijking:

**ΔH°= ΔHf° NO2 – (ΔHf° NO + ΔHf° O)**

= 33.2 kJ.mol-1 – 90.2 kJ.mol-1 – 249.2 kJ.mol-1

**= -306.2 kJ.mol-1**

E = 119.627/λ 🡺 λ = 119.627/E

= 119.627 kJ. µm.mol-1/306.2 kJ.mol-1

= 0.391 µm = **391 nm**

Licht met deze golflengte komt overeen met het UV-A gebied.

## Ozon afbraak

Nu naast de vorming is er uiteraard ook afbraak van ozon. Dit kan op twee manieren gebeuren. Een eerste manier is door de reactie met UV-B licht, waarbij ozon wordt opgesplitst in zuursstof gas en een zuurstof atoom (O3 🡺 O2 + O). Een tweede manier is door de reactie met stikstofmonoxide, waarbij stikstofmonoxide zal reageren met ozon en zo stikstofdioxide en zuurstofgas zal vormen (NO + O3 🡺 NO2 + O2). Dus zoals in deze grafiek te zien is, zal vroeg in de morgen de concentratie aan stikstofmonoxide stijgen door uitlaatgassen van verkeer en industrie (meer NO dan NO2 uitstoot) en is er beduidend minder ozon aanwezig. Echter wanneer de stikstofmonoxideconcentratie gereduceerd is tot stikstofdioxide, start de vorming van ozon. Dit proces begint dus vanaf laat in de voormiddag. Op de grafiek zien we eerst een stijging in NO, vervolgens neemt deze af en zien we een stijging in ozon en NO2.

Nu in de vroege ochtend zal het zonlicht ook zorgen voor de productie van hydroxyl radicalen door de reactie met salpeterigzuur (HNO2 🡺 OH° + NO°) dat nog overbleef van de vorige dag. Zoals reeds vermeld, komen door het ochtend verkeer stikstofmonoxide (NO) en reactieve koolwaterstoffen (KWS) vrij die aldehyden produceren. Deze aldehyden reageren vervolgens met de hydroxyl radicalen, wat op zijn beurt de concentratie aan vrije radicalen doet verhogen. Deze stijging in vrije radicalen in de voormiddag zorgt voor de oxidase van NO tot NO2. De fotolyse van NO2 zorgt dan voor de stijging in ozon zoals reeds vermeld. Naast ozon worden ook peroxyacetylnitraten (PAN) en waterstofperoxiden gevormd, voornamelijk in de namiddag als de concentratie aan vrije radicalen zeer hoog is en de concentratie aan NO laag is, anders zou het zich gedragen als een peroxyradicaal en NO oxideren tot NO2 (radicaal-radicaal reactie). Deze reacties nemen uiteindelijk af tegen de avond door een gebrek aan zonlicht. Enkel het salpeterigzuur zal stabiel blijven en zorgen voor de initiatie van de smog reacties voor de volgende ochtend.

## Smog

Uitendelijk is ozon een onderdeel van een bekender fenomeen, namelijk smog = smoke en fog. Wat dus neerkomt op een ozonlaag op de verkeerde plaats. Door de vorming van ozon in de troposfeer, zal dit reageren met andere componenten aanwezig in de lucht, zoals VOC’s. De belangrijkste reactanten zijn NO en onverbrande of gedeeltelijk geoxideerde koolwaterstoffen. De algemene reactie die men krijgt is de volgende: VOC’s + NO + O2 🡺 🡺 mengsel van ozon, HNO3, …

Smog vormt een groot probleem met betrekking op de menselijke gezondheid, maar hier komen we later op terug. Eerst volgt er wat meer over de bronnen van ozon.