

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

03060

UNIDAD ACADEMICA DE LOS CICLOS PROFESIONAL Y DE POSGRADO DEL COLEGIO DE CIENCIAS Y HUMANIDADES

POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA.

"VARIACIONES TEMPORALES DE LA DISTRIBUCION DE TAMAÑOS DE PARTICULAS DEL AEROSOL ATMOSFERICO Y LOS EFECTOS EN SUS CARACTERISTICAS OPTICAS"

TESISQUEPARAOBTENERELGRADODE:MAESTRAENCIENCIAS(FISICADELAATMOSFERA)PRESENTANTONIAMARIATERESADIAZMARTINEZ

MEXICO, D. F.



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

PAGINACION

DISCONTINUA.

AGRADECIMIENTOS

A CONACyT por el apoyo económico otorgado para la realización de este trabajo.

Al Dr. Agustín Muhlia, muy especialmente, por su valiosa asesoria y por la dirección de este trabajo.

Al M. en C. José Luis Bravo por su asesoria y apoyo.

Al Dr. Amando Leyva por sus valiosas enseñanzas, comentarios y sugerencias en la revisión de este trabajo.

A la Dra. Graciela Raga por sus comentarios, revisión y sugerencias.

Al Dr. Fernando García por su revisión y comentarios.

Al Dr. Juan R. Varela por su revisión y comentarios.

A la Dra. Telma Castro por el tiempo dedicado a a la revisión de este trabajo.

A la Dra. Elba Villanueva por su disposición y ayuda.

A los técnicos academicos Vidal Valderrama y Ernesto Jímenez de la Cuesta su estímulo y ayuda que siempre me han brindado. También mi agradecimiento para los señores Rogelio Montero y Luis Galindo. A mis padres: Eduardo D. y Julia M. A mis hermanos: Guadalupe y Francisco. A Francisco V. A mis sobrinos: Areli y Ricardo U especialmente a

Miguel y Joram

por su estímulo, apoyo y sacrificio, sin los cuales este trabajo no hubiéra sido posible. •

INDICE

RESUMEN

INTRODUCCION

- 1. ANTECEDENTES
- 2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA
- CAPITULO 1. AEROSOL ATMOSFERICO
- **1.1 GENERALIDADES**
- **1.2. PROCESOS DE FORMACIÓN**
- **1.3. CARACTERISTICAS OPTICAS**
- 1.4. AEROSOL Y CLIMA
- 1.5. DISTRIBUCION POR TAMAÑOS DE LAS PARTICULAS DEL AEROSOL ATMOSFERICO
 - 1.5.1. PROPIEDADES DE LA FUNCION DE DISTRIBUCION POR TAMAÑOS DE PARTICULAS
 - 1.5.2. ALGUNAS DISTRIBUCIONES APLICADAS A TAMAÑOS DE PARTICULAS DEL AEROSOL ATMOSFERICO

CAPITULO 2. METODO DE ANALISIS

- 2.1. SITIO DE MUESTREO
- 2.2. BASE DE DATOS
- 2 3. INSTRUMENTO
- 2.4. METODO TEORICO
- 2.5 REDUCCION DE DATOS Y CALCULO DE PARAMETROS OPTICOS

CAPITULO 3. ANALISIS Y DISCUSION DE RESULTADOS

CONCLUSIONES

REFERENCIAS

APENDICE

APENDICE A

APENDICE B

INDICE

RESUMEN

INTRODUCCION

- **1. ANTECEDENTES**
- 2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA
- **CAPITULO 1. AEROSOL ATMOSFERICO**
- 1.1 GENERALIDADES
- **1.2. PROCESOS DE FORMACION**
- **1.3. CARACTERISTICAS OPTICAS**
- 1.4. AEROSOL Y CLIMA
- 1.5. DISTRIBUCION POR TAMAÑOS DE LAS PARTICULAS DEL AEROSOL ATMOSFERICO
 - 1.5.1. PROPIEDADES DE LA FUNCION DE DISTRIBUCION POR TAMAÑOS DE PARTICULAS
 - 1.5.2. ALGUNAS DISTRIBUCIONES APLICADAS A TAMAÑOS DE PARTICULAS DEL AEROSOL ATMOSFERICO

CAPITULO 2. METODO DE ANALISIS

- 2.1. SITIO DE MUESTREO
- 2.2. BASE DE DATOS
- 2.3. INSTRUMENTO
- 2.4. METODO TEORICO
- 2.5. REDUCCION DE DATOS Y CALCULO DE PARAMETROS OPTICOS

CAPITULO 3. ANALISIS Y DISCUSION DE RESULTADOS

CONCLUSIONES

REFERENCIAS

APENDICE

APENDICE A

APENDICE B

۰.

RELACION DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1.1	Gráfica típica para la distribución númerica de tamaños para el aerosol urbano
Figura 1.2	Coagulación simple monodispersa19
Figura 1.3	Efectos de la coagulación sobre la distribución de tamaños20
Figura 1.4	Diagrama mostrando el plano y el ángulo de esparcimiento24
Figura 1.5	Diagrama polar del esparcimiento de la luz25
Figura 1.6	Interacción entre el aerosol y la radiación solar35
Figura 1.7	Curva de distribución de frecuencias 42
Figura 1.8	Función de distribución acumulativa43
Figura 1.9	Distribución numérica promedio del aerosol urbano52
Figura 2.1	Localización del sitio de observación
Figura 2.2	Diagrama esquemático del sistema del Analizador Eléctrico de Aerosoles
Figura 3.1	Distribución de tamaños típica
Figura 3.2	Algunas distribuciones de tamaños para aerosol urbano74
Figura 3.3	Distribución de tamaños, para el día 28 de sep. de 1992 a las 11:05 hrs
Figura 3.4	Concentración numérica total de partículas
Figura 3.5	Distribución numérica, de superficie y volumen
Figura 3.6	Coeficientes de extinción, dispersión y absorción en función de la longitud de onda
Figura 3.7	Coeficiente de extinción para el mes de febrero de los años 85, 90 y 95

. , , ,

RESUMEN

Se hace un análisis de distribuciones por tamaños de partículas del aerosol atmosférico en el rango de 0.003 a 1.0 µm. La base de datos la conforman mediciones que se realizaron, en superficie, con un analizador eléctrico de partículas, durante el período de 1985 a 1995 en el Observatorio de Radiación Solar del Instituto de Geofísica de la UNAM, en la zona suroeste de la Cd. de México. Esta base de datos, única en la zona, permite el estudio de la influencia del aerosol atmosférico en algunos parámetros ópticos de la atmósfera.

Se estudiaron las distribuciones por tamaños de las medias mensuales de la concentración numérica de partículas, las cuales resultaron ser trimodales. La ubicación de los radios medios, correspondientes a estas modas, fue la misma para las 113 distribuciones analizadas. Dichas distribuciones presentan un comportamiento típico para un aerosol urbano influenciado por emisiones vehiculares. La abundancia total de partículas observadas se encuentra, aproximadamente, entre 6X10³ y 3X10⁵ partículas por centímetro cúbico. En los últimos años las variaciones en la concentración numérica del aerosol atmosférico se han estabilizado debido, probablemente, al crecimiento de los árboles aledaños a la zona de muestreo. La dependencia de las distribuciones de partículas de parámetros meteorológicos como la intensidad de la radiación solar, humedad relativa o dirección del viento no se discuten aquí.

Siguiendo la metodología del esparcimiento (scattering) de Mie se calculó el efecto que la variación en la distribución númerica por tamaños tiene sobrellas propiedades ópticas del aerosol atmosférico, particularmente en: los coeficientes de extinción, esparcimiento y absorción, así como en el albedo de esparcimiento simple y en la visibilidad. Los resultados muestran que dicha variación en la distribución númerica afecta de manera notable las características ópticas del aerosol de la zona.

INTRODUCCION

1. ANTECEDENTES

Las partículas que flotan en el aire varían en su capacidad para afectar no sólo la visibilidad y el clima sino también la salud y calidad de vida de las personas. Éstas partículas son de muchas clases: de aceite, de humo, de sal y las formadas fotoquímicamente. Estas partículas aéreas son todas ejemplos de aerosoles.

El estudio del aerosol atmosférico tiene como objetivos el conocimiento de sus propiedades, comportamiento y principios físicos. En los tiempos actuales, las investigaciones sobre el aerosol han cobrado importancia por el incremento en el deterioro ambiental y por la preocupación de los efectos que causa en la salud de las personas.

El conocimiento de las propiedades del aerosol es de gran importancia práctica, ya que ayuda a entender, entre otros, los procesos de formación de nubes en la atmósfera y es una clave en el proceso del ciclo hidrológico en la Tierra. Las propiedades del aerosol influencian la producción, transporte y destino final de las partículas atmosféricas contaminantes. La medida y el control de estas propiedades en un medio ambiente requiere de la aplicación de estos conocimientos (Cooper y Grant, 1995) ya que se utilizan en el campo de la higiene y seguridad industrial (Lioy et al., 1990). La toxicidad de las partículas inhaladas depende de sus propiedades físicas y químicas; la comprensión de estas propiedades es útil en la administración de aerosoles terapéuticamente, y en el tratamiento de males respiratorios (Pope et al., 1995), toxicología de la inhalación (Oberdöster et al., 1995) y salud radiológica (Hopke et al., 1990). Igualmente, tal comprensión es necesaria para evaluar riesgos ambientales, en el control del aire contaminado y en la física y química atmosféricas. Desde hace tiempo se realizan trabajos encaminados a estudiar la distribución de tamaños de las partículas del aerosol atmosférico a fin de obtener información acerca de su composición, influencia en el clima y en las condiciones ópticas y atmosféricas, así como sobre cuestiones de contaminación.

Entre estos trabajos se encuentran los desarrollados por Junge (1963), Willeke y Whitby (1975), Whitby et al. (1972) y Whitby (1978), siendo éste último uno de los primeros en caracterizar las distribuciones de tamaños del aerosol atmosférico, así como estimar sus componentes principales. Estos estudios están enfocados, principalmente, al aerosol urbano. En sus trabajos, Whitby y sus colegas establecieron la naturaleza multimodal de la distribución de tamaños del aerosol atmosférico, y la caracterizaron como constituida por tres modas las cuales llamaron: moda de nucleación, moda de acumulación y moda de partículas gruesas. Así, el origen y los cambios físicos del aerosol atmósferico son examinados a través del estudio de estas modas. Con estos trabajos se estableció, también, que la distribución de tamaños puede ajustarse a un modelo que consiste de tres distribuciones lognormales aditivas.

Otros estudios (John et al., 1990), junto con los de Whitby, reportan a los sulfatos y nitratos como constituyentes principales del aerosol atmosférico urbano, principalmente en el rango submicrónico.

Simultáneamente, se han desarrollado trabajos para estimar las propiedades ópticas del aerosol como una manera de evaluar los cambios climáticos (Vasilyev e Ivlev, 1992); estudiar variaciones en el balance radiativo a través de estimar la extinción y la absorción de las partículas del aerosol (Vasilyev et al., 1993; Leyva y Vasilyev, 1996) y también la variabilidad de la visibilidad (Tsay et al., 1991).

Así mismo, se han desarrollado trabajos para caracterizar las partículas de aerosol atmosférico generadas por tormentas de arena, como las del desierto del Sahara (Fouquart et al., 1987), las cuales se transportan a grandes distancias de la fuente, encontrándose trazas de éstas en America. Dichas partículas perturban de manera significativa el balance radiativo ya que su espesor óptico es mayor que uno.

La ciudad de México, como muchas otras grandes ciudades, está sujeta a una infusión de gases y partículas contaminantes por una gran variedad de fuentes.

En el Valle de México el efecto de las partículas suspendidas se manifiesta, principalmente por la reducción en la visibilidad (Muhlia, 1994; Jáuregui, 1983) y en el incremento de las enfermedades respiratorias (INEGI, 1996).

Las concentraciones de partículas suspendidas totales rebasan la norma correspondiente (275 μ g/m³ en 24 hrs) en aproximadamente el 90 % de los días del año en la parte noreste del valle de México. Es decir que los niveles más altos se registran en la zona norte, que es el sitio donde se focalizan la mayoría de las industrias y el ex lago de Texcoco.

En la Ciudad de México las fuentes principales de partículas suspendidas provienen de procesos de combustión, de algunos procesos industriales como la producción de cemento, de la formación fotoquímica de aerosoles, favorecida por la altitud de la Ciudad de México (2200msnm) y de procesos mecánicos de erosión.

2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

De acuerdo a lo anterior, el estudio de las propiedades ópticas y microfisicas del aerosol atmosférico es fundamental para evaluar el impacto de éste en el balance de radiación, contaminación ambiental, salud, etc.

En México hay pocos trabajos encaminados a hacer esta evaluación, ya que la mayoría de los estudios que se han realizado han tenido como objetivo estimar la composición y concentración elemental de varios componentes de la atmósfera de la zona, algunos de ellos identificados como aerosoles (Báez y Belmont, 1996; Barfoot et al., 1984; Miranda et. al., 1992; Salazar y Bravo 1983, 1986 y Salazar et al., 1989), pero dichos estudios no cubren el intervalo completo de tamaños del aerosol atmosférico (0.003 - 100µm), el tiempo de muestreo ha sido irregular, cubriendo sólo períodos pequeños, y los sitios de estudio han sido pocos.

Aunque la Red Automática de Monitoreo Ambiental de la Cd. de México (RAMA) monitorea la abundancia de partículas suspendidas totales PST y la abundancia de partículas de diámetro menor a 10 μ m (PM10), además de otros componentes de la atmósfera, no se cuenta hasta la fecha con un estudio completo sobre el comportamiento de todos estos componentes.

Igualmente hay pocos trabajos que hagan un análisis de la distribución por tamaños del aerosol atmosferico para caracterizar el comportamiento del aerosol o para evaluar, a través de ésta, sus propiedades ópticas

Desde hace 20 años el Instituto de Geofísica, a través del Observatorio de Radiación Solar, ha venido realizando estudios tendientes a caracterizar las propiedades ópticas y microfísicas del aerosol atmosférico (Leyva et al., 1983; Muhlia, 1984; Muhlia et al., 1988; Vasilyev et al., 1994; etc). Para ello se han muestreado las distribuciones por tamaños de las partículas del aerosol atmosférico desde el año de 1979, pero hasta la fecha no se cuenta con un trabajo que caracterice el comportamiento de dichas distribuciones, ni se ha evaluado cómo la variación de estas distribuciones afecta las propiedades ópticas del aerosol de la zona.

Los objetivos del presente trabajo son:

1. Describir y analizar las variaciones de las distribuciones por tamaños de las partículas del aerosol atmosférico en el rango de 0.0003 a 1.0 μ m, a partir de mediciones realizadas con un analizador eléctrico de partículas en el Obsevatorio de Radiación Solar del Instituto de Geofísica, en Ciudad Universitaria, durante el período de 1985 a 1995.

2. Calcular, a partir de las distribuciones anteriores y haciendo uso de la teoría de Mie, los coeficientes de esparcimiento, absorción y extinción, el albedo de esparcimiento simple y la visibilidad, que son los parámetros ópticos elegidos para este estudio.

3. A partir de estos cálculos, analizar la influencia de dichas distribuciones sobre las distintas características ópticas.

En el capítulo 1 se da una descripción de los principios básicos relacionados al aerosol atmosférico, sus fuentes, procesos de producción, etc., se mencionan sus propiedades ópticas, así como su influencia en el clima. Además, se describen las propiedades de una función de distribución, señalando la importancia de la distribución por tamaños de las partículas del aerosol atmosférico para estimar sus propiedades físicas y ópticas, se mencionan algunas distribuciones usadas comúnmente para describir la distribución por tamaños del aerosol atmosférico. En el capítulo 2 se describe la metodología usada. En el capítulo 3 se analizan y discuten los resultados. Finalmente se dan las conclusiones sobre este trabajo.

CAPITULO 1

AEROSOL ATMOSFERICO.

1.1 GENERALIDADES

La atmósfera de la Tierra es rica en partículas. Las primeras de éstas, reconocidas como tales, estaban relacionadas a la brisa marina y a eventos asociados con erupciones volcánicas e incendios forestales. Además, el polvo resultante de tormentas de arena y el hollín también contribuyer? en grandes cantidades, al material de partículas en la atmósfera.

Un aerosol se define como las partículas sólidas o líquidas suspendidas en un fluido. El aerosol es un sistema de dos fases: las partículas y el fluido en el que están suspendidas. Para el caso del aerosol atmosférico este fluido es el aire.

Los aerosoles tienen propiedades especiales que dependen del tamaño de las partículas y de su concentración en el medio.

Los siguientes términos indican la apariencia o fuente de las partículas.

Polvo.- Partículas del aerosol, sólidas, formadas por desintegración mecánica de un material original.

Humo.- Aerosol resultante de una combustión incompleta, estas partículas pueden ser sólidas o líquidas.

Esmog.- Partículas y gas, productos de reacciones fotoquímicas, generalmente combinadas con vapor de agua.

Otros conceptos relacionados con el aerosol son los siguientes:

Un aerosol primario es aquél cuyas partículas se introducen directamente en la atmósfera, mientras que un aerosol secundario contiene partículas que se forman por reacciones químicas de componentes gaseosos.

Un aerosol monodisperso es aquél en el que sus partículas son todas del mismo tamaño; éste es producido en el laboratorio para uso en pruebas del aerosol. El aerosol polidisperso contiene partículas con una distribución de tamaños en un rango muy amplio.

En el contexto planetario se consideran diferentes tipos de aerosol atmosférico.

Aerosol Continental.- Su componente principal es el polvo mineral, fuertemente alterado por emisiones antropogénicas. Incluye al aerosol urbano y al aerosol rural.

Aerosol Marino.- Su componente principal es la sal del mar, conteniendo también sulfatos y material orgánico.

Aerosol Estratosferico.- Sus principales fuentes son las erupciones volcánicas, sulfatos provenientes del SO₂ y tiene un tiempo de residencia de varios años.

Aerosol de Fondo.- Es el aerosol producido naturalmente, incluye al aerosol formado fotoquímicamente por la acción de la luz solar sobre emisiones de vapor o gases de la vegetación y al aerosol resultante de la erosión por vientos.

En términos generales podemos hablar de un aerosol producido naturalmente y de un aerosol producido antropogénicamente, el cual se debe a la actividad industrial y urbana del hombre. La tabla 1.1 presenta una compilación de investigaciones realizadas durante los años 80's (Jaenicke, 1988; Bach, 1984 y Monin, 1986), mostrando las contribuciones relativas de ambas fuentes al aerosol atmosférico.

El aerosol producido antropogénicamente es del orden del 15% del aerosol creado naturalmente, pero éste contiene una fracción mucho mayor de hollín, el cual es el responsable principal del incremento global de la bruma (Preining, 1989).

El tamaño de las partículas es el parámetro más importante para caracterizar el comportamiento de los aerosoles. El tamaño está dado por el radio de la partícula r_p o el diámetro de ésta d_{p.}

Todas las propiedades del aerosol dependen de este parámetro y la naturaleza de las leyes que gobiernan estas propiedades cambian en la medida que hay un cambio en el tamaño de la partícula.

	Jaenicke	Bach ²	Monin ³
NATURAL			
Directo			
Sal marina	0.2 - 2.0	0.5	1.0
Polvo mineral	0.1 - 1.8	0.1	0.2
Polvo volcánico	0.0 - 0.1	0.2	
Incendios forestales	0.0 - 0.2		
Subtotales	0.3 - 4.1	0.8	1.2
Conversiones			
Sulfatos	0.3 - 2.4	0.5	0.2
Nitratos	0.1 - 0.7	0.1	0.4
HC	0.1 - 1.1	0.1	0.2
Subtotal	0.5 - 4.2	0.7	0.8
Total natural	0.8 - 8.3	1.5	2.0
ANTROPOGÉNICO			
Directo	0.0 - 0.1	0.3	0.1
Conversiones	0.2 - 0.3	0.4	0.2
Subtotal	0.2 - 0.4	0.7	0.3
GRAN TOTAL	1.0 - 8.7	2.2	2.3

TABLA 1.1. Producción total de aerosol, según datos publicados después de 1986. Todos los datos estan en 10¹⁵ g año⁻¹ (redondeados).

(1) Jaenicke (1988) (2) Bach (1984) (3) Monin (1986)

La depositación debida a la humedad, la difusión, la inercia y los mecanismos electrostáticos dependen de la dimensión de la partícula; efectos tales como el esparcimiento de la luz y el impacto en la salud humana varían dependiendo del tamaño de la partícula.

Las partículas del aerosol se encuentran en el rango de 0.001 µm a 1000 µm, aproximadamente. En algunas aplicaciones se consideran partículas del aerosol con tamaños en un rango de 0.01 µm a 0.1 µm de diámetro o más pequeñas.

La tabla 1.2 muestra el rango de tamaños de las partículas para diferentes tipos de aerosol.

Las partículas del aerosol líquidas son casi siempre esféricas, pero las sólidas tienen formas muy complejas. En el desarrollo de la teoría de las propiedades del aerosol es práctico suponer que las partículas son esféricas. Para partículas no esféricas, se usan factores de corrección en la forma de un diámetro equivalente: un diámetro equivalente es el diámetro de una esfera que tendría un valor, de una propiedad física específica, igual al de la partícula de forma irregular. Por ejemplo: el diámetro equivalente aerodinámico es el diámetro de una esfera de densidad unitaria que tiene la misma velocidad terminal, que la partícula real.

Existen numerosas definiciones del tamaño y forma de una partícula que dependen de las técnicas de medición o del uso que se le quiera dar al parámetro requerido.

La densidad de la partícula es una propiedad física de gran interés; ésta se refiere a la masa por unidad de volumen de la partícula misma, no del aerosol.

La propiedad del aerosol más importante, desde el punto de vista de la salud y de los efectos ambientales, es la concentración de masa (la masa de las partículas en un volumen unitario del aerosol). La concentración de masa es equivalente a la densidad del aerosol.

Otra medida común de la concentración es el número de partículas por unidad de volumen del aerosol.

A continuación se mencionarán las fuentes principales del aerosol atmosférico,

D, μm						
0 01	0.1	1	10	100	1000	10000
<u> </u>	Humo		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	Polvo		
	Neblina				Spray	
		Arcilla	Sedimentos	Arena fina	Arena Gruesa	Grava
	Smog		Nubes	Niebla	llovizna	lluvia
				Fertilizantes	Piedra caliza	
	Humo de	gasolina		Cenizas		
	Humo de	Tabaco	Polvo de	Carbón		
Humo	У	polvo	metalúrgico			
			Cemento	Q		
		Solventes		Minerales		
	Óxido de Zinc		Insecticidas			
i			i	Polen		
				Esporas		
			Erosión	de suelos		
					Arena de	playa
i	Sal de mar	Daño al	pulmón		humedad	en nariz
virus			bacterias			

Tabla 1.2 Rango de tamaños para algunos tipos de aerosol. Modificada de Hinds (1982).

.

*

...

Las fuentes primarias del aerosol natural incluyen polvo interplanetario, partículas de sal marina, polvo de suelos, erupciones volcánicas e incendios forestales o de pastos.

En grandes regiones del mundo, las actividades domésticas e industriales del hombre contribuyen de manera importante a la carga de partículas troposféricas. El aerosol producido antropogénicamente proviene de una gran variedad de fuentes. Las más importantes incluyen combustión y evaporación de gasolinas y procesos industriales, y los principales productos resultantes de estos procesos son, entre otros: carbón, hidrocarburos, gas natural, acero, hierro, cementos, etc.

En el Valle de México las fuentes principales de contaminantes son las siguientes (Semarnap, 1996):

<u>Fuentes Móviles</u>.- Vehículos automotores de los cuales un 82% corresponde a autos particulares y un 18% a vehículos oficiales, transporte urbano y de carga.

<u>Fuentes filas</u>.-Se estima que existen 130 000 establecimientos industriales muchos de los cuales se ubican en el norte y noroeste del valle de México,

<u>Fuentes Naturales</u>.-Las tolvaneras que se producían sobre todo en el área del vaso de Texcoco han disminuido por la urbanización de la zona. Aún así, el número de hectáreas erosionadas se estima en 22 000.

Sin embargo, no se cuenta con un estudio que permita calcular en que porcentaje contribuyen estas fuentes a la contaminación por partículas.

En México más del 90 % de la energía utilizada proviene de la combustión de los hidrocarburos, el 95 % del CO₂ es emitido por el sector transporte y el 75% del SO₂ es emitido por la industria, producción de energía y servicios.

De igual manera las industrias de la elaboración de papel y de cemento son emisoras de partículas, junto con las refinerías industriales.

Una fuente adicional de partículas que se debe considerar es el levantamiento de polvo asociado con la actividad de la agricultura y los tiraderos de basura a cielo abierto.

Los materiales producidos por la actividad del hombre se encuentran, de acuerdo a la distribución de tamaños por partículas, en un rango que va desde partículas

finamente divididas a fragmentos muy grandes de material mineral. En los procesos industriales modernos las emisiones signifivativas se concentran en las partículas finas, de tamaño menor a 1µm.

Un ejemplo de distribucion por tamaños típica para el aerosol urbano se muestra en la figura 1.1. La concentración de partículas en un área urbana esta influenciada por fuentes de partículas finas entre 0.1 y 1.0 µm. La combustión de gasolinas es el contribuyente mayor de tales partículas con la adición de partículas producto de la actividad industrial.



Figura 1.1 Gráfica típica para la distribución numérica de tamaños para el aerosol urbano. (De Whitby et al. 1972).

En resumen, la actividad del hombre provee una diversidad de partículas materiales inyectadas en el aire. Muchas de estas emisiones pueden tener características físicas y químicas que las hacen difíciles de distinguir de las emitidas naturalmente. La enorme cantidad de partículas formadas en la atmósfera se mezclan por procesos físicos y son sometidas, también, a reacciones químicas creando una complicada mezcla heterogénea, el contenido de ésta varía con la región geográfica y con la altitud. La composición de las particulas provenientes de emisiones de vehiculos

que operan con gasolina con plomo son principalmente: H_4^- , carbón elemental, carbón orgánico, CI, Br, y Pb. Para vehículos que funcionan con gasolina sín plomo, los componentes principales son: carbón elemental, carbón orgánico, SO⁺ y NH₂.

Los escapes de automóviles con controlador de emisiones catalíticas que usan gasolina sin plomo contienen sólo trazas de metales, pero están enriquecidas con sulfatos primarios. Las emisiones de vehículos diesel son principalmente carbonáceos, con una gran componente de carbón elemental.

La composición de las cenizas resultantes de combustibles fósiles contiene principalmente elementos como: Al, Si, Ca, Na, Fe, Mg y K (Page et al., 1979).

La emisión de particulas de la fundición de cobre y la emisión de plantas generadoras tienen como componente principal al aluminio.

Los componentes gaseosos del aerosol atmosférico son contaminantes formados por la mezcla de los siguientes constituyentes: oxígeno, nitrógeno, vapor de agua y dióxido de carbono; de éstos, el vapor de agua es el mas importante para el comportamiento de las partículas suspendidas ya que interactuan íntimamente con otros contaminantes solubles.

La mayoría de las partículas atmosféricas son higroscópicas por naturaleza y adquieren agua para equilibrar una cierta humedad dada. Una humedad relativa menor al 50% produce una partícula con una concentración de agua de 5-10% (Rood et al., 1987).

El gas más común encontrado en atmósferas urbanas es el SO₂, junto con óxidos de nitrógeno, siendo más abundantes el óxido nítrico (NO) y el amoníaco (NH₃).

Así, los principales precursores en la formación del aerosol son productos de oxidación de gases de azufre y nitrógeno y ciertos vapores de hidrocarburos.

Los sulfatos se originan por la oxidación de los gases de azufre (S) en la atmósfera, principalmente de la oxidación del SO₂ producido por procesos industriales o naturales. El resultado final de la oxidación de compuestos de S en la atmósfera es la formación de compuestos de sulfatos en forma de partículas (Hidy et al., 1978).

Los sulfatos están concentrados en las partículas finas menores a 1 μ m de diámetro (John et al., 1990). Sin embargo, se observa una pequeña diferencia en clases de

tamaños dependiendo de la concentración de sulfatos y de la concentración de ozono y de la humedad relativa (Hidy, 1984). Los diferentes estudios que se han realizado para el valle de México reportan al azufre como uno de los compuestos con más alta concentración (Barfoot et al., 1984; Miranda et al., 1992 y Montañez y García, 1993).

Los nitratos se producen en la atmósfera por oxidación del NO₂ que es el resultado de diversos procesos de combustión. La oxidación de NO₂ y NO₃ está relacionada con la actividad fotoquímica y con la formación de oxidantes (Sandberg et al., 1976).

Paralelamente a la variedad de gases de azufre y nitrógeno están los vapores orgánicos. Las olefinas y los aromáticos representan una fuente potencial de especies reactivas siendo peligrosas para la salud humana.

La tabla 1.3 muestra algunos de los compuestos de azufre y nitrógeno que se encuentran en la atmósfera (Hidy, 1984).

	- Marco	Concentración	(ppb)		
Constituyente		Urbano	Rural	Origen	
Azufre				· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
	SO₂	5-500	1-50	Combustión	
	H₂S	1-50	0.1-50	Biogénico	
	COS	0.1	0.1	Biogénico	
	(CH₃)₂S	0.1	0.1	Biogénico	
	CS ₂	0.1	0.1	Biogénico	
Nitrógeno					
	N ₂ O	300	300	Biogénico	
	NO	10-1000	0.1-100	Combustión	
	NO ₂	1-500	0.1-100	Combustión	
	HNO3	0.1-20	0.0203	Reacciones	
	NH ₃	1-80	0.1-10	Biogénico	

Tabla 1.3 Algunos componentes de azufre y nitrógeno más comunes en la atmósfera. En resumen, los constituyentes más comúnes del aerosol son: los sulfatos, nitratos, carbón orgánico y metales. El aerosol atmosférico contaminante incluye SO_2 , partículas de sulfato (SO_4^{-}) , hollín y compuestos asociados con la combustión de gasolinas.

Algunos de los constituyentes comunes contenidos en las partículas son los óxidos de metales alcalinos o sales encontradas en el polvo del suelo.

Otras posibles fuentes de partículas metálicas son: la industría de transformación del petróleo, las refinerías, las operaciones de fundición y una gran variedad de procesos de terminado de metales.

Algunas partículas presentes en la atmósfera que pueden tener un impacto significativo en la salud humana son: los virus, bacterias, hongos, algas, esporas y polen (Brain, 1977) las cuales abarcan un rango de tamaños entre, aproximadamente, 0.015-100 µm.

En el Valle de México los elementos contaminantes más comunes de acuerdo a las fuentes mencionadas anteriormente son (Semarnap, 1996):

Fuentes móviles.- Emiten un total de 10 millones de toneladas de partículas tóxicas al año de las cuales 14 000 ton son de SO₂, 161 000 ton de NO, 16 000 000 ton de CO, 1 100 000 ton de hidrocarburos y 233 000 ton de otros tóxicos.

Fuentes fijas.- Éstas emiten 605 000 ton de SO₂, 138 000 ton de óxidos de nitrógeno, 181 000 de monóxido de carbono y 225 000 de hidrocarburos.

1.2 PROCESOS DE FORMACION

El aerosol es, por su naturaleza, inestable en el sentido de que la concentración y las propiedades de las partículas cambian con el tiempo. Estos cambios pueden ser el resultado de procesos físicos y químicos que promueven un cambio en el tamaño y composición de las partículas. Todos estos procesos involucran transferencia de masa de la partícula al medio o viceversa, esta transferencia puede ser el resultado de la transferencia molecular entre la partícula y el gas que la rodea, por ejemplo la condensación, la evaporación y reacciones químicas, o puede ser el resultado de interacciones entre las partículas, por ejemplo la coagulación.

Estos procesos están involucrados en la formación de "smog" fotoquímico y son la clave para formar la distribución por tamaños del aerosol atmosférico.

La presión parcial de un vapor es una manera de expresar su concentración en un volumen de gas, ésta es la presión que ejercería el vapor si éste fuera el único componente presente, y representa la presión parcial mínima para que el sistema vapor-líquido se mantenga en equilibrio. Esta es una condición necesaria para el equilibrio de masa.

En los procesos de condensación y evaporación del aerosol se calcula el cociente de la presión parcial de vapor p entre la presión de vapor de saturación p_s ; este cociente es llamado la razón de saturación S_R : es igual a 1 cuando la mezcla está saturada, es >1 cuando la mezcla esta sobresaturada y es < 1 cuando la mezcla esta subsaturada.

El proceso de cambio de fase para formar un conjunto de partículas puede inducirse de tal manera que se alcance la sobresaturación por: a) expansión adiabática del gas, b) la mezcla de un gas caliente con un gas frío o c) reacciones químicas donde se producen especies condensables.

Como las partículas de aerosol líquidas tienen una superficie marcadamente curva se requiere una mayor presión parcial para mantener el equilibrio de masa a una temperatura dada. Este incremento en la presión parcial del vapor causa un decremento en el tamaño de la particula, este fenómeno se llama efecto Kelvin (Hinds, 1982).

Nucleación

Nucleación Heterogénea

Este proceso se lleva a cabo en partículas submicrónicas, ya existentes, llamadas núcleos de condensación, que sirven, precisamente, como sitios de condensación. Nuestra atmósfera contiene cientos de estos núcleos en cada cm³ de aire.

En una primera aproximación, los núcleos insolubles sirven como sitios pasivos en los cuales ocurre la condensación, para condiciones de sobresaturación. Bajo estas condiciones, un núcleo sólido tendría en su superficie una capa absorbente de

moléculas de vapor. Si el núcleo tuviera un diámetro mayor que el diámetro de Kelvin (Hinds, 1982) para una condición particular de sobresaturación, el núcleo se vería como una gota con las moléculas de vapor alrededor y el vapor se condensaría en su superficie.

La situación con núcleos solubles es más compleja. La atmósfera contiene un gran número de núcleos solubles que se forman con residuos sólidos, después de que el agua se ha evaporado de una gota. Estos núcleos solubles tienen una fuerte afinidad por el agua, facilitan la formación inicial de gotas y su crecimiento puede ocurrir a razones de saturación bajas.

Nucleación Homogénea

En este proceso las gotas pueden formarse en ausencia de núcleos de condensación y se requiere de razones de saturación grandes.

En ausencia de partículas en un vapor condensado, las partículas pueden formarse por nucleación homogénea o aglomerado molecular en un vapor sobresaturado.

Cuando la sobresaturación del vapor se lleva a cabo en un sistema multicomponente, las partículas mezcladas pueden formarse por nucleación heteromolecular. Cuando las partículas ya existen en una mezcla de vapor sobresaturado ellas actúan como núcleos de condensación.

Condensación

La producción y crecimiento de partículas en presencia de vapor condensado, es un proceso importante en la dinámica del aerosol.

El método principal de formación y crecimiento de partículas del aerosol en la naturaleza es la condensación, además de ser el proceso más importante de transferencia de masa entre la fase gaseosa y la partícula. Este proceso requiere de vapor sobresaturado y se inicia con la presencia iones, asi como también con partículas solubles o insolubles.

Cuando una gota de líquido está en un ambiente sobresaturado que excede los requerimientos dados por la ecuación de Kelvin (Hinds, 1982), la gota crece por condensación de vapor en su superficie. La tasa de crecimiento depende de la razón

de saturación y del tamaño de la partícula y está controlada por la frecuencia de colisión de las moléculas de vapor con la superficie de la gota.

Evaporación

El proceso de evaporación de una gota líquida pura (sin sales disueltas) es similar a un proceso de crecimiento, excepto que éste sucede en la dirección opuesta. La evaporación ocurre cuando la presión parcial de vapor es menor que la presión de vapor saturada ($p < p_s$).

Coagulación

Las partículas ligeramente mayores, en tamaño, que las moléculas de un gas son gobernadas principalmente por movimiento browniano y las partículas con r > 1 μ m son afectadas por fuerzas inerciales y gravitacionales.

La coagulación es un proceso de crecimiento resultante de la colisión entre partículas del aerosol. Si las colisiones son resultado de movimiento browniano el proceso se llama coagulación térmica, si son el resultado del movimiento causado por fuerzas externas el proceso es llamado coagulación cinemática. La coagulación térmica es de alguna manera análoga al crecimiento por condensación, a excepción de que en éste la difusión de las moléculas de la superficie son las que causan el crecimiento.

El resultado de varias colisiones entre partículas da un incremento en el tamaño de la partícula y un decremento en la concentración numérica del aerosol, en ausencia de cualquier mecanismo de depositación no hay cambio en la concentración de masa como resultado de la coagulación.

La razón de cambio en la concentración numérica del aerosol se calcula en base a la difusión de partículas a la superficie de otras partículas (Hinds, 1982) y está dada por

$$\frac{dN}{dt} = -KN^2 \tag{1.1}$$

donde N es el número de partículas y K el coeficiente de coagulación.

El coeficiente de coagulación depende del tamaño de la particula. La coagulación es un proceso rápido a altas concentraciones y lento a bajas concentraciones.

La figura 1.2 compara concentraciones numéricas contra el tiempo para varias concentraciones iniciales y para un coeficiente de coagulación de 5 X 10^{-10} cm³ / s. En un período de pocos minutos la coagulación es significativa si la concentración de partículas excede 10^{6} /cm³.



Figura 1.2 Coagulación simple monodispersa. Concentración numérica contra tiempo para varias concentraciones iniciales. De Hinds 1982.

Cuando el tamaño de las particulas se incrementa, la concentración numérica decrece, pero para un sistema sin pérdidas, la masa se mantiene constante. Si la concentración numérica crece a la mitad de su valor original y la masa (volumen) es la misma, cada particula debe de tener el doble de masa (volumen) original.

Si inicialmente la distribución es muy ancha, la coagulación con el tiempo, tiende a hacerla más estrecha. Esto resulta de la coagulación realzada de las partículas pequeñas con respecto a las partículas grandes y lleva a una reducción substancial de las partículas pequeñas y a un incremento en el número de partículas grandes. El resultado neto es un incremento en el diámetro de la masa promedio y un estrechamiento de la distribución de tamaños, como lo muestra la figura 1.3.

Coagulación Cinemática

Éste es un proceso de coagulación donde el movimiento relativo entre partículas es creado por fuerzas externas en lugar del movimiento browniano (Fuchs, 1964). Este mecanismo es sólo significativo para partículas mayores a 1 μm.



Figura 1.3 Efectos de la coagulación sobre la distribución de tamaños. De Hinds, 1982.

Autopreservación. La autopreservación o similaridad fue desarrollada teóricamente por Friedlander y Wang (1966). La tranformación de similaridad para la distribución de tamaños de partículas supone que la fracción de partículas N en un rango de tamaños dado es función sólo del volumen normalizado V por el promedio del volumen de las partículas V/N. Tanto V como N son funciones del tiempo, pero bajo condiciones de coagulación limitantes, el promedio del volumen es casí constante y la distribución de tamaños para tiempos diferentes tiene la misma forma, excepto por un factor de escala.

Las partículas del aerosol tienen muy altas razones de superficie a masa. Por ejemplo, un gramo de material por unidad de densidad, cuando se divide en partículas de 0.1 µm, tiene un área de 60 m². Por su gran superficie específica

(superficie por gramo) los aerosoles participan activamente en muchas clases de interacciones entre moléculas de gas y partículas sólidas o líquidas. Las partículas pueden sufrir tres clases de reacciones: reacciones entre componentes con una partícula, reacciones entre partículas de diferente composición química y reacciones entre la partícula y una o más especies químicas en la fase gas circundante.

Absorción y Adsorción son procesos relacionados que también son pasos necesarios para la llegada de las moléculas de gas a la superficie de la partícula. Estos procesos tienen tres pasos de transferencia de masa, en serie, cualquiera de los cuales puede ser la dirección dominante. Primero hay difusión de moléculas de gas a la superficie de la partícula. Lo siguiente es la transferencia entre la interfase o reacción a la interfase y finalmente hay difusión dentro de la partícula sólida o líquida.

Absorción

El proceso por medio del cual las moléculas de gas se disuelven en una gota líquida se llama absorción. El proceso continúa hasta que se alcanza el límite de solubilidad del gas en el líquido; este límite puede cambiar con la temperatura o por la presencia de otros componentes disolventes.

Adsorción

Este proceso es la transferencia de moléculas de gas, del gas circundante, a la superficie sólida. Existen dos tipos de adsorción que pueden ocurrir en la superficie de una partícula sólida: adsorción física (fisisorción) y adsorción química (quimisorción). La fisisorción es un proceso físico donde las moléculas de gas son retenidas en la superficie de la partícula por fuerzas de van der Walls.

La quimisorción es similar a la fisisorción excepto que, en la primera se forman enlaces químicos para sujetar las moléculas de gas en la superficie de la partícula.

En algunos casos las moléculas se sujetan a la superficie por fisisorción y entonces reaccionan lentamente para ligar por quimisorción. En otros casos una capa de fisisorción puede formarse en el tope de una capa de quimisorción.

La sobresaturación de una especie condensable puede resultar, también, de reacciones químicas en un gas para formar un producto a una baja presión de vapor:

en la formación de esmog fotoquímico ciertas reacciones en la fase gaseosa son favorecidas por la luz ultravioleta y forman productos de reacción a baja presión, debido a su baja presión de vapor estos productos existen a una alta sobresaturación y pueden formar partículas por nucleación homogénea. Cuando en la atmósfera ocurre un incremento en la concentración de masa del aerosol por este mecanismo, se dice que ocurre una conversión gas a partícula. Existen varias reacciones las cuales pueden producir partículas de esta manera. Una de las más conocidas es la siguiente

$$NH_3 + HCI \rightarrow NH_4 CI$$

la cual produce un humo finamente dividido (esmog).

Otras reacciones en la fase gaseosa incluyen la producción de ácido sulfúrico de la oxidación del SO₂ en el aire y la producción de partículas orgánicas de olefinas procedentes de hidrocarburos.

La oxidación del SO₂ ocurre por una gran variedad de reacciones e interactúa con derivados fotoquímicos intermedios, incluyendo radicales libres, tales como el radical hidróxido (OH) y el radical (RO). Cuando un SO₂ intermedio se forma, éste puede reaccionar rapidamente con el vapor de agua presente para producir vapor de ácido sulfúrico.

La tabla 1.4 muestra algunas reacciones en las que interviene el SO₂ dando como resultado la formación de SO₃.

Tabla 1.4 Algunas reacciones de formación de SO₃, importantes en procesos atmosfericos(Hidy, 1984).

$O_3 + SO_2 \rightarrow SO_3 + O_2$	$SO_2 + H_2O \leftrightarrow H_2SO_3$
$CH_3 \operatorname{O}_2 + SO_2 \to CH_3 \operatorname{O} + SO_3$	$NO_2 + SO_2 \rightarrow SO_3 + NO$
$CH_3 O + SO_2 \rightarrow CH_3OSO_2$	$NO_3 + SO_2 \rightarrow SO_3 + NO_2$

1.3 CARACTERISTICAS OPTICAS

La determinación de las propiedades tanto microfísicas como ópticas del aerosol es un factor importante para evaluar el balance energético, el impacto climático y la contaminación atmosférica, temas de gran importancia en la actualidad.

Las propiedades ópticas del aerosol son función de la composición del aerosol, de la morfología de las partículas individuales y de la distribución por tamaños. Como las propiedades físicas de las partículas cambian con el tiempo, las propiedades ópticas también están sujetas a cambios temporales.

Cuando nosotros vemos un objeto estamos viendo principalmente la luz esparcida por éste; que alcanza nuestros ojos proporcionándonos información acerca del color, textura y forma del objeto.

Una de las influencias más importantes del aerosol radica en la transferencia de luz visible a la atmósfera terrestre, la cual es especialmente importante para problemas de visibilidad y de la percepción visual de la calidad del aire.

Las propiedades ópticas del aerosol son responsables de muchos efectos atmosféricos espectaculares tales como una coloreada puesta de sol y también causan la degradación de la visibilidad asociada con la contaminación atmosférica. Estos fenómenos son resultado directo del esparcimiento y absorción de la luz por partículas del aerosol.

El esparcimiento de la luz es un proceso físico fundamental, asociado con la radiación y su interacción con la materia; en este proceso, una partícula en la trayectoria de una onda electromagnética continuamente extrae energía de la onda incidente y reirradia esta energía en todas direcciones. Esto ocurre para todas las longitudes de onda cubriendo todo el espectro electromagnético. Cuando una onda electromagnética interacciona con una partícula, una parte de la energía incidente es esparcida en todas direcciones. La energía esparcida es llamada radiación dispersada. Todas las particulas en la naturaleza, ya sea del tamaño de un electrón o de un planeta, esparcen radiación.

Como se muestra en la figura 1.4 el plano formado por el haz incidente y la dirección de observación (el haz esparcido) es llamado el plano de esparcimiento. El ángulo

de esparcimiento θ se mide de la dirección del haz incidente a la dirección del haz esparcido. La luz que es reflejada o esparcida y que regresa a la fuente, θ =180°, es llamada la luz retrodispersada. Los haces incidentes y esparcidos son resueltos en dos componentes polarizadas, independientes, una con un vector eléctrico perpendicular al plano de esparcimiento (subíndice 1) y uno paralelo al plano de esparcimiento (subíndice 2).

La energía esparcida por partículas esféricas puede obtenerse teóricamente por la solución de la ecuación de Maxwell para ondas electromagnéticas, en coordenadas polares esféricas. Una solución particular simple se obtiene cuando las partículas son esféricas y son mucho más pequeñas que la longitud de onda de la radiación incidente. Esta solución fue derivada por Rayleigh y a este caso se le llama esparcimiento de Rayleigh.



Figura 1.4 Diagrama mostrando el plano de esparcimiento, el ángulo de esparcimiento y las componentes polarizadas de la luz esparcida.

Esta teoría es particularmente útil para estudiar el esparcimiento de la radiación solar por moléculas de aire.

Para partículas cuyo tamaño es comparable o mayor que la longitud de onda el esparcimiento es referido como esparcimiento de Mie.

La figura 1.5 muestra la diferencia entre los modos de esparcimiento de Rayleigh y de Mie. En el modo de Rayleigh el proceso de esparcimiento es idéntico en las direcciones delantera y trasera. El esparcimiento es máximo en ambas direcciones y es mínimo a 90° en la línea de incidencia. En el esparcimiento de Mie, más energía es esparcida en la dirección delantera que en la dirección trasera.



Figura 1.5 Diagrama polar del esparcimiento de la luz para: a) esparcimiento de Rayleigh y b)esparcimiento de Mie.

El proceso mediante el cual la radiación esparcida por una partícula choca con otras particulas en el medio es llamado esparcimiento múltiple; en una atmósfera limpia, casi la mitad de la energía así esparcida regresa al espacio y la otra mitad alcanza el suelo. En una atmósfera conteniendo partículas de polvo, la mayoría de la energía esparcida alcanza el suelo, por el gran esparcimiento en la dirección delantera.
La atenuación de la radiación solar por partículas no sólo es causada por efectos de esparcimiento, sino que también las partículas absorben la radiación electromagnética; en este proceso la energía es absorbida por la partícula y convertida en otra forma de energía. En en el espectro visible, la absorción de energía es casi nula en las moleculas atmosféricas.

Ambos procesos, esparcimiento y absorción eliminan energía de un haz de luz atravesando un medio. El haz es atenuado y esta atenuación se llama extinción. En un medio no absorbente el esparcimiento es el único proceso de extinción.

Investigaciones espectrales hacen suponer que en general la extinción por aerosol debida a esparcimiento o absorción o ambas combinadas es una función continua de la longitud de onda (Angström, 1961).

Uno de los primeros trabajos en los que se estudiaron las propiedades ópticas de las partículas fue el realizado por Maxwell Garnett en 1904. Él consideró el paso de la luz, de una determinada longitud de onda, a través de un volumen ocupado por un medio dieléctrico que contiene muchas esferas metálicas pequeñas. Con la ayuda de la fórmula de Lorentz-Lorenz (Liou, 1980), Garnett mostró que las propiedades del sistema de partículas son equivalentes a las de un medio con un índice de refracción complejo.

Posteriormente, en un artículo publicado en 1908, G. Mie obtuvo, con base en la teoría electromagnética, una solución rigurosa para la difracción de una onda plana monocromática por una esfera homogénea, de cualquier diámetro y cualquier composición, situada en un medio homogéneo.

La solución debida a Mie, derivada para la difracción por una esfera simple, también se aplica a la difracción por cualquier número de esferas, suponiendo que todas ellas tienen el mismo diámetro y la misma composición y suponiendo también que dichas esferas están aleatoriamente distribuidas y separadas, una de otra, por una distancia que es mayor a la longitud de onda. Bajo estas circunstancias, hay una relación de fase no coherente entre la luz que es esparcida por las diferentes esferas y la energía total esparcida, la cual es igual a la energía que es esparcida por una esfera multiplicada por su número total.

El método empleado para obtener la solución de Mie se presenta de manera rigurosa en un gran número de textos clásicos (por ejem. Van de Hulst, 1957; Deirmendjian, 1969); en este trabajo se presenta una derivación de esta solución en apéndice A.

A continuación se mencionarán algunos parámetros ópticos involucrados en el cálculo de Mie, que son indíspensables para caracterizar al aerosol.

El primero de ellos es el índice de refracción: la existencia de la conductividad en una partícula o en un medio puede tomarse en cuenta introduciendo un índice de refracción complejo, donde la parte imaginaria es importante. El índice de refracción complejo de un medio se define como

$m = m_r + i m_i$

donde i es la unidad de los números imaginarios $(\sqrt{-1})$, m, es la parte real y m, la parte imaginaria del índice de refracción de la esfera. En el espectro solar visible la parte imaginaria para moléculas de aire es muy pequeña, así que la absorción de la radiación solar por moléculas de aire puede ser despreciada. La parte real del índice refractivo para moléculas de aire es muy cercana a 1, pero ello depende de la longitud de onda de la radiación incidente. Los parámetros ópticos son fuertemente sensibles a la parte imaginaria, m_i (Sokolik y Golitsyn, 1993)

El valor real del índice de refracción de una partícula, para cada longitud de onda, depende de su composición química, de su tamaño, de su forma y de la humedad relativa del aire (Ivlev y Popova, 1973).

Ya que el esparcimiento es gobernado por el tamaño de la partícula (radio, a) y la longitud de onda de la radiación incidente (λ), en algunos cálculos se utiliza un término llamado el factor de tamaño, el cual se define como

x=πa/λ

donde a es el radio y λ la longitud de onda.

A continuación se mencionarán otros parámetros característicos del aerosol atmosférico.

La extinción de la luz a través de un volumen de esferas puede expresarse en términos de una sección transversal de extinción, C, la cual es diferente de la sección transversal geométrica de la partícula (πa^2).

La sección transversal de extinción, C_{ext} , en unidades de área, es la suma de las secciones transversales de esparcimiento C_{esp} y de absorción C_{abs} .

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

La sección transversal de esparcimiento representa la cantidad de energía incidente la cual es removida de la dirección original debido a un evento simple de esparcimiento, de tal manera que la energía es redistribuida isotrópicamente en el área de una esfera cuyo centro es el dispersor y cuyo radio es a.

Generalmente, estas secciones son funciones de la orientación de la partícula y del estado de polarización de la luz incidente.

Para partículas no absorbentes

Una esfera de radio a tiene una sección transversal geométrica G= πa^2 . Entonces los valores

$$Q_{ext} = C_{ext} / G$$

 $Q_{esp} = C_{esp} / G$
 $Q_{aba} = C_{aba} / G$

son llamados los factores de eficiencia o secciones efectivas, para extinción, esparcimiento y absorción, respectivamente. Estos factores dependen de la orientación y del estado de polarización de la luz incidente, así como del índice

refractivo del material, de la longitud de onda de la radiación y del tamaño y forma de la partícula.

Ya que la extinción ocurre por absorción o por dispersión o por una combinación de ambas, entonces

$$Q_{ext} = Q_{abs} + Q_{esp}$$

Estos factores expresados en términos de los coeficientes de Mie a, y b, (ec. A.73, apéndice A) se expresan como

$$Q_{ext} = \frac{2}{x^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) \operatorname{Re}[a_l + b_l]$$
$$Q_{exp} = \frac{2}{x^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) (|a_l|^2 + |b_l|^2)$$

donde x es el parámetro de tamaño

Una manera de visualizar estas cantidades es considerar la radiación como un haz de fotones que fluyen dentro de un volumen conteniendo las partículas dispersoras. Cada partícula dentro del volumen bloquea una cierta cantidad de radiación, resultando una reducción de la cantidad de radiación trasmitida directamente a través del volumen proporcional al número de partículas.

Cuando la eficiencia de extinción es multiplicada por la concentración numérica de partículas (cm⁻³) esta cantidad es referida como el coeficiente de extinción:

$$\sigma_{aa} = \int_0^\infty Q_{aa} N(a) \pi a^2 da$$

donde

$$N = \int_{a_1}^{a_2} \frac{dn(a)}{da} da$$

es el número total de partículas cuya densidad de distribución por tamaños puede describirse por

$$dn(a) / da (cm^{-3} \mu m^{-1}).$$

De manera similar el coeficiente de esparcimiento está dado por

$$\sigma_{esp} = \int_0^\infty Q_{esp} N(a) \pi a^2 da$$

Entonces, el coeficiente de absorción puede ser calculado como

$$\sigma_{ext} = \sigma_{esp} + \sigma_{obs}$$

Otro de los parámetros ópticos, también calculado del desarrollo de Mie, es la denominada función fase de esparcimiento P, la cual muestra la distribución angular y el estado de polarización de la radiación esparcida, relacionada al ángulo de esparcimiento 0.

El factor de asimetría (g) es el primer momento de la función fase de esparcimiento y también se calcula usando la teoría de Mie, este parámetro nos dice qué tan simetrico es el patrón de esparcimiento.

Cuando la energía radiante incide sobre una superficie, esta puede ser absorbida, reflejada o transmitida parcialmente.

Cuando la fuente de radiación incidente es el sol, se usa el término albedo para designar a la componente difusa reflejada al espacio. Determinar un valor exacto de esta variable es muy importante para evaluar, entre otros factores, el balance térmico en la atmósfera. El albedo es mayor a longitudes de onda cortas porque se esparce más energía a longitudes de onda cortas que a longitudes de onda largas.

El albedo puede definirse como el cociente

ω= Radiación reflejada por una superficie/ Radiación incidente sobre la superficie

El albedo de dispersión simple es la fracción de la energía eliminada de la onda incidente, la cual reaparece como radiación esparcida.

El albedo de dispersión simple para una muestra de partículas es

$$\widetilde{\omega} = \frac{\sigma_{exp}}{\sigma_{ext}} \tag{1.2}$$

Otro parámetro importante para caracterizar al aerosol es el espesor óptico espectral de un medio, el cual se define por

$$\tau(\lambda) = \int_0^\infty \sigma_{\bullet}(\lambda, z) dz;$$

éste indica la intensidad de la atenuación de la radiación por partículas y gases con respecto a una longitud de onda específica de la luz incidente.

El espesor óptico del aerosol total es llamado turbiedad. La turbiedad es un parámetro óptico de la atmósfera y puede relacionarse con la visibilidad horizontal, la cual en si misma es una medida subjetiva.

Teníendo en cuenta que el aerosol contiene partículas de varios tamaños se hace necesario incorporar el tamaño de la partícula en una fórmula de atenuación; sin embargo, ya que los efectos de atenuación, ya sea por esparcimiento o absorción, son dificiles de separar, Angstrom (1961) sugirió una fórmula simple conocida como fórmula de turbiedad de Angstrom, dada por

donde k es llamado el coeficiente de turbiedad de Angstrom, α es el coeficiente de la longitud de onda; k incluye la atenuación debida a partículas secas y a partículas humedas, i.e., todos los aerosoles.

En la ecuación anterior k es un índice que representa la cantidad de aerosol presente en la atmósfera en la dirección vertical. El exponente α de la longitud de onda λ está relacionado a la distribución de tamaños de las partículas de aerosol. Valores grandes de α indican una fracción alta de partículas pequeñas respecto a partículas grandes. Altos valores de k y bajos valores de α representan un cielo muy turbio, k y α pueden relacionarse con la visibilidad, un valor fijo de k y un valor bajo de α significan una alta visibilidad, i.e. una alta transparencia atmosférica.

Una aplicación importante de la teoría del esparcimiento y extinción de la luz es el estudio de la visibilidad en la atmósfera. La visibilidad es una variable cualitativa que se refiere a la claridad con la que pueden verse objetos distantes. Un término más útil y científico es el de rango visual, L_v, el cual expresa cómo uno puede ver en una dirección dada, o la distancia a la cual un objeto es dicernible.

El rango visual atmosférico está gobernado principalmente por el esparcimiento y la absorción de la luz por partículas de aerosol presentes en la atmósfera. El esparcimiento por moléculas de aire tiene un efecto menor y teóricamente estimable.

El rango visual está dado por dos factores: el contraste entre un objeto y sus alrededores y la agudeza visual.

Uno puede ver fácilmente las estrellas en una noche clara por el contraste, extremo, entre la brillantez de la estrella y lo obscuro del espacio. En la mayoría de las situaciones es la falta de contraste aparente entre un objeto y sus alrededores lo que limita la facilidad de observar un objeto. Las partículas del aerosol, pricipalmente en el rango de tamaños de 0.1 a 1.0 µm, son las que reducen el contraste aparente por el esparcimiento de la luz.

Una expresión que da el contraste aparente C_R de un objeto cuando es visto contra el horizonte en función de la distancia entre el observador y el objeto, es la propuesta por Koschmieder (Middleton, 1968):

$$C_R = C_0 e^{-\sigma_{est}L}$$

Donde C_o es el contraste para un objeto aislado rodeado por un fondo uniforme y extenso y L la distancia entre el objeto y el observador.

El contraste mínimo requerido para distinguir un objeto de su alrededor es el llamado umbral de la brillantez de contraste ε .

Para un objeto visto hacia el horizonte a la luz del día, el rango visual se obtiene, para un valor de ε = 0.02, por la ecuación de Koschmieder

$$L_{\rm v} = \frac{3.9}{\sigma_{\rm ext}} \tag{1.3}$$

Bajo estas condiciones el rango visual es una función inversa simple del coeficiente de extinción atmosférico.

1.4 AEROSOL Y CLIMA

ģ

Un forzamiento del clima, natural o antropogénico, es un cambio impuesto que modifica el balance de radiación de la tierra, afectando así la temperatura del planeta. El forzamiento natural, que viene a ser el más significativo basado en la comparación sistemática de efectos radiativos, es el cambio en el aerosol atmosférico producido por las erupciones volcánicas y cambios en la irradiancia solar. El forzamiento antropogénico viene a aumentar la absorción por gases en el infrarrojo (efecto invernadero), incrementando, también, el aerosol troposférico lo cual provoca cambios en la superficie terrestre reflectante, debidos a la deforestación y desertificación.

Observaciones del incremento del efecto invernadero sobre la atmósfera de la Tierra, causado por altas concentraciones de gases producidos principalmente por el hombre, llevan a pensar en un calentamiento global en las últimas décadas. Simulaciones (Manabe y Wetherald, 1975) basadas en modelos paleoclimáticos, sugieren que el influencia potencial del efecto invernadero dentro de un siglo podría

ser la causa de la diferencia entre el clima de hoy y la última glaciación, ocurrida hace 20 000 años. Pero el efecto invernadero ha entrado en competencia con otros mecanismos de cambio de clima: la variabilidad solar y el aerosol atmosférico (natural y hecho por el hombre).

Es ya un hecho aceptado que el aerosol troposférico debe incluirse en modelos atmosféricos como un constituyente radiativamente activo. En consecuencia las últimas versiones de los modelos climáticos, como los del National Center for Atmospheric Research (NCAR), incorporan los efectos radiativos del metano, óxidos de nitrógeno y CFCs (Briegleb, 1992).

El sol es la fuente de energía para la circulación atmosférica y para el calentamiento de la superficie de la Tierra. Ya que la temperatura media global es aproximadamente constante, el planeta debe perder energía en la misma proporción que la absorbe; cualquier alteración en este balance podría tener consecuencias muy serias para la vida en la Tierra.

El balance de energía global toma en cuenta las ganancias y pérdidas asociadas con absorción, reflexión y radiación de energía en diferentes partes de la atmósfera y la superficie de la Tierra. Las diferencias espaciales en el calentamiento y el enfriamiento de la atmósfera crean las fuerzas para la circulación atmosférica. El balance de radiación atmosférica depende de la absorción de energía por vapor de agua y dióxido de carbono y de la interacción de las nubes en la parte infrarroja del espectro de energía.

El papel de las partículas del aerosol en el balance de energía se muestra esquemáticamente en la figura 1.6. La radiación solar incidente entra por la atmósfera alta con una longitud de onda de aproximadamente 0.5 µm en la máxima energía. Ésta retorna al espacio en el infrarrojo con una longitud de onda de aproximadamente 20 µm en la máxima energía. Las partículas existentes en la estratosfera esparcen la

energía entrante y absorben la radiación infrarroja saliente. Las partículas troposféricas cercanas a la superficie de la tierra también esparcen o absorben radiación entrante y saliente y reemiten radiación en el infrarrojo. El efecto en la

temperatura superficial depende de estas interacciones complejas de absorción y transferencia de energía.

En atmósferas altamente contaminadas como la de la Ciudad de México, la cantidad de radiación atenuada por los aerosoles es del mismo orden de magnitud que la esparcida por las moléculas atmosféricas (Vasilyev et al., 1994).



Figura 1.6 Interacción entre el aerosol y la radiación solar e interacción entre el aerosol y la radiación infrarroja. El aerosol en la estratosfera absorbe y filtra la luz solar y absorbe la radiación infrarroja proveniente de la tierra.

El impacto de los cambios en la turbiedad atmosférica y en consecuencia en las condiciones ambientales y el clima ha sido documentado ya desde fín de siglo (Mitchell, 1982). Se cree que el clima y el impacto ambiental de los incrementos anómalos en la turbiedad atmosférica, debidos al impacto de un bólido podrían ser los responsables de la transición de la edad de los dinosaurios a la edad de los mamíferos (Alvarez, 1987). Se ha reconocido (Coakley and Cess, 1985) que el aerosol atmosférico asociado con nubes es el mayor modificador del régimen de radiación solar de onda corta ($0.3 - 5 \mu m$) del sistema tierra-atmósfera y que, dependiendo de su composición, éste también puede afectar el régimen de radiación de onda larga. Se hace entonces necesario estudiar las variaciones temporales y espaciales del aerosol atmosférico a escalas regionales y globales y monitorear sus

propiedades físicas y radiativas tales como, la abundancia columnar, distribución por tamaños, absorción y esparcimiento de la radiación.

La existencia de satélites orbitando la Tierra hace posible cubrir globalmente la superficie terrestre y sirve como una plataforma de monitoreo atmosférico, especialmente sobre los océanos donde las técnicas convencionales de medición de aerosoles no son practicables.

Se ha observado que la introducción de los efectos del aerosol troposférico en la radiación solar en modelos climáticos causa que los modelos tiendan hacia la desertificación sobre partes de África (Coakley and Cess, 1985). Dependiendo de su composición y localización en la atmósfera y sobre la superficie, el aerosol atmosférico puede aumentar o compensar el efecto invernadero (Rasool and Schneider, 1971).

Varios estudios muestran que los efectos climáticos del aerosol se deben a la reflectividad de radíación solar (enfriamiento), con un incremento menor, relativamente, en la opacidad infrarroja (calentamiento). El aumento de radiación solar reflejada y la opacidad infrarroja del aerosol dependen fuertemente del índice de refracción y del tipo de aerosol (Herman and Browning, 1975).

Debido al tipo de fuentes y a los mecanismos de producción, el aerosol atmosférico representa un sistema física y químicamente heterogéneo con componentes de alta variabilidad óptica.

Los modelos atmosféricos de circulación general (AGCM), los cuales son utilizados para tratar de reproducir el comportamiento futuro del clima, pueden ser herramientas apropiadas para estudiar los ciclos atmosféricos de las partículas de aerosol. Ellos pueden dar una extensa visión tridimensional del comportamiento de las particulas y pueden usarse para estudiar la sensibilidad del clima y estudios de pronóstico.

La temperatura media global anual es el parámetro del clima más usado, éste es determinado por el flujo de energía global gobernado por el albedo, la absorción y el efecto invernadero. La sustancia más importante en la atmósfera es el agua, el albedo es fuertemente influenciado por la cubierta y estructura de las nubes y el

vapor de agua es el gas dominante en el efecto invernadero. En la capa límite atmosférica, bajo un cielo claro, los aerosoles causan un calentamiento del orden de 0.5 Kd⁻¹ (Hanel, 1987) ya que las nubes de aerosol más densas a grandes altitudes pueden originar considerables superficies de enfriamiento, especialmente si el espesor óptico es mayor a uno; estos cálculos se derivan de investigaciones del invierno núclear (Ackermann, 1988). El aerosol estratosferico está fuertemente influenciado por erupciones volcánicas que podrían tener un efecto de enfriamiento pero esto no se ha demostrado realmente. Un conjunto de grandes erupciones volcánicas podría favorecer el efecto invernadero en algunos años o décadas, pero en el presente no se puede predecir la actividad volcánica y no se tienen bases para anticipar un impacto sistemático a largo plazo de los volcanes en el forzamiento neto del clima. En los procesos físicos y químicos que gobiernan la distribución vertical de la concentración del aerosol y la función de distribución por tamaños, la variación espacial y temporal de la abundancia del aerosol debida a erupciones volcánicas hacen el estudio del aerosol atmosférico complejo.

Un estudio conducido por Tanre et al. (1984) usando el modelo de baja resolución del ECMWF (European Centre for Medium Range Weather Forecast) indica que el efecto del aerosol es significativo para la temperatura, pero está justo en el limite del nivel de ruido para la dinámica. Sin embargo, el modelo de Tanre considera sólo tres tipos de aerosol troposférico. Para superar esa deficiencia se han presentado otros modelos como los de Deepak y Gerber (1983).

Las propiedades ópticas de las nubes dependen fuertemente del aerosol actuando como un núcleo de condensación de nube. Suponiendo un contenido de agua constante, el incremento en la concentración de los núcleos de condensación de nube incrementa el número de gotas y disminuye el tamaño de la gota. El cociente de la energía reflejada y trasmitida es inversamente proporcional al tamaño medio de la gota, aumenta con un incremento en la concentración numérica y el albedo es mayor. La influencia del aerosol en el albedo es mayor para nubes "gruesas".

El albedo o reflectancia de una nube es la fracción de la radiación incidente que es reflejada por la nube, integrada sobre el hemisferio de retrodispersión. Las grandes

areas de nubes planas estratiformes que cubren una apreciable fracción de la superficie de la tierra tienen un albedo de cerca de 0.5. Entonces, el balance de energía de la tierra es muy sensible al albedo de estas nubes.

Las nubes que se forman en la atmósfera y que tienen una alta concentración de núcleos de condensación tienden a tener una alta concentración de gotas. aumentando así el albedo de onda corta (solar) de las nubes. Como las nubes son ópticamente gruesas a longitudes de onda larga, los cambios en la absorción de la radiación terrestre, por nubes, debidos al incremento en la concentración de gotas son despreciables. Entonces desde este punto de vista, la contaminación antropogénica podría producir un enfriamiento de la superficie de la Tierra. Sin embargo, existe un efecto opuesto del aerosol en las nubes: incrementando las emisiones antropogénicas de partículas absorbedoras de luz (por ejem. carbón) el cual puede incorporarse dentro de las gotas de la nube, se incrementaría la absorción de la radiación solar por la nube y entonces tendería a un calentamiento de la superficie de la tierra. Twomey et al. (1984) concluyeron que a una escala global el efecto de enfriamiento es probablemente dominante y que el efecto climático del incremento de las concentraciones de aerosol podría ser comparable al del calentamiento global debido al incremento en la concentración del dióxido de carbono en la atmósfera.

El incremento del albedo global reduce la energía disponible, esto es equivalente a la reducción de la constante solar y así puede tener un efecto de enfriamiento (Charlson et al., 1987). Una cruda estimación del incremento de la reflectividad en las nubes debido al aerosol antropogénico da un 2%, el cual podría cambiar el albedo global de 0.30 a 0.31, lo cual alteraría la energía solar disponible de 266.4 a 262.7 Wm⁻². Suponiendo una sensibilidad básica de 0.25 KW⁻¹ esto podría corresponder a un enfriamiento neto de cerca de 1 K. El cambio de albedo debido al aerosol antropogénico ocurre principalmente entre los 30^o y los 70^o N y podría ser del orden de 2%. Sin embargo recientes observaciones muestran que el albedo de las nubes del hemisferio norte es más pequeño que el del hemisferio sur (Shwartz, 1988).

El aerosol afecta las nubes y, entonces, la temperatura a una escala global, así algunos mecanismos de retroalimentación pueden ocurrir: temperaturas altas podrían generar en el aire un aumento de vapor lo cual podría tener un efecto de calentamiento en la superficie de la tierra así como efectos potenciales en el contenido vapor-líquido en la nube. Los aerosoles incrementan el número de núcleos de condensación de nube activos incrementando así la densidad numérica de las partículas de la nube. Twomey(1977) predice que el aerosol antropogénico podría disminuir el tamaño medio de la nube y así inhíbir la precipitación y también incrementár la reflectividad de la nube. Observaciones de satélite y aéreas han confirmado esta predicción (Vasilyev and Ivlev, 1992). Cualitativamente un incremento en la reflectividad de la nube puede causar un enfriamiento en la superficie de la tierra.

La influencia de las emisiones industriales y antropogénicas en áreas urbanas sobre precipitaciones anómalas se han reportado en varios estudios (Hobbs et al., 1970; Eagan et al., 1974; Changnon, 1980). Estos estudios han mostrado que ciertas industrias que utilizan metales como el aluminio y acero contribuyen, considerablemente, en la formación de núcleos de hielo en la atmósfera.

Claramente el aerosol troposférico forzaría un enfriamiento pero su magnitud es muy íncierta, debido a que el aerosol troposferico es difícil de monitorear por su inhomogeneidad espacial. Actualmente la NASA está instalando la AERONET (AErosol Robotic NETwork) con colaboración internacional para el monitoreo global del aerosol y el vapor de agua atmosféricos. Esta red se propone distribuir en el globo una serie de estaciones fotométricas que estarán midiendo el espesor óptico del aerosol en longitudes de onda seleccionadas a priori. Con ayuda de algoritmos adecuados esta información generará el contenido de partículas y de vapor de agua en la columna vertical de aire. Los datos de la red serán transmitidos vía satélite al Centro de Vuelos Espaciales de la NASA, en donde se procesarán y distribuirán en tiempo casi real a los usuarios de la red (Leyva, 1998, comunicación personal).

1.5 DISTRIBUCIÓN POR TAMAÑOS DE LAS PARTÍCULAS DEL AEROSOL ATMOSFÉRICO.

Para entender y modelar la formación y transporte de las partículas del aerosol se requiere de información detallada sobre la distribución por tamaños de estas partículas. De igual manera, el impacto atmosférico de estas partículas depende fuertemente de esta distribución.

La separación por tamaños es el resultado de los procesos que crean las partículas, las interacciones de las partículas con otros materiales en la atmósfera y los procesos que las retiran de la atmósfera.

El coeficiente de extinción de partículas atmosféricas está relacionado por la teoría de Mie a la distribución por tamaños y a las propiedades ópticas de estas partículas atmosféricas (ver sección 1.3). Así, se hace necesario crear modelos adecuados de la estructura del aerosol para calcular las características ópticas de éste.

Desde el punto de vista del esparcimiento, la función de distribución por tamaños es la característica más importante de cualquier aerosol. Varios investigadores (Willeke and Brockmann, 1977; Oluwafemi, 1988; etc.) han estudiado la relación entre la distribución de tamaños y las características del esparcimiento, ya que estos dos parámetros, observables proveen puntos de vista independientes de las características del aerosol. En estos estudios se emplean dos métodos generales: el cálculo del coeficiente de atenuación y el cálculo de la distribución por tamaños de medidas del coeficiente de atenuación, por medio de la teoría de inversión (Yue and Deepak, 1983; Box and Lo, 1976).

Como ya se mencionó, el tamaño de las partículas de un aerosol monodisperso queda completamente definido considerando un parámetro simple: el diámetro de la partícula d_p.

Sin embargo, la mayoría de los aerosoles son polidispersos y tienen tamaños de partículas sobre un rango de dos o más órdenes de magnitud. Lo ancho del rango y el hecho de que las propiedades físicas del aerosol dependan fuertemente del tamaño de la partícula, hace necesario caracterizar, de manera exacta, esta distribución por tamaños.

1.5.1 PROPIEDADES DE LA FUNCION DE DISTRIBUCION POR TAMAÑOS DE PARTICULAS.

Cuando se muestrean particulas del aerosol atmosférico y se analiza el tamaño de las partículas, se encuentra que éste abarca varios órdenes de magnitud; entonces, se hace necesario clasificar las partículas de acuerdo a su tamaño y así estudiar sus propiedades.

El primer paso es dividir el rango entero de tamaños sucesivos y determinar el número de partículas en cada intervalo. Gráficamente estamos construyendo un histograma donde el ancho de los rectángulos representa el tamaño del intervalo y la altura el número de partículas en cada uno de éstos. El histograma es normalizado, Así, el área de cada rectángulo es proporcional al número de partículas en el rango de tamaño y el área total de todos los rectángulos es el número total de partículas en la muestra.

Finalmente, usando un gran número de rectángulos y dibujando una curva suavizada sobre el tope de cada rectángulo obtenemos una distribución por tamaños de las partículas, la cual es una representación gráfica de la función de frecuencias o función de densidad de probabilidad, como lo muestra la figura 1.7.

Así, la fracción df del número total de partículas que tienen diámetros entre dp y dp + ddp es

$$df = f(d_p)dd_p \tag{1.4}$$

donde $f(d_p)$ es la función de distribución de los diámetros y dd_p es un intervalo diferencial del diámetro de las partículas.

El área bajo la curva mostrada en la fig. 1.7 es

$$\int_{0}^{\infty} f(d_p) dd_p = 1$$
 (1.5)

El área bajo la curva de la función de distribución de frecuencias entre los tamaños a y b es igual a la fracción de partículas cuyos diámetros caen dentro de este intervalo. Matemáticamente esto se expresa como

$$f_{ab} = \int_{a}^{b} f(d_{p}) dd_{p}$$
(1.6)

La función de frecuencias esta relacionada a la función de frecuencias acumulativa F (dp) la cual se define por



Figura 1.7 Curva de distribución de frecuencias. De Hinds, 1982.

$$F(s) = \int_{0}^{t} f(d_{p}) dd_{p} \qquad (1.7)$$

Esta función da la fracción de partículas que tienen diámetro menor a s. La fig. 1.8 muestra la función de distribución acumulativa F(s) correspondiente a la función de la figura 1.7.

Una función de distribución acumulativa equivalente puede construirse considerando el número de partículas mayores o menores que un tamaño particular. Las gráficas de las funciones acumuladas para Número, Superficie, o Volumen "mayores que" son útiles para determinar tamaños críticos, por ejemplo, el tamaño crítico para la condensación se determina del tamaño al cual el "número mayor que" es igual al conteo de los núcleos de condensación de la nube.

Los parámetros más comúnes usados para definir la colocación de una distribución son: la media, la moda, la mediana y la media geométrica, así como su desviación estándar.



Figura 1.8 Función de distribución acumulativa.

La función de distribución de frecuencias puede extenderse de manera análoga para describir la distribución de masa, superficie, volumen o velocidad de las partículas.

Un análisis teórico del comportamiento de las partículas parte de considerar la dinámica de su función de distribución por tamaños y sus momentos integrales. Esta distribución puede tomar dos formas: la primera es una función discreta en la cual el tamaño de las partículas es múltiplo de una especie singular. Físicamente la distribución de tamaños discreta es de interés ya que describe la naturaleza de la partícula. La segunda función es la distribución continua, la cual es más útil en la práctica. Esta función es definida en términos de la diferencial dN, que es igual al número de partículas por unidad de volumen de un gas en un punto P en el espacio a un tiempo t en el rango de partículas con volumen v+dv. La función de distribución es

$$dN = n_{v}(P,R,t_{v})dv \tag{1.8}$$

Aunque esta forma puede explicar la distribución de partículas de forma arbitraria, la teoría se ha desarrollado sólo para esferas, en cuyo caso uno puede definir la función de distribución en términos del radio R (o diámetro) de la partícula.

$$dN = n_R(P, R, t)dR \tag{1.9}$$

donde dN es la concentración de partículas en el rango de tamaños R+dR, n_R es la función de distribución en términos del radio. El radio R puede ser el geométrico o puede usarse el diámetro equivalente.

Las dos funciones de distribución anteriores no son iguales pero se pueden relacionar (Friedlander, 1977) por

$$n_R = 2\pi R^2 n \tag{1.10}$$

Los momentos de la función de distribución de tamaños son parámetros muy útiles, su función generadora tiene la forma siguiente

$$\mathcal{M}(\mathbf{P}, \mathbf{t}) = \int_{0}^{\infty} n_{R} R^{o} dR \qquad (1.11)$$

El momento cero (v = 0)

$$\mathcal{M}_{0} = \int_{0}^{\infty} n_{R} dR = N \tag{1.12}$$

representa el número total de la concentración numérica de partículas en un punto dado, a un tiempo dado. El primer momento normalizado entre el momento cero da el radio promedio \overline{R} de las partículas.

$$M_1 / M_0 = \bar{R} = \int_{0}^{\infty} n_R R dR / \int_{0}^{\infty} n_R dR$$
 (1.13)

El segundo momento da el área o superficie de la nube del aerosol

$$S = 4\pi M_2 = 4\pi \int_{0}^{\infty} n_R R^2 dR \qquad (1.14)$$

El radio medio para la superficie es $\overline{R} = M_1 / 4\pi M_2$.

El tercer momento es proporcional al volumen total de partículas,

$$V = \frac{4}{3}\pi M_3 = \frac{4}{3}\pi \int_0^\infty n_R R^3 dR \qquad (1.15)$$

donde V es la fracción volumétrica de partículas en un cm³ de material por cada cm³ de gas. Si la densidad de la partícula es uniforme el volumen promedio de la partícula es

$$\overline{v} = V/N = 4 \pi M_3 / 3 M_0;$$
 (1.16)

el radio medio para este volumen es \overline{R} = 3 M_1 / 4 πM_3 .

1.5.2 ALGUNAS DISTRIBUCIONES APLICADAS EN LA DESCRIPCION DE LA DISTRIBUCION DE TAMAÑOS DE PARTICULAS DEL AEROSOL ATMOSFERICO.

Idealmente una función o combinación de funciones debe de tener las siguientes características para ser considerada como modelo para representar una función de distribución de tamaños de partículas.

1) Debe de fijar la distribución sobre el rango completo de tamaños 0.003 - 100 μm para el aerosol atmosférico.

2) Las distribuciones de número, superficie, volumen y masa deben fijarse de buena manera. Para que esto se logre, la forma de la distribución debe de ser independiente de los pesos.

3) La función debe de tener alguna base física.

La distribución de tamaños de partículas se puede fijar a una variedad de formas matemáticas.

Aquí mencionaremos tres distribuciones de frecuencia que se han usado comúnmente para describir la distribución de tamaños de partículas del aerosol atmoférico: La distribución lognormal (Aitchinson and Brown, 1957), la de Weibull (Rosin and Rammler, 1933) y la Ley de potencias (Johnson and Kotz, 1970).

A continuación se mencionarán importantes características físicas y matemáticas de estas distribuciones.

La función de distribución lognormal se ha seleccionado empíricamente para ajustar el amplio rango de la distribución por tamaños del aerosol. Aunque no existan bases teóricas para esta aplicación, se encuentra que en muchos casos la distribución lognormal se ajusta razonablemente a la distribución por tamaños observadas. Según Whitby (1978), la función podría tener alguna base física: de acuerdo al teorema del límite central, se puede mostrar que si la variable distribuida resulta de mecanismos de formación en los cuales el efecto es proporcional a la magnitud de la variable, entonces la distribución de la variable debe ser lognormal, como los mecanismos que gobiernan las modas de nucleación y de acumulación, de

coagulación y de condensación, son funciones del tamaño alcanzado por las partículas entonces ésta podría ser la razón de que la distribución lognormal se fije de buena manera a las distribuciones por tamaño de partículas atmosféricas.

Otras características importantes de la distribución lognormal son las siguientes: se puede fijar sobre el rango completo de tamaños del aerosol atmosférico (0.003-100 µm) y tanto las distribuciones por número, como por superficie, volumen y masa se pueden fijar también de buena manera, i.e. la forma de la distribución lognormal es independiente de los pesos.

La función de densidad de probabilidad para la distribución lognormal esta dada por

$$f(x)dx = (1/x\sigma\sqrt{2\pi})\exp\left\{\frac{-[(\ln x) - \mu]^2}{2\sigma^2}\right\}dx$$
 (1.17)

donde σ y μ son constantes que representan la media y la desviación estándar de la distribución, respectivamente.

Si se introduce una variable χ en lugar de ln x (esto es $\chi \equiv \ln x$ y d $\chi \equiv dx/x$) entonces la distribución lognormal en x se transforma en una distribución normal en χ :

$$f(\chi)d\chi = (1/\sigma\sqrt{2\pi})\exp\left[\frac{-(\chi-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]d\chi \qquad (1.18)$$

La función de distribución lognormal acumulada para todos los valores menores a x es,

$$F_{cx} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} erf\left(\frac{\ln x - \mu}{2^{1/2}\sigma}\right)$$
(1.19)

donde *erf* es la función de error. La distribución numérica de partículas

$$dN = (\hat{A} \cdot / R^4) \exp\left[\frac{-(\ln R - \mu)^2}{2\sigma^2}\right] dR$$
(1.20)

donde \hat{A} es una constante.

Distribución de Weibull.

La función de distribución de probabilidad de Weibull está dada por

$$f(x)dx = cm(x - x')^{m-1}exp[-c(x - x')^{m}]dx \qquad (1.21)$$

donde c, m y y son constantes positivas y x > x

La función de distribución acumulada de f(x) para todos los tamaños menores que x es

$$F_{cx} = 1 - \exp[-c(x - x')^m]$$
(1.22)

Esta función de distribución tiene aplicaciones en el estudio de partículas finas, de materiales naturales y hechos por el hombre y en la formación de cristales en soluciones.

Dependiendo de los valores de los parámetros c y m en la distribución de Weibull ésta puede asemejarse a la distribución lognormal con ciertos valores de μ y σ . Esto significa que ciertas distribuciones de tamaños de partículas pueden fijarse, satisfactoriamente, tanto con la función de distribución lognormal como con la distribución de Weibull, sobre un rango de R.

Ley de potencias.

La función de densidad de probabilidad

$$f(x)dx = \gamma c^{\gamma} x^{-(\gamma+1)} dx,$$
 (1.23)

donde γ y c son constantes positivas x > c es conocida como la distribución de ley de potencias o de Pareto.

La función de distribución acumulada para todos los valores menores a x es

$$F_{$$

La función de Pareto para la distribución numérica de partículas dN puede escribirse como

$$dN = \tilde{A}R^{-r}dR \tag{1.25}$$

donde R es una dimensión lineal de la partícula y \tilde{A} es una constante dimensional. El número acumulado de partículas N_{>R} de radios mayores que R es

$$N_{>R} = \int_{R=R}^{R=\infty} dN = \frac{\tilde{A}}{\gamma - 1} R^{-(\gamma - 1)}$$
(1.26)

para r>1. La relación

$$\frac{dN}{dR} = \lambda R^{-r} \tag{1.27}$$

se usa para representar la tendencia general de una distribución de tamaños de partículas. Desviaciones de una línea recta en una gráfica log-log o la presencia de dos o más segmentos cada uno teniendo diferentes valores de la pendiente y pueden interpretarse como un indicador de que en tal proceso hay un crecimiento por evaporación, coagulación o mezclado de partículas de diferentes fuentes.

El número de diferentes fenómenos naturales los cuales pueden aproximarse por una relación de ley de potencias es grande (U.S. GSA, 1988; Mandelbrot, 1977). Partículas de tamaño micrónico y submicrónico en el aerosol atmosférico y estratosferico, sedimentos de grano fino, material suspendido en el océano, etc., obedecen esta ley.

Un resumen de las expresiones matemáticas y otros parámetros estadísticos de las funciones de distribución mencionadas anteriormente se dan en la tabla 1.5.

Por muchos años los trabajos centrados en la distribución de tamaños de partículas mostraron una aparente uniformidad, pero con el advenimiento de nuevos métodos y la combinación de nuevos instrumentos se pudo medir en un rango más ancho de tamaños, encontrándose ciertas regularidades en las distribuciones de área y volumen, las cuales no se mostraban en las gráficas de la distribución numérica de tamaños (Hidy, 1984).

Función	Rango de x y constantes	Media	Mediana	Moda
Lognormal	$0 < x < \infty$ $\mu > 0, \sigma^2 > 0$	e ^{#+ σ²/2}	e ^µ	e ^{µ- σ²}
Weibuli	$\gamma \leq x < \infty$ $m > 0, c > 0$	$\Gamma\left(1+\frac{1}{m}\right)$	$\left(\frac{\ln 2}{c}\right)^{1/m} + x^{n}$	$\frac{1}{c} \left(1 - \frac{1}{m} \right)^{Vm} + x^{*}$
Ley de potencias	$c \le x < \infty$ $\gamma > 0, c > 0$	$\frac{\gamma c}{\gamma - 1}$	2 ^{1,k} c	с

Tabla 1.5 Media, mediana y moda de las distribuciones de frecuencia (funciones de densidad de probabilidad) discutidas en el texto

Las distribuciones de tamaños de partículas ahora se reportan e interpretan en términos de funciones de distribución multimodales o trimodales.

Los trabajos de Whitby y colegas (Whitby 1978) enfatizaron las formas de la distribución del área y del volumen de las partículas del aerosol. Las distribuciones

medidas pueden ajustarse a funciones lognormales de manera aditiva, la figura 1.9 muestra una distribución numérica fijada en términos de tres funciones lognormales. Las modas se distinguen claramente unas de otras por la fuente de las partículas así como por su origen químico.

En sitios rurales o ciudades remotas se encuentra una situación con una moda simple y pequeña en el rango submicrónico. Si las fuentes locales de polvo o "spray" marino están presentes se observa una moda de partículas mayores en el mismo rango submicronico.

En sitios localizados cerca de fuentes de combustión tales como autopistas y grandes avenidas, se emiten un gran número de partículas pequeñas. Whitby (1978) ha llamado a la fracción submicrónica, entre 0.1 µm y 1.0 µm de diámetro, la moda de acumulación.

Aquí el crecimiento de partículas por condensación o coagulación tiende a acumularse, ya que este rango tiene un mínimo durante procesos estacionales, incluyendo deposición difusional e inercial, deposición en superficies turbulentas y electroforesis.

Aquí el crecimiento de partículas por condensación o coagulación tiende a acumularse, ya que este rango tiene un mínimo durante procesos estacionales, incluyendo deposición difusional e inercial, deposición en superficies turbulentas y electroforesis.

La moda de nucleación se designa para partículas menores a 0.1 µm de diámetro y la moda gruesa se identifica con partículas mayores a 1.0 µm de diámetro.

El rango de acumulación puede crecer o disminuir con procesos independientes de las otras modas. Las tres modas pueden originarse y comportarse casi independientemente.



Figura 1.9 Distribución numérica promedio del aerosol urbano. Modificada de Hidy (1984)

CAPITULO 2

METODO DE ANALISIS

2.1 SITIO DE MUESTREO

Este trabajo está basado en datos de distribuciones de tamaños de partículas, registrados en el Observatorio de Radiación Solar del Instituto de Geofísica de la Universidad Nacional Autónoma de México, en la zona de Ciudad Universitaria, sitio localizado a una latitud de 19º 20' N y a una longitud de 99º 11' W a, aproximadamente, 2200 msnm y ubicado en la zona suroeste del Valle de México (figura 2.1). Por un lado, la zona presenta características urbanas con construciones de uso habitacional pero, por el otro, a escasos 400 m, se encuentra la terminal del metro Universidad, con el consecuente tráfico de vehículos; aunado a esto, frente al edificio corre el circuito exterior, con circulación moderada pero continua, contrastando con las áreas verdes y arboladas que se encuentran alrededor.

2.2 BASE DE DATOS

El período estudiado abarca del año 1985 al año de 1995; sin embargo, como se muestra en la tabla 2.1, existen meses en los que no se cuenta con registros. Se conjuntó información de 113 meses que corresponden a un 86% del total. Cabe hacer notar que noviembre fue el mes del que menos información se dispuso, sólo se tienen registros de seis años, constituyendo un 55%.

La mayoría de los datos que corresponden a los años de 1985 a 1988 se encontraban en hojas de registros, a partir de 1988 se automatizó la adquisición de datos, por lo que se pudo disponer de la información en disquettes.

El instrumento utilizado es un analizador eléctrico de aerosoles TSI modelo 3030, el cual se describe abajo.

El aire es muestreado a una altura de 3 m sobre el nivel del suelo a través de una manguera forrada de tefión de 4 m de longitud.



Figura 2.1 Mapa del Distrito Federal, mostrando el sitio de observación.

La mayoría de los registros son mediciones que se realizaron cada dos horas entre las 7 y 17 hrs, de lunes a viernes.

.

Este contador registra concentraciones numéricas de partículas en el rango de 0.003 µm a 1 µm de diámetro, dicho rango se divide en 11 intervalos (canales)

definidos por 11 radios límite: 0.0032, 0.0056, 0.0100, 0.0178, 0.0316, 0.0562, 0.1, 0.178, 0.316, 0.562 y 1 μ m. El instrumento realiza cinco mediciones por cada radio, en este intervalo.

				Α	Ň	0	S				
	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95
ENE	9	8	Ø		6		4		6		a
FEB	1	đ	1			B	9				I
MAR	1	8	Ø	9	I	B			8		a
ABR	Ø	Î	4	4	E	8		19		B	8
MAY	Î	đ	Ø	8		8				A	
JUN	8	6	ß	8	6						
JUL	đ	đ	Ø					12			
AGO	Ø	4	Ø			8					
SEP	ß	f	Ø		8	9					8
ОСТ	Ø	Ø	4		a	4		8			
NOV	9	\$	4	4	8	8		8		I	
DIÇ	\$	6	10	4	B	4	8	8			10

Tabla 2.1. Registros del analizador eléctrico de partículas durante el período 1985-1995.

f Información disponible en hojas de registro

Información disponible en disco

No se encontraron registros

2.3 INSTRUMENTO

El analizador eléctrico de aerosoles EAA (electrical aerosol analyzer), Modelo-3030, Thermo System Inc, fue el utilizado en este trabajo. Este analizador es capaz de medir *in situ* distribuciones de tamaño entre 0.003 y 1 µm de diámetro. Las ventajas que presenta este analizador son: que míde distribuciones de tamaño de manera rápida, su uso es portatil y es útil en lugares donde las partículas son muy pequeñas, muy volátiles o de muy baja concentración.

El instrumento consiste de tres partes principales: el cargador de aerosoles, el precipitador de partículas y el sensor de corriente eléctrica, junto con la electrónica asociada y el controlador de flujo, las cuales se muestran en la figura 2.2.

El instrumento muestrea aerosoles a razón de 5 lpm. Un volumen adicional de aire de 45 lpm es necesario para el analizador de movilidad, haciendo un total de 50 lpm.



Figura 2.2 Diagrama esquemático del Analizador de Aerosoles Eléctrico

El aerosol es, primero, muestreado dentro del cargador del aerosol para exponer las partículas a iones positivos unipolares, producidos por una corona de descarga. El aerosol cargado entra entonces al analizador de movilidad, compuesto por el precipitador y el electrómetro. La distribución de movilidad es medida, de lo cual se infiere la distribución de tamaños de las partículas. Para medir la distribución de tamaños del aerosol a partir de su movilidad eléctrica la relación funcional entre la movilidad eléctrica y el tamaño de la partícula debe de ser monótona (Whitby and Clark, 1966), lo cual se cumple para partículas menores a 1 µm de diámetro.

Cargador de Aerosoles.- De acuerdo a la figura 2.2, los iones positivos son producidos por una corona de descarga formada por un alambre de tugsteno, puesto a un alto potencial positivo. La región de alta intensidad del campo eléctrico en la

zona de la corona de descarga está separada de la región del aerosol cargado por una pantalla metálica B y los iones son atraídos a la región cargada poniendo la placa C a un potencial negativo en relación a la pantalla B. El aerosol se introduce en un canal E a través de la cabeza distribuidora D pasando por la placa F para obtener un perfil de velocidades laminar uniforme. Como el aerosol pasa a través de la región de carga entre B y C, las partículas son expuestas a los iones positivos y se cargan eléctricamente, luego de lo cual entran al precipitador.

La carga adquirida por una partícula de cierto tamaño, queda determinada por la concentración de iones N (iones/ cm³) y el tiempo de residencia t (seg) de la partícula en la región de carga.

Analizador de Movilidad.- El precipitador y el sensor de corriente eléctrica, juntos, funcionan como un analizador de movilidad eléctrica. El precipitador tiene forma de un condensador de flujo con electrodos cilíndricos concéntricos. La barra colectora está colocada en un soporte aislado y centrada, cuidadosamente, en un tubo.

El aerosol cargado se introduce en el precipitador a través de una abertura en el tubo y fluye bajo la región de precipitación en forma de una funda anular alrededor de un núcleo de partículas líbres, en un flujo laminar.

En el precipitador, las partículas cargadas son deflectadas por el campo eléctrico hacía la barra colectora. Las partículas con una movilidad eléctrica suficientemente alta son precipitadas y aquéllas con movilidades bajas escapan de la colección y son registradas por el electrómetro. Variando el voltaje de precipitación y mídiendo la corriente correspondiente con un electrómetro se puede determinar la distribución de movilidad.

Un filtro en el sensor electrómetro remueve las partículas cargadas de la corriente de aire. El filtro esta colocado en un aislante de teflón con una cubierta de aluminio, encerrado y conectado a la entrada de un amplificador operacional.

Calibración.- El instrumento recibe mantenimiento periódicamente, de acuerdo a las recomendaciones del fabricante, para mantener las condiciones de calibración dadas de origen (TSI, 1980), estas condiciones son en cuanto a flujo total, corriente de ionización, flujo del aerosol, etc.

2.4 METODO TEORICO

Para el cálculo de los coeficientes de extinción, esparcimiento y absorción se usa básicamente la teoría de esparcimiento de Mie, la cual se desarrolla en el apendice A. El método consiste en encontrar la solución de la ecuación de Maxwell, la cual describe el campo proveniente de una onda plana monocromática incidiendo sobre una superficie esférica a través de la cual las propiedades del medio cambian abruptamente. Un sistema apropiado de coordenadas curvilíneas (coordenadas polares esféricas) se introduce y el campo es representado como la suma de dos *subcampos:* uno de los subcampos es tal que su vector eléctrico no tiene componente radial mientras que el otro tiene un vector magnético con esta propiedad. En coordenadas polares esféricas la ecuación de Maxwell junto con las condiciones de frontera forman un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias las cuales se resuelven, para los dos subcampos, en la forma de series infinitas.

Así, el patrón de dispersión es descrito en términos de dos funciones $S_1(\theta)$ y y $S_2(\theta)$, llamadas funciones de amplitud, las cuales describen el patrón de dispersión como una función del ángulo de dispersión θ . Las expresiones para estas funciones se dan en la ec. A.71 del apéndice A. $S_1(\theta)$ y $S_2(\theta)$ son funciones del índice refractivo complejo y del parámetro de tamaño x, y están en términos de a, y b, (ec. A.73, apéndice A), que son los coeficientes de dispersión de Mie, los cuales se usan para calcular, también, otros parametros ópticos.

3.4 REDUCCION DE DATOS Y CALCULO DE PARAMETROS OPTICOS.

Para la realización del trabajo lo primero que se hizo fue reunir la base de datos para el período 1985-1995. Para esto fue necesario capturar alguna de esta información y otra tuvo que ser retransmitida para darle un formato conveniente. Posteriormente, se construyeron archivos, en el paquete Excel, con la información para cada año. Para obtener la distribución de tamaños, así como las gráficas correspondientes, se redujeron los datos de acuerdo al manual del instrumento (TSI, 1980), en una PC 486 con memoria extendida, utilizando el mismo paquete Excel.

La tabla 2.2 muestra las operaciones y pasos necesarios para calcular las distribuciones de número, volumen y superficie para una muestra determinada de aerosol atmosférico. En particular, en esta tabla se presentan los datos muestreados en el Observatorio de Radiación Solar el día 2 de febrero de 1987 a las 10:18 de la mañana.

El rando de diámetros de las partículas se divide en un número finito de canales discretos y cada década de tamaños se divide en cuatro intervalos geométricos iguales. Así, la primera columna muestra el diámetro de la partícula en micras; un valor de 0.01 significa que el voltaje de la barra central es tal que todas las partículas de 0.01 µm de diámetro y por debajo son colectadas en el tubo analizador. Ya que el electrómetro mide la corriente en todas las partículas remanentes, la corriente medida representa la carga de todas las partículas mayores que 0.01 µm. La segunda columna muestra el diámetro medio de las partículas, representado por la diferencia de corrientes entre dos pasos sucesivos, por ejemplo, la corriente para 0.0100 µm menos la corriente para 0.0178 µm da la corriente total de partículas colectada entre estos tamaños o para un diámetro medio de 0.0133 um. Entre dos diámetros medios cualesquiera existen dos pasos sucesivos, o sea dos canales. El diámetro de las partículas es calculado con una precisión del 2%. La tercera columna es el factor de calibración para un rango de tamaños dado. Éste es el número de partículas representado por una corriente dada. El voltaje de la barra colectora (columna 4) se basa en valores experimentales para Nt =1X10⁸ (iones/cm³) (s). Existen 11 niveles de voltaies preseleccionados, lo que da los 11 canales u 11 radios; además de éstos, el aparato posee cuatro posiciones extra de chequeo, entre las que se encuentra la reiniciación para estabilizar el aparato. Como esto es automático, pudiera suceder que al comienzo de la siguiente corrida no se estabilizara completamente, por eso se eliminan las posiciones 1 y 2, sobre todo en áreas donde existen aerosoles de combustión fresca y aerosoles frescos generados fotoquímicamente.

Para calcular la distribución numérica, se calcula primero la diferencia en la corriente del electrómetro ΔI entre pasos adyacentes de voltaje. Cada registro horario tiene

D _{P+}	Dp	ΔΝ/ΔΙ	Voltaje Colector	I, 10 ⁻¹² amp	∆I, 10 ⁻¹² amp	$\Delta N/\Delta log D_p = \Delta N \times 4$	∆S/∆logD _p =∆S x 4	ΔV/Δlog D _p =ΔV x 4	∆N/N∆logD
0 0032	***************************************		21	0.896			······································		
0 0056			65	0.896					
	0.0075	9.52 X 10 ⁶			0.003	106800	19.9	0 024	1.765
0 0100			204	0.893					
	0.0133	4.17 X 10°			0 018	30840	17.1	0.379	0.510
0 0178			618	0.875					
	0.0237	1 67 X 10°			0 047	31470	55.5	0.219	0.520
0 0316			1273	0.828					
	0.0422	8 70 X 10 ⁴			0.054	18710	104.7	0.736	0.310
0 0562			2278	0.774					
	0 0750	4.44 X 10 ⁴			0.132	23480	415.07	5.18	0.388
0 100			3668	0.642					
	0.133	2 41 X 10 ⁴			0.202	19490	1083	24.01	0 322
0 178			5621	0.440					
	0.237	1 23 X 10⁴			0 165	8107	1431	56 5	0.140
0 316			7462	0 275					
	0 422	6.67 X 10 ³			0.089	2383	1333	93.8	0.040
0 562			9017	0.186					
	0 750	3 51 X 10 ³			0.058	811	1433	179	0.013
1 00			10065	0.128					
						N = 241280/4 =60522 8	S = 4458 2/4 = 1472.8	V = 180.4/4 ≐89.9	

Tabla 2.2 Cálculo de las distribuciones de número, superfície y volumen del aerosol, a partir de datos registrados por un EAA. *

*Muestra de datos obtenidos en el Observatorio de Radíación Solar del IGF de la UNAM, el día 2 de febrero de 1987 a las 10:18.

*Los datos en las columnas 1- 4 son constantes que se fijan para el instrumento especificado

cinco mediciones de la corriente por cada uno de los canales o radios medios, la cual representa la corriente total de partículas colectada entre dos tamaños. Estas diferencias son multiplicadas por la respectiva constante de conversión: $\Delta N/\Delta I$, para obtener la concentración numérica de partículas ΔN en cada canal, que es el número de partículas por centimetro cúbico. La constante de conversión es tomada como el reciproco de la sensibilidad del instrumento en el punto medio geométrico de cada canal individual.

Sabiendo que dlog r es igual a un valor constante de 0.25, se encuentra el valor de dN/dlog r, el cual representa la fracción de partículas en el diámetro correspondiente.

Sumando estas cantidades para cada radio y dividiendo entre 4 se obtiene la concentración total N de partículas por centímetro cúbico. De manera similar se obtienen las distribuciones dS/dlog r y dV/dlog r.

Así, se calcularon las distribuciones de tamaño numéricas, para cada uno de los registros horarios, por cada día del mes; posteriormente, se calculó una distribución de tamaños promedio mensual, a partir de la cual se construyeron las gráficas de log[dN/dlog r] vs log r, para cada uno de los meses de los diferentes años.

De la reducción de datos descrita arriba se obtienen histogramas como el de la figura 2.3, el cual representa los datos de la tabla 2.2. En este trabajo, como ya se menciono, estos datos son graficados utilizando el paquete Excel, presentando los resultados como curvas suavizadas.

De acuerdo a los diseñadores del instrumento (Liu, et al, 1974), la medición de la distribución de tamaños a partir de la movilidad eléctrica es tal que el tamaño de la partícula puede calcularse con una precisión del 3%.

La fracción de partículas (1 - f) perdidas en el cargador, precipitador y el tubo conector debido a espacios de carga y efectos de difusión, es un factor que está incluido en las constantes usadas en la reducción de los datos. Este factor de corrección se toma en cuenta en el cálculo de la constante multiplicativa $\Delta N/\Delta I$ (Liu, et al., 1974).


Figura 2.3 Histograma que representa los datos de la tabla 2.2.

Multiplicando por las constantes apropiadas, la desviación estándar en Δl puede traducirse a una desviación estándar en el número de partículas (Liu et al., 1974). En principio, la variabilidad en el número decrece con el tamaño.

La variabilidad en el número total calculado, de corrida a corrida, es del orden del 5 al 10 %. Promediando de 5 a 10 medidas individuales el error debido a la variabilidad en el número total viene a ser pequeño. Así, la precisión absoluta del EAA es buena (Liu et al., 1974; Liu and Pui, 1975).

Bajo las condiciones establecidas de corriente y voltaje, el EAA puede medir una concentración mínima de 5 partículas/cm³ (Liu and Pui, 1975).

El análisis basado en la teoría de Mie se realizó utilizando un programa computacional en lenguaje Fortran. Este programa calcula los coeficientes de extinción, de absorción y de esparcimiento.

Con el próposito de incluir partículas cuya efectividad óptica no sea despreciable, las distribuciones de tamaño obtenidas se extrapolaron en el rango de 1 a 10 μ m. La extrapolación se hizo usando una distribución de Junge de la forma f(r) = AR⁻⁴, con los coeficientes dados por lvlev et al.(1993).

También fue necesario utilizar un parámetro importante ya mencionado arriba: el índice de refracción. Dado que no se cuenta con un estudio que nos permita caracterizar la composición de las partículas del aerosol de la zona, se eligió un índice de refracción usado en otros estudios de sitios urbanos (Ivlev y Popova, 1973; Leyva et al., 1983; Tsay et al., 1991 y Wilson, 1994). El índice de refracción seleccionado fue igual a m = 1.53 - i0.01. Este índice de refracción se mantuvo constante tanto en su parte real como en su parte imaginaria, También se realizaron algunos cálculos con otros dos valores de m: m = 1.5 - i0.05 y m =1.65 - 10.005 (Leyva et al., 1983).

El intervalo de longitudes de onda estudiado fue de 0.3 a 1 μ m, ya que en este rango se encuentran las partículas ópticamente activas; los cálculos se realizaron en pasos sucesivos de 0.05 μ m. Dicho rango de variación puede considerarse típico del aerosol atmosférico y de su interacción con la radiación solar (Junge, 1963; Ivlev y Popova, 1973; Kondratyev y Pozdniakov, 1981).

En las gráficas correspondientes a la descripción de la visibilidad y del albedo de esparcimiento simple se presentan los resultados para un valor de $\lambda = 0.55 \ \mu m$.

Para el caso del albedo se hicieron los cálculos correspondientes de acuerdo a la ecuación (1.2).

Para el caso de la visibilidad se realizaron los cálculos de acuerdo a la ecuación (1.3).

CAPITULO 3

ANALISIS Y DISCUSION DE RESULTADOS

Se mencionarán, primeramente, los resultados obtenidos del análisis de la variación de la distribución por tamaños de las partículas del aerosol atmosférico.

El análisis está basado en las distribuciones por tamaños de las concentraciones numéricas promedios mensuales, las cuales son gráficas que representan la fracción de la concentración numérica de particulas, log[dN/dlog r], en función del logaritmo del tamaño de la particula, log r.

Se realizaron 113 gráficas, que representan la distribución por tamaños para cada uno de los meses de los años del período en cuestión; las gráficas de las figuras B1 a B11, en el apéndice B, muestran estas distribuciones por tamaños.

Una de las primeras observaciones que se desprende de estas gráficas es que las distribuciones por tamaños de las partículas del aerosot atmosférico presentan una distribución trimodal; este resultado fue consistente en todas las distribuciones correspondientes a cada uno de los meses estudiados. La gráfica de la figura 3.1 muestra este comportamiento típico. Esta gráfica corresponde al mes de diciembre de 1986. Se estimaron los niveles de confianza al 95% para cada una de las distribuciones por tamaño encontrando que éstos son más amplios en el primer canal, teniendo un mínimo en los canales intermedios y aumentando hacia los radios finales. En la gráfica de la figura 3.1 se representa, también, el comportamiento típico de los niveles de confianza al 95% de todas las distribuciones por tamaño estudiadas.

Otro hecho notorio, también persistente en todo el período estudiado, fue que estas modas siempre se encuentran localizadas en el intervalo de r entre 0.00375 y 0.0375 µm. De manera más precisa se puede decir que la ubicación de las modas

no cambia a lo largo del período observado, ya que éstas siempre se localizan en el mismo radio medio: la primera moda se localiza en el radio medio correspondiente a 0.00375 μ m; la segunda moda se localiza en el radio de 0.01185 μ m y la tercera moda se localiza en el radio correspondiente a 0.0375 μ m.

En la gráfica de la figura 3.2 de muestran las distribuciones encontradas en los estudios realizados por Husar et al. (1972); Whitby (1978); Mészáros (1977) y Renoux et al. (1977), para las ciudades de Los Angeles, Minnesota, Budapest y Brest, respectivamente, junto con una distribución típica encontrada en este trabajo, la cual corresponde al mes de marzo de 1992. Como se puede observar, la forma de todas estas distribuciones es trimodal aunque la ubicación de los radios medios correspondientes a dichas modas, así como la concentración numérica, son diferentes en todos los trabajos.

Dado que no se cuenta con estudios de seguimiento de los procesos de crecimiento y producción de partículas para este sitio, y mucho menos con estudios hechos de manera simultánea al muestreo de la distribución numérica de tamaños, así como tampoco se tiene un inventario de los principales componentes de estas partículas, no se puede dar una explicación adecuada y completa del comportamiento observado. Pero ya que las distribuciones aquí encontradas muestran un carácter trimodal similar al de otros estudios, a continuación se presenta cómo se explica este comportamiento en dichos trabajos. Obviamente, se necesitaría de los estudios de seguimiento ya mencionados para comprobar si nuestros resultados podrían explicarse de igual manera.

El intervalo en el que ocurren las modas es una medida de la edad del aerosol; particularmente, en este intervalo se detecta el aerosol producido recientemente, es decir, el que proviene de aquellos productos de combustión emanados de fuentes cercanas. En el caso de áreas urbanas, la mayoría de estas fuentes son los automóviles que circulan cerca de los sitios de observación, y las partículas producidas por procesos fotoquímicos. Ya se ha mencionado aquí que los productos de dicha combustión son: carbón elemental, SO^{*} y NH^{*}₄, principalmente. Se sabe (John et al., 1990) que una fracción significativa de los sulfatos permanece en la

atmósfera como un aerosol muy estable en este rango y que, prácticamente, todos los sulfatos en el aerosol atmosférico se encuentran en la formación de partículas finas. Así, podemos pensar que las partículas de aerosol detectadas en la mayoría de las áreas urbanas son aquéllas que provienen de productos de combustión que emanan los vehículos que circulan cerca del lugar de observación y las producidas fotoquímicamente.

La aparición de las primeras dos modas se explica por lo siguiente: casi todo el sulfato está en la primera moda; así, la conversión (gas-partícula) de SO₂ a aerosol domina el conteo en el rango de Aitken y, a través de la coagulación y condensación, la concentración en esta primera moda (Withby, 1978); otra de las características del SO₂ es que alcanza concentraciones más altas cuando se encuentra solo que cuando se encuentra mezclado. La concentración de SO₂ mezclado con hidrocarburos (HCs) y óxidos de nitrógeno (NO_x) no se incrementa mucho, permaneciendo en el máximo durante varias horas. Si la fotooxidación de los hidrocarburos contribuye a la mayoría de la masa en la condensación entonces el DGN de la distribución puede crecer. La interacción de HCs y NO produce NO₂, NO₃ y O₃ y otras reacciones intermedias en las cadenas fotoquímicas. La introducción de SO₂ hace que decrezca el diámetro medio sobre los sistemas HC-NO, la razón para esto puede relacionarse a la nucleación de partículas de SO₂ finamente divididas, reduciendo el diámetro medio y dando lugar a una primera moda (Hidy, 1984).

De igual manera en el aerosol producto de la combustión puede aparecer una segunda moda en partículas ultrafinas (Willeke y Brockmann, 1977).

En áreas urbanas, el diámetro medio en el que aparecen las modas depende de la concentración de los componentes (se sugiere que ésta es sólo una razón por la cual los diámetros medios en los que aparecen las modas en este trabajo no coinciden con los reportados en otros estudios). El hecho de que el tamaño al cual ocurren las modas sea constante obedece a un patrón de crecimiento por condensación (Husar et al., 1972) y, según Whitby et al. (1972), se podría especular que es un comportamiento típico de la emisión y coagulación de productos de combustión procedentes de automóviles.

La tabla 3.1 muestra la ubicación de los diámetros medios en los que se localizan las tres modas en éste y en otros trabajos mencionados, nínguno de los diámetros medios es referido como diámetro aerodinámico. Los diámetros reportados en los trabajos de Renoux y Whitby son DGN, encontrados a partir de fijar la distribución a tres distribuciones lognormales. También se muestra el rango de tamaños (diámetro) que se analizó en cada uno de los estudios así como los instrumentos utilizados. Los analizadores eléctricos de partículas mencionados en esta tabla son prototipos del modelo utilizado en el presente trabajo.

Tabla 3.1 Localización de los diámetros medios en los que aparecen las modas de la distribución de tamaños reportadas en este trabajo y en algunos otros estudíos.

		\overline{D} (µm) moda			
	1 ^a	2ª	3ª	Rango (µm)	Instrumentos
Éste trabajo	0.0075	0.023	0.075	0.0075-1	Analizador Eléctrico de Aerosoles
Husar ¹	0.018	0.060	0.13	0.0075-6.8	Analizador Eléctrico de Aerosoles, CNC ^a y OPC ^a
Mészáros ²	0.019	0.056	0.08	0.04-0.5	Fitro de Membrana
Renoux ³	0.0095	0.12	0.70	0.0085-0.8	Impactor Anderson y Filtro Nucleopore
Whitby ⁴	0.013	0.069	0.97	0.02-100	Analizador Eléctrico de Aerosoles y OPC

(1) Husar et al., (1972)

(2) Mészáros, (1977)

(3) Renoux et al., (1977)

(4) Whitby, (1978)

(a) Contador de núcleos de condensación

(b) Contador óptico de partículas

Otro de los resultados de este trabajo es que la primera moda siempre es dominante con relación a las otras dos modas, en todas las distribuciones mensuales, caso que también se muestra en las gráficas de las figuras B1 a B11. De acuerdo a otros estudios (Whitby, 1978) la moda dominante es la primera en sitios urbanos o cerca de éstos. Sin embargo, al estudiar algunas de las distribuciones de las mediciones horarias se pudo observar que, algunas veces, la segunda moda puede ser la dominante. La gráfica de la figura 3.3 muestra esta situación para el caso del día 28 de septiembre de 1992 a las 11:05 hrs, como ya se mencionó, esto sucede para horas tempranas o en ocaciones en que podemos considerar que el ambiente esta "limpio". Lo anterior concuerda con otros trabajos que dicen que para el aerosol de fondo la segunda moda domina la distribución (Withby, 1978).

De acuerdo a Mészáros (1977) este comportamiento se debe a que en esta situación el número de partículas pequeñas es bajo porque no existe el proceso de coagulación o éste es muy lento. En la atmósfera, la segunda moda es la más persistente de la distribución, debido a las características del SO₂.

Resumiendo, no hubo cambios en el número de modas encontradas ni en su posición; la única variación encontrada fue en la concentración numérica como se puede ver de las mismas gráficas de las figuras B1 a B11.

La gráfica de la figura 3.4 representa la concentración total de partículas correspondiente al período de 1985-1995. Se puede observar la gran variación que tiene la serie antes del año de 1989, así como la falta de datos en este período; cabe mencionar que, a partir de este año de 1989, se comenzó la automatización de los datos, reflejándose en una mayor continuídad y una menor variación. También, durante el período de 1985 a 1989 se puede ver una tendencia a la disminución en la abundancia de partículas. Después de 1989 la abundancia total de partículas se ha mantenido dentro de cierto intervalo, a excepción de los meses de abril y mayo de 1990 en el que la concentración aumentó notoriamente.

Particularmente, a partir de 1991 podríamos decir que la concentración numérica se ha estabilizado debido, principalmente, a que el sitio de observación cada vez se ha aislado más por la construcción de edificios y el crecimiento de los arboles de alrededor.

Las concentraciones totales de partículas observadas están en el intervalo de $6x \ 10^3 a \ 3 \ x \ 10^5 \ partículas/cm^3$. Estas concentraciones son del mismo orden y en algunas ocasiones menores a las reportadas en otros trabajos realizados en áreas urbanas (ver figura 3.2).

La mayoría de las concentraciones menores se observan en la época húmeda, cuando las precipitaciones son frecuentes; sin embargo, estas concentraciones menores también se pueden observar en meses en que se presentan vientos que arrastran las particulas fuera de la zona.

Se construyeron gráficas de distribuciones de superficie y volumen, como lo muestra la figura 3.5, la cual representa las distribuciones numérica, de superficie y de volumen, para el mes de septiembre de 1989. Las distribuciones de superficie son bimodales y las distribuciones de volumen son unimodales. Estos resultados coinciden con las distribuciones de superficie y volumen encontradas para un área urbana bajo la influencia de emisiones vehiculares; como se puede ver de estas gráficas, una gran cantidad de partículas en superficie o volumen aparecen en el rango de 0.1-1.0 μ m (Whitby, 1978 y Willeke y Whitby, 1975). Aunque aquí sólo se presentan estas distribuciones para un mes en particular, estas gráficas muestran el comportamiento típico observado en cada uno de los meses del período estudiado.

A continuación se presentarán los resultados de cómo las variaciones en las distribuciones por tamaños, presentadas anteriormente, han influenciado las características ópticas del aerosol atmosférico elegidas para este trabajo.

Siguiendo la teoría de Mie se calcularon los coeficientes de extinción, esparcimiento y absorción, tomando en cuenta las distribuciones por tamaños observadas.

La gráfica de la figura 3.6 muestra los coeficientes de extinción, esparcimiento y absorción en función de la longitud de onda para un índice de refracción $m \approx 1.53 - i0.01$, para el mes de mayo de 1985. Los tres índices muestran el típico decremento de los coeficientes con el incremento en la longitud de onda, ya que las partículas de aerosol en el rango de tamaños submicrónicos tienen un más alto esparcimiento y absorción para la luz azul que para la luz roja.

ر

La gráfica de la figura 3.7 muestra la variación del coeficiente de extinción σ_{ext} con la longitud de onda para un índice de refracción de m≠1.53 - i0.01, para el mes de febrero de los años 1985, 1990 y 1995. De aquí podemos apreciar la disminución que ha tenido este coeficiente a través del período en cuestión. Es de notar que, de un valor del coeficiente de extinción de 0.9 para el año de 1985, disminuye a un

valor de 0.5 en el año de 1995, debido a la disminución en la concentración numérica observada en la figura 3.4.

La gráfica de la figura 3.8 muestra la variación mensual del coeficiente de extinción para el año de 1995; en ésta, el coeficiente de extinción está en función de la longitud de onda. Como se puede observar, el rango de variación del coeficiente de extinción es muy claro (obsérvese la gráfica de la figura B11, la cual representa la distribución numérica de tamaños para este mismo año). En general, podemos decir que los meses con altas concentraciones numéricas tienen un coeficiente de extinción alto y que los meses con concentraciones numéricas bajas tienen un coeficiente de extinción bajo.

Los resultados presentados aquí confirman que el coeficiente de extinción, en el sitio de observación, es influenciado por efectos debidos a la distribución numérica de partículas. Aunque en este estudio no se consideró la influencia de las distribuciones de superficie y volumen, se sabe (Mézsáros, 1977 y Horvath, 1991) que estas distribuciones también regulan de manera significativa la extinción de la luz.

Los valores calculados en este trabajo para el coeficiente de extinción se encuentran en un intervalo de 0.2 a 0.9 km⁻¹. Algunos otros estudios, realizados en áreas urbanas, obtuvieron los siguientes valores: Leyva y Vasilyev (1996) reportan valores del coeficiente de extinción, para $\lambda = 0.5 \,\mu$ m, en un rango de 0.03 a 2 km⁻¹ y Ensor et al., (1972) (estudio simultáneo al de Husar et al.,(1972)) reporta, para $\lambda = 0.546 \,\mu$ m, valores de 0.07 a 1.2 km⁻¹. Cabe mencionar que estos trabajos han calculado o medido el coeficiente de extinción con metodologías diferentes a la realizada aguí.

A continuación se presentan los resultados obtenidos respecto al albedo de esparcimiento simple y a la visibilidad que fueron los otros dos parámetros ópticos calculados.

La figura 3.9 muestra la variación anual de los valores medios mensuales del albedo de esparcimiento simple durante el período estudiado, para m=1.53 - i0.01 y λ =0.55 µm. Las líneas punteadas representan el intervalo de confiabilidad a un 95%. Esta gráfica presenta un máximo en el mes de mayo y un mínimo en el mes de

septiembre. Sin embargo el intervalo de confianza en estos puntos se hace muy ancho, haciendo no significativo este resultado.

Los valores calculados para el albedo de esparcimiento simple se encuentran en el intervalo de 0.92 a 0.95 para $\lambda \approx 0.55 \,\mu\text{m}$ los cuales están dentro del rango de los reportados por otros trabajos, como Tsay(1991): 0.3 - 1.0; Ogren y Sheridan (1996): 0.88 -0.96 y Vasilyev et al. (1994): 0.4 - 0.9.

La diferencia con los resultados obtenidos por Vasilyev et al. (1994) posiblemente se deban a una extrapolación incorrecta de nuestros datos, lo cual se reflejaría en una sobreestimación de las partículas grandes, contraponiéndose al cálculo realizado por estos autores quienes usaron una forma de cálculo de w en la cual no se contempla las contribución por partículas grandes (> 1 µm).

Los cálculos realizados con los dos otros índices de refracción: m= 1.5 - i0.05 y m=1.65 - i0.005, mostraron no ser significativamente diferentes de los encontrados para m= 1.53 - i0.01, como se puede observar de la gráfica B12, donde se presentan la variación mensual del albedo de esparcimiento para el año de 1995 para los tres indices.

La variación anual de los valores medios mensuales de la visibilidad durante el período estudiado se muestra en la figura 3.10, en donde se aprecian dos máximos correspondientes a los meses de junio y septiembre, meses con precipitaciones muy frecuentes. Como en el caso de la figura 3.9, los niveles de confianza se hacen muy anchos en estos puntos.

Los valores calculados de visibilidad para m = 1.53-i0.01 y λ =0.55 μ m se encontraron entre 5 y 30 km.

Como se puede ver de las gráficas de las figuras 3.9 y 3.10, en el mes de mayo es cuando se observa una gran variación tanto del albedo de esparcimiento simple como en la visibilidad; esto puede explicarse porque éste fue un mes en que se encontraron altas concentraciones numéricas en la mayoria de los años del periodo estudiado. También, como ya se había mencionado anteriormente, la mayor concentración numérica encontrada en la primera moda sucede para el mes de mayo de 1985; este valor influencia, de manera significativa, los resultados del

cálculo de estos parámetros ópticos. Igualmente, el mes de septiembre presenta valores críticos en ambas gráficas, esto atribuíble a que septiembre fue un mes con concentraciones numéricas muy bajas, siendo esto mas notable en el año de 1987, como se puede ver de la figura B3.

Los resultados muestran que los datos de distribuciones de partículas analizados influencian de manera apreciable las características ópticas del aerosol atmosférico y que permiten hacer estimaciones representativas de estos parametros ópticos en la zona de estudio.

Las limitaciones de los resultados muestran la necesidad de un estudio integrado de seguimiento de las propiedades físicas y químicas del aerosol atmosférico, para caracterizarlo de una manera adecuada para, entre otras aplícaciones, evaluar sus características ópticas de una manera más precisa.

Igualmente se espera que la base de datos recopilada para este trabajo sirva de base para otros estudios más detallados o comparativos.



Figura 3.1 Gráfica de la distribución por tamaños para el mes de diciembre de 1986. Aquí se muestra los datos para un nivel de confianza del 95%.



Figura 3 2 Algunas distribuciones por tamaños para el aerosol urbano.



Figura 3.3 Distribución por tamaños para el día 28 de septiembre de 1992 a las 11:05 hrs, mostrando el dominio de la segunda moda sobre la distribución.



.

Figura 3.4 Abundancia total de partículas en número/ cm, durante el período de 1985 a 1995.



Figura 3.5 Distribuciones: a) numérica, b) de superficie y c) volumen, para el mes de septiembre de 1989.



• 1

Figura 3.6 Coeficientes de extinción, dispersión y absorción, para el mes de mayo de 1985, con m=1.53-i0.01.



Figura 3.7 Variación del coeficiente de extinción, Gext, respecto a la longitud de onda, para el mes de febrero de los años 1985, 1990 y 1995.



Figura 3.8 Variación mensual del coeficiente de extinción respecto a la longitud de onda, para el año de 1995 y para un índice de refracción m=1.53-i0.01.



Figura 3.9 Variación anual de los valores medios mensuales del albedo de dispersión simple, durante el período estudiado. Las líneas punteadas representan el intervalo de confiabilidad a un 95%.

ŝ



_

Figura 3.10 Variación anual de los valores medios mensuales de la visibilidad, durante el período de 1985 a 1995. Las líneas punteadas indican el intervalo de confiabilidad al 95%.

CONCLUSIONES

En este trabajo se presento un estudio de las variaciones en la distribución numérica por tamaños de partículas del aerosol atmosférico y de la influencia de estas variaciones sobre los coeficientes de extinción y esparcimiento y sobre el albedo de esparcimiento simple y la visibilidad. Este análisis se hizo a partir de mediciones realizadas en el Observatorio de Radiacion Solar del Instituto de Geofísica de la UNAM durante el período de 1985-1995.

Las conclusiones son las siguientes:

Las distribuciones por tamaños analizadas mostraron ser trimodales como regla general.

La localización de los radios medios no varió a lo largo del período estudiado.

Las concentraciones de partículas observadas son consistentes con las encontradas en zonas urbanas influenciadas por emisiones vehiculares, siendo del mismo orden o menores que las obtenidas en zonas altamente contaminadas, como la Cd. de Los Angeles.

La forma de la distribuciones y su comportamiento permiten especular que las partículas provienen del aerosol producido recientemente: es decir, el emanado como producto de combustión automotriz y el producido fotoquímicamente.

Se observó una gran variación y altas concentraciones al principio del período estudiado pero, a partir de 1990, estas concentraciones se han estabilizado en un rango definido; se sugiere que esto se debe al aislamiento que ha tenido el sitio de observación, por la construcción de edificios y el crecimiento de los árboles de alrededor.

Los valores encontrados para los coeficientes de extinción y esparcimiento muestran una dependencia apreciable de la concentración numérica observada a través del período. Dicha dependencia es más notoria en la variación del albedo de esparcimiento simple y en la visibilidad, en que se pudo observar que los meses más suceptibles a estos cambios fueron mayo y septiembre, meses caracterizados por una alta y una muy baja concentración numérica, respectivamente.

Los resultados presentados aquí confirman que la extinción de la luz en la atmósfera urbana está influenciada por efectos debidos a la distribución numérica de partículas.

Las limitaciones de los resultados muestran la importancia del seguimiento de estos estudios, los cuales necesitan ser complementados con observaciones de las propiedades químicas del aerosol atmosférico, no sólo en la zona mencionada, sino en el resto del Valle de México. Un estudio integral daría una caracterización más completa del aerosol para así evaluar de una manera más precisa su impacto en características ópticas tales como las presentadas aquí.

REFERENCIAS

Ackerman, Th. P. 1988. Aerosols in Climate Modeling. In Aerosol and Climate (P. V. Hobbs and M.P McCormick, Eds) A. Deepak Publishing, Hampton: Va. 98-132.

Aitchinson, J., and J. A. Brown. 1957. The Lognormal Distribución. Cambridge: Cambridge University Press. 176 pp.

Alvarez, L. W. 1987. Mass Extinctions Caused by Large Bolide Impacts, Physics Today. 40, 24-33.

Angström, A. 1961. Techniques of Determining Turbidity of the Atmosphere. Tellus. 13, 214-223.

Bach, W. 1984. Our Threatened Climate. Ways of Averting the CO₂ Problem Through Rational Energy Use. New Series V/4c2, Springer, Berlin, 1-116.

Báez, P. A., and Belmont, D. R. 1996. Niveles de Carbonilos en la Atmosféra de la Ciudad de México. Contaminación Atmosferica. L. García-Colín S. y J. Ruben Varela H. (compiladores). Colegio Nacional. 307-322.

Barfoot, K. M., Vargas-Aburto, C., McArthur, J. D., Jaidar, A., García-Santibañez, F. and Fuentes-Gea V. 1984. Multi-elemental Measurements of Air Particulate Pollution at a Site in Mexico City. Atmospheric Environment. **18**, 467-471.

Box, M. A., and Lo, S. 1976. Approximate Determination of Aerosol Size Distributions. Jour. Appl. Met. 15, 1068-1076.

Brain, J. D. 1977. Respiratory Defense Mechanisms. Environ. Health Perspect. 20, 113-121.

Briegleb, B. P. 1992. Longwave Band Model for Thermal Radiation in Climate Studies. J. Geophys. Res. 97, 11 475-11 485.

Changnon, S. A., Jr. 1980. Relationship Between Air Pollutants Emissions Patterns and Rainwater Acidity. Bull. Am. Meteorol. Soc. 61, 702.

Charlson, R. J., Lovelock, J. E., Andreae, M. O., and St. G. Warren. 1987 Organic Phytoplankton, Atmospheric Sulphur, Cloud Albedo and Climate. Nature, 326, 655-661.

Coakley, J. A., and Cess, R. D. 1985: Response of the NCAR Community Climate Model to the Radiative Forcing of Naturally Occurring Tropospheric Aerosol. J. Atmos. Sci., 42, 1677-1692.

Cooper, J. A., and Grant, L. D. 1995. Particulate Matter: Health and Regulatory Issues. International Conference, Air & Waste Management Assoc. Pittsburgh, PA. 156-170.

Deepack, A., and Gerber, A. E. 1983. Report of the Expert Meeting on Aerosols and their climatic effects. (WCP-55) WMO. Geneva, Switz. 172 pp.

Deirmendjian, D. 1969. Electromagnetic Scattering on Spherical Polydispersions. Elsevier, New York. 290 pp.

Eagan, R. C., Hobbs, P. V., and Radke, L.F. 1974. Measurements of Cloud Condentation Nuclei and Cloud Droptet Size Distribution. Jour. Appl. Met. 13, 553-557.

Ensor, D. S., Charlson, R. J., Ahlquist, N. C., Whitby, K. T., Husar, R. B., and Liu B. Y. H. 1972. Multiwavelenght Nephelometer Measurements in Los Angeles Smog Aerosol. 1. Comparison of Calculated and Measured light Scattering. In Aerosol and Atmospheric Chemistry. Ed. Hidy, G. M. Academic Press, New York. 315-324.

Fouquart, Y. Bonnel, B. Roquai M. C., Santer R., and Cerf, A. 1987. Observations of Saharan Aerosols: Results of ECLATS Field Experiment. Part I: Optical Thicknesses and Aerosol Size Distributions. Jour. Clim. and Apl. Met. 26, 28-37.

Friedlander, S. K. 1977. Smoke, Dust and Haze. Wiley, N.Y., 317 pp.

Friedlander, S. K., and Wang, C. S. 1966. The Self-preserving "Similarity" Transformation. J. Colloid Interface Sci. 22,126-132.

Fuchs, N. A. 1964. The Mechanics of Aerosol. Oxford. Pergamon. 289 pp.

Garnett, J. C. M. 1904. Difraction by a Conducting Sphere. Phil. Trans. Roy. Soc. 203, 385.

Hanel, G. 1987. Atmospheric Physics. Jaenicke R. Editor. Weinheim, Alemania. 137 pp.

Herman, B. M., and Browning, S. R. 1975. The Effects of Aerosol on the Earth-Atmosphere Albedo. J. Atmos. Sci. 32, 1430-1445.

Hidy, G. M., Mueller, P. K., and Tong, E. Y. 1978. Spatial and Temporal Distributions of Airborne Sulfate in Parts of the United States. Atmospheric Environment. **12**, 735-752.

Hidy, G. M. 1984. Aerosols, An Industrial and Environmental Science. Academic Press, Orlando, Florida. 774 pp.

Hinds, W. C.1982. Aerosol Technology. New York: Wiley. 424 pp.

Hobbs, P. V., Radke, L. F., and Shumway, S. E. 1970. Integrated Airbone Particles Preliminary Use in Atmospheric Aerosols. J. Atmos. Sci. 27, 81-92.

Hopke, P. K., Ramamurti, M., and Knutson, E. V. 1990. A Measurement System for Rn Decay Product Lung Deposition Based on Respiratory Models. Health Phys. 58, 291-295.

Horvath, H. 1991. Spectral Extinction Coefficients of Background Aerosols in Europe, North and South America: a Comparison. Atmospheric Environment. 25A, 725-732.

Husar, R. B., Whitby, K. T., and Liu, B. Y. H. 1972. Physical Mechanisms Governing the Dynamics of Los Angeles Smog Aerosol. In Aerosol and Atmospheric Chemistry. Hidy, G. M., Ed. Academic Press. New York. 271-284.

INEGI, Instituto Nacional de Estadística Geografía e Informatica. 1996.

Ivlev, L.S., and Popova, S. I. 1973. The Complex Refrative Indices of Substances in the Atmospheric Aerosol Dispersed Phase. Izv. Atmos. Oceanic. Phys., 9, 587-5907.

Ivlev, L. S., Korostina, O. M., Leyva, A., and Muhlia, A. 1993. Modeling of the Optical Characteristics of Near-ground Aerosol in the Region of Mexico in Dry and Moist Seasons. Atmos. Oceanic Opt. 6, 653-656.

Jaenicke, R. 1988. Aerosol Physics and Chemistry. Landolt-Börstein, Springer. Berlin, 391-457.

Jáuregui, E. 1983. Variaciones de Largo Período de la Visibilidad en la Ciudad de México. Geof. Int. 22, 251-275.

John, W, Wall, S. M. Ondo, J. L., and Winklmayr, W. 1990. Modes in the Size Distributions of Atmospheric Inorganic Aerosol. Atmospheric Environment. 24A, 2349-2359.

Johnson, N. L. and Kotz, S. 1970. Continous Univariate Distributions, Vol. 1. Boston, 231 pp.

Junge, C. E. 1963. Air chemistry and Radiactivity, Academic Press, N.Y. 382 pp.

Kondratyev, K. Y., and Pozdniakov, D. V. 1981. Modelos de Aerosoles Atmosféricos. Ed. Nauca, Moscú. (En Ruso). 104 pp. Leyva, A., Muhlia A., and Vasiliev O. B. 1983. Acerca del Cálculo de las Características del Campo de Radiación Dispersado por Partículas de Mie. Reporte No. 41 Instituto de Geofísica. 58 pp.

Leyva, A., and Vasilyev O. B. 1996. The Spectral and Angular Informative Ranges of the Aerosol Radiative Characteristic. Reportes Internos 96-31. Instituto de Geofísica, UNAM. 40 pp.

Liou, K. N. 1980. An Introduction to Atmospheric Radiation. Academic Press. London. 392 pp.

Lioy, P.J., Waldman, J. M., Bucley, T., Butler, J., and Pietarinen, C. 1990. The Personal, Indoor and Outdoor Concentration of PM₁₀ Measured in an Industrial Community During Winter. Atmospheric Environment. **24B**, 571-576.

Liu, B. Y. H., Whitby, K. T., and Pui, D. Y. H. 1974. A Portable Electrical Analyzer for Size Distribution Measurement of Submicron Aerosol. JAPCA. 24, 1067-1072.

Liu, B. Y. H., and Piu, D. Y. H. 1975. On the Performance of the Electrical Aerosol Analyzer. J. Aerosol Science. 6, 249-264.

Manabe, S., and Wetherald, R. T. 1975. The Effects of Doubling the CO₂ Concentration on the Climate of a General Circulation Model. J. Atmos. Sci. **32**, 3-15.

Mandelbrot, B. 1977. The Fractal Geometry of Nature, Freeman, New York. 523 pp.

Mészáros, A. 1977. On the Size Distribution of Atmospheric Arosol Particles of Different Composition. Atmospheric Environment. 11, 1075-1081

Middleton, W. E. K. 1968. Vision Trough the Atmosphere. Universidad de Toronto.

Mie, G. 1908. A Contribution to the Optics of Turbid Media, Especially Colloidal Metallic Suspensions. Ann. der Physik. 25, 377-445.

Miranda, J., Morales, J. R., Cahill, T. A., Aldape, F., and Flores, J. 1992. A Study of Elemental Contents in Atmospheric Aerosols in Mexico City. Atmosféra, **5**, 95-108.

Mitchell, J. M. 1982. El Chichon-Weather-Maker of the Century?, Weatherwise, 35, 252-262.

Monin, A. S. 1986. An Introduction to the Theory of Climate. Reidel, Dodrecht. 231 pp.

Montañez, R. A., and García-García, F. 1993. Some urban and meteorological effects on the production of cloud condensation nuclei in Mexico City. Atmósfera, 6, 39-49.

Muhlia, A., 1984. Un Método para la Determinación de los Parámetros de Distribución de Radios del Aerosol Atmosférico. Tesis de Maestria. UNAM. 89 pp.

Muhlia, A., Leyva, A., and Bravo, J. L. 1988. Actinometric Determination of the Total Number of Aerosol Particles in the Vertical Atmospheric Column. Geof. Int. 28, 47-71.

Muhlia, A. 1994. Turbiedad en la Atmósfera de la Ciudad de México. Geonoticias. Mayo, 1994, 11.

Oberdörster, G., Gelein, R. M., Ferin, J., and Weiss, B. 1995. Association of Particulate Air Pollution and Acute Mortality: Involvement of Ultrafine Particles?. Inhalation Toxicology. 7, 111-124.

Ogren, J. A., and Sheridan P. J. 1996. Vertical and Horizontal Variability of Aerosol Single Scattering Albedo and Hemispheric Bakcscatter Fraction over The United States, in Nucleation and Atmospheric Aerosol. Edit. Kulmak and Wagner. Pergamon Press. 780-783.

Oluwafemi, C. O. 1988. Particle Size Distribution, Turbidity, and Angular Scattering in the Harmattan Regime. Jour. Geo. Res. 93, 687-690.

Page, G. L., Elseewi, A. A., and Straughan, I. R. 1979. Residue Rev. 71, 83.

Pope, C. A. III, Dockery, B., and Schwartz, J. 1995. Review the Epidemiological Evidence of Health Effects of Particulate Air Pollution. Inhalation Toxicology. 7, 1-18.

Preining, O. 1989. Aerosol and Climate. In: Aerosol and Climate (Hobbs and McCormick, editores) A. Deepack Publishing, Hampton. Va. 10-17.

Rasool, S. I., and Schneider, S. H., 1971. Atmospheric Carbon Dioxide and Aerosols, Science. **173**, 138-141.

Renoux, A., Tymen, G., Butor, J. F., and Madelaine, G. 1977. Granulometric Spectrum of Aerosol Particles in Slightly-Polluted Seaside Atmosphere. Atmospheric Environment. **11**, 1127-1132.

Rood, M. J., Larson T. V., Covert, D. S., and Ahlquist, N. C. 1987. Hygroscopic Properties of Atmospheric Aerosol in Riverside, California. Tellus. **39B**, 383-397.

Rosin, P., and Rammler, E. 1933. Distribution of Fragments of Coal. J. Inst. Fuel. 7, 29-34.

Salazar, S. y Bravo, J. L. 1983. Sobre la Determinación de Compuestos Organicos en el Aerosol Atmosférico. Reporte Técnico No. 8. Instituto de Geofísica, UNAM. 17 pp.

Salazar, S. y Bravo, J. L. 1986. Sulfatos y Nitratos en Partículas Atmosféricas y su Relación con Algunos Parámetros Opticos. Geof. Int. 25, 455-469.

Salazar, S., Bravo, J. L., and Castellanos, M.A. 1989. Identificación de la Fracción Mineral del Aerosol Atmosférico en una Zona Urbana de la Ciudad de México por Medio de Difracción y Fluorescencia de Rayos-X. Atmósfera. 2, 103-110.

Sandberg, J. S., Levaggi, D. A., DeMandel, R. E., and Siu, W. 1976. Sulfate and Nitrate Particulates as Related to SO_2 and NO_x Gases and Emissions. JAPCA, 26, 559-564.

Schwartz, St. E. 1988. Are Global Could Albedo and Climate Controlled by Marine Phytoplakton?. Nature, 336, 441-445.

SEMARNAP, (Secretaría del Medio Ambiente, Recursos Naturales y Pesca). 1996. Contaminación Ambiental. Secretaria del Medio Ambiente, Recursos Naturales y Pesca. México. 42 pp.

Sokolik, I., and Golitsyn, G. 1993. Investigation of Optical and Radiative Properties of Atmospheric Dust Aerosols. Atmospheric Environment. 27A, 2509-2517.

Tanre, D., Geleyn, P., and Slingo, J., 1984. First Result of the Introduction of an Avanced Aerosol-Radiation Interaction in the ECMWF Low Resolution Global Model. In Aerosol and their Climatic Effects, Gerber and Deepak (eds), A. Deepak publishing, Hampton, Vir. 133-177.

Tsay, Si-C. Stephens L. G., and Greenwald T. J. 1991. An Investigation of Aerosol Microstructure on Visual Air Quality. Atmospheric Environment. **25A**, 1039-1053.

TSI. 1980. Operating and Service Manual: Model 3030 Electrical Aerosol Size Analizer. TSI Inc., St. Paul, MN. 36 pp.

Twomey, S. A. 1977. The Influence of Pollution on the Shortwave Albedo of Clouds, J. Atmos.Sci., **34**, 1149-1152.

Twomey, S. A., Piepgrass, M., and Wolfe, T. L. 1984. An Assessment of the Impact of Pollution on Global Cloud Albedo. Tellus, 36B, 356-366.

U.S. General Services Administration. 1988. Federal Standar 209D. Reprinted in J. Environ Sci. 31(5), 53-76.

Van de Hulst, H. C. 1957. Light Scattering by Small Particles. Wiley, New York. 469 pp.

Vasilyev, O. B., and Ivlev L. S. 1992. Influence of Aerosol on Radiation Tranfer: Possible Climatic Consequences. International Radiation Symposium. Abstracts I, 154.

Vasilyev, O. B., Andreev S. D., Lai, K., and Leyva A. 1993. Variations of the Outgoing Radiation Due to the Variability of the Properties of Atmospheric Aerosols. Atmósfera. 6, 215-222.

Vasilyev, O. B., and 8 others. 1994. Report on the Spectral Optical Properties of the Polluted Atmosphere of Mexico City (spring-summer 1992). Reporte interno 94-3 Instituto de Geofísica, UNAM. 90 pp.

Whitby, K. T., and Clark, W. E. 1966. Electrical Aerosol Particle Counting and Size Distribution Measuring System for the 0.015 a 1 μ size range. Tellus. **18**, 573.

Whitby, K. T., Husar, R., and Liu, B. Y. H. 1972. The Aerosol Size Distribution of Los Angeles Smog. In Aerosol and Atmospheric Chemistry. Ed. Hidy, G. M. Academic Press. New York. 237-264.

Whitby, K. T. 1978. The Physical Characteristic of Sulfur Aerosols. Atmospheric. Environment. 12, 135-159.

Willeke, K., and Whitby, K. T. 1975. Atmospheric Aerosol: Size Distribution Interpretation. JAPCA. 25, 529-534.

Willeke, K., and Brockmann J. 1977. Extinction Cofficients for Multimodal Atmospheric Particle Size Distribution. Atmospheric Environment, **11**, 995-999.

Wilson, W. E. 1994. A PC-Based Mie Scattering Program for Theorical Investigations of the Optical Properties of Atmospheric Aerosols as a Function of Composition and Relative Humidity. Atmospheric Environment. **28**, 803-809.

Yue, G. K., and Deepak, A. 1983. Retrieval of Stratospheric Aerosol Size Distribution from Atmospheric Extiction of Solar Radiation at Two Wavelenghts. Appl. Opt., 22, 1639-1645.

APENDICE

A. Teoría del esparcimiento de Mie.

Los fenómenos ópticos atmosféricos más interesantes se observan en partículas cuyas dimensiones son del mismo orden de la longitud de onda de la luz incidente es decir cuando el párametro de tamaño

$$x=\frac{2\pi a}{\lambda}\approx$$

donde a es el radio de la partícula y λ es la longitud de onda de la radiación incidente.

La solución del problema de la interacción onda partícula fue obtenida por Gustav Mie (Mie, 1908) al estudiar el problema del esparcimiento de la luz por partículas metálicas.

El problema se reduce a encontrar la solución de una ecuación vectorial de onda en coordenadas esféricas, para ondas electromagnéticas que satisfacen la ecuación de Maxwell; además, las soluciones, interior(dentro de la partícula) y exterior(en el medio que rodea a la partícula) deben satisfacer las condiciones de frontera en la interfase, el objetivo final es el cálculo del campo esparcido lejos del centro de esparcimiento, en la llamada zona ondulatoria.

La solución de Mie permite calcular los coeficientes de esparcimiento y absorción de la partícula, así como la intensidad del campo esparcido a diferentes ángulos con respecto a la dirección de propagación de la radiación incidente: función fase. Solución de Mie.

Concideremos un medio isotrópico y homogéneo de constante dieléctrica ε , permeabilidad magnética μ y conductividad σ . Definamos las siguientes ecuaciones

 $j = \sigma E$ $D = \varepsilon E$ $B = \mu H$

donde j, D y B son los vectores de densidad de corriente, de desplazamiento eléctrico y de inducción magnética, respectivamente, E y H son los vectores de tensión eléctrica y magnetica, respectivamente.

Con esto las ecuaciones de Maxwell toman la forma:

$$\nabla \times H - \frac{\varepsilon}{c} \frac{\epsilon}{E} = \frac{4\pi}{c} \alpha E \qquad (A.1)$$

$$divE = \frac{4\pi}{\varepsilon}\rho \qquad (A.2)$$

$$\nabla \times E + \frac{\mu}{c} \dot{H} = 0 \tag{A.3}$$

$$divH=0 \tag{A.4}$$

donde (*) significa la derivada con respecto al tiempo.

Es fácil demostrar que para una perturbación electromagnética que incida desde fuera sobre el conductor, (A.2) puede reemplazarse por divE = 0. Si tomamos la divergencia de (A.1) y usamos (A.2) obtenemos

$$\frac{\varepsilon}{c} div \dot{E} = \frac{4\pi\sigma}{c} \frac{4\pi}{\varepsilon} \rho$$

Derivando (A.2) con respecto al tiempo tenemos

$$div \dot{E} = \frac{4\pi}{\varepsilon} \dot{\rho}$$

Eliminando div É de las dos últimas ecuaciones se obtiene

$$\rho + \frac{4\pi\sigma}{\epsilon} \rho = 0 \qquad (A.5)$$

86 **A**

integrando resulta

$$\rho = \rho_0 exp(-t/\tau) \qquad (A.6)$$

donde

$$\tau = \frac{\varepsilon}{4\pi\sigma}$$

De aquí, se ve que cualquier densidad de carga decae exponencialmente con el tiempo. El tiempo de relajación τ es suficientemente pequeño para cualquier medio que tenga una conductividad apreciable, comparado con el período de la onda de luz, así que podemos suponer que, en un metal, es siempre practicamente igual a cero. De este modo la ec. (A.2) queda como

$$div E = 0 \tag{A.7}$$

Consideremos ahora una onda plana monocromática y linealmente polarizada; dicha onda incide sobre una esfera de radio a, inmersa en un medio homogéneo isotrópico, es decir, cuyas propiedades electromagnéticas no dependen de las coordenadas ni de la dirección. Definamos el medio en el cual la esfera esta inmersa como no-conductor y tanto la esfera como el medio, no magnéticos(µ=1)

Suponiendo, la dependencia en el tiempo como $exp(-i\omega t)$, donde ω es la frecuencia cíclica de la onda incidente y t el tiempo, la parte de los vectores eléctricos y magnético que no dependen del tiempo, tanto fuera como dentro de la esfera, satisfacen las ecuaciones siguientes:

$$abla \times H = -k_1 E$$
 (a)
(A.8)
 $abla \times E = k_1 H$ (b)

donde

$$k_{1} = \frac{i\omega}{c} (\varepsilon + i\frac{4\pi\sigma}{\omega}) \qquad (a)$$

$$(A.9)$$

$$k_{2} = \frac{i\omega}{c} \qquad (b)$$

el cuadrado del número de onda(real afuera y complejo dentro de la esfera) es:

$$k^2 = -k_1 k_2$$
 (A.10)

En adelante las cantidades que se refieren al medio circundante se denotarán por el superíndice I y las referentes a la esfera por el superíndice II. En particular, dado que el medio circundante es no-conductor: $\sigma^{(I)} = 0$

Tomaremos un sistema rectangular de coordenadas con origen en el centro de la esfera, con el eje z en la dirección de propagación de la onda incidente y el eje x en la dirección del vector eléctrico de la misma.

Si la amplitud del vector eléctrico de la onda incidente esta normalizada a la unidad, es decir,

$$\left|E^{(l)}\right| = \left|exp(ik^{(l)}z)\right| = 1$$

(el superíndice i designa a la onda incidente) entonces las seis componentes de los vectores del campo serán:

$$E_{x}^{(0)} = exp(ik^{(I)}z)$$

$$H_{y}^{(0)} = \frac{ik^{(I)}}{k_{2}^{(I)}}exp(ik^{(I)}z) \qquad (A.11)$$

$$E_{y}^{(0)} = E_{z}^{(0)} = H_{z}^{(0)} = H_{z}^{(0)} = 0$$

Las condiciones de frontera son tales que las componentes tangenciales de E y H son continuas sobre la superficie de la esfera(cuando r=a):

$$E_{tag}^{(I)} = E_{tag}^{(II)}$$
(A.12)
$$H_{tag}^{(I)} = H_{tag}^{(II)}$$

La condición de que las componentes radiales de E y H sean también continuas se infiere de lo anterior y de las ecuaciones de Maxwell.

Parà poder satisfacer las condiciones de frontera, debemos de suponer que aparte del campo incidente($E^{(0)}, H^{(0)}$) y del campo dentro de la esfera($E^{(w)}, H^{(w)}$), existe un campo secundario (esparcido o difractado) dado por los vectores $E^{(s)}$ y $H^{(s)}$ en el medio que rodea a la esfera, así el campo total de las dos regiones puede escribirse como:

$$E = E^{(i)} + E^{(s)}$$
afuera de la esfera

$$E = E^{(w)}$$
adentro de la esfera
(A.13)

con expressiones similares para el vector magnético. Los campos $E^{(r)}$, $H^{(r)}$, $E^{(w)}$ y $H^{(w)}$ pueden considerarse análogos a los campos reflejado y trasmitido cuando la propagación se realiza a través de una frontera plana, esta analogía es apropiada sólo cuando el diámetro de la esfera es grande comparado con la longitud de onda de la luz, ya que las condiciones de frontera deben de tener la misma dependencia en el tiempo: exp(-iwt).

La geometría apropiada al problema presente son las coordenadas polares esféricas(r, θ, ϕ) definidas como:

$$\begin{aligned} x &= r \, \mathrm{sen} \, \theta \, \mathrm{cos} \, \varphi \\ y &= r \, \mathrm{sen} \, \theta \, \mathrm{sen} \, \varphi \\ z &= r \, \mathrm{cos} \, \theta \end{aligned}$$
 (A. 14)

~

89 **A**
las componentes de un vector cualquiera, A son transformadas del sistema cartesiano a este nuevo sistema de acuerdo con la regla

$$A_{r} = A_{x} \operatorname{sen} \theta \cos \varphi + A_{y} \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \varphi + A_{z} \cos \theta,$$

$$A_{\theta} = A_{x} \cos \theta \cos \varphi + A_{y} \cos \theta \operatorname{sen} \varphi - A_{z} \operatorname{sen} \theta$$

$$A_{\phi} = A_{x} \operatorname{sen} \varphi + A_{y} \cos \varphi$$

(A.15)

-

- ---

Aplicando estas fórmulas al vector $\nabla \times A$ obtenemos:

.

$$(\nabla \times A)_{r} = \frac{1}{r^{2} \operatorname{sen} \theta} \left\{ \frac{\partial (rA_{\theta} \operatorname{sen} \theta)}{\partial \theta} - \frac{\partial (rA_{\theta})}{\partial \varphi} \right\},$$

$$(\nabla \times A)_{\theta} = \frac{1}{r \operatorname{sen} \theta} \left\{ \frac{\partial A_{r}}{\partial \phi} - \frac{\partial (rA_{\theta} \operatorname{sen} \theta)}{\partial r} \right\},$$

$$(\nabla \times A)_{\phi} = \frac{1}{r} \left\{ \frac{\partial (rA_{\theta})}{\partial r} - \frac{\partial A_{r}}{\partial \theta} \right\}.$$

(A.16)

Asi, en coordenadas polares esféricas, las ecuaciones de campo (A.8) se transforman en

$$-k_{1}E_{r} = \frac{1}{r^{2} \operatorname{sen}\theta} \left\{ \frac{\partial(rH_{\phi} \operatorname{sen}\theta)}{\partial\theta} - \frac{\partial(rH_{\theta})}{\partial\phi} \right\}, (\alpha)$$

$$-k_{1}E_{\theta} = \frac{1}{r \operatorname{sen}\theta} \left\{ \frac{\partial H_{r}}{\partial\phi} - \frac{\partial(rH_{\phi} \operatorname{sen}\theta)}{\partial\tau} \right\}, \quad (\beta)$$

$$-k_{1}E_{\phi} = \frac{1}{r} \left\{ \frac{\partial(rH_{\theta})}{\partial\tau} - \frac{\partial H_{r}}{\partial\theta} \right\}. \quad (\gamma)$$

$$k_{2}H_{r} = \frac{1}{r^{2} \operatorname{sen}\theta} \left\{ \frac{\partial(rE_{\phi} \operatorname{sen}\theta)}{\partial\theta} - \frac{\partial(rE_{\theta})}{\partial\phi} \right\}, (\alpha)$$

$$k_{2}H_{\theta} = \frac{1}{r \operatorname{sen}\theta} \left\{ \frac{\partial E_{r}}{\partial\phi} - \frac{\partial(rE_{\phi} \operatorname{sen}\theta)}{\partial\tau} \right\}, \quad (\beta)$$

$$k_{2}H_{\phi} = \frac{1}{r} \left\{ \frac{\partial(rE_{\theta})}{\partial\phi} - \frac{\partial E_{r}}{\partial\theta} \right\}. \quad (\gamma)$$

Ahora las condiciones de frontera (A.3) son:

$$E_{\theta}^{(I)} = E_{\theta}^{(II)}, E_{\phi}^{(I)} = E_{\phi}^{(II)}$$
para r=a (A.18)
$${}_{\theta}^{(0)} = H_{\theta}^{(II)}, H_{\phi}^{(I)} = H_{\phi}^{(II)}$$

Representaremos las soluciones de las ecuaciones (A.17) junto con las condiciones de frontera (A.18) como una superposición de dos campos linealmente independientes (*E,*H) y (*E,*H), cada uno satisfaciendo las ecuaciones (A.17) tal que:

$${}^{e}E_{r} = E_{r}, {}^{e}H_{r} = 0$$
 (A.19a)
 ${}^{m}E_{r} = 0, {}^{m}H_{r} = H_{r}$ (A.19b)

Con $H_r = {}^{*}H_r = 0$, las ecuaciones (A.17 a, β) y (A.17a, γ) llegan a ser

$$k_{1}^{*}E_{\theta} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r^{*}H_{\phi}),$$

$$k_{1}^{*}E_{\phi} = -\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r^{*}H_{\theta}).$$
(A.20)

Sustituyendo estas relaciones en $(A.17b,\beta)$ y $(A.17b,\gamma)$ obtenemos

$$\left(\frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} + k^{2}\right)(r^{*}H_{\theta}) = -\frac{k_{1}}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial \mathcal{E}_{r}}{\partial \theta} \quad (\mathbf{b},\beta)$$

$$\left(\frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} + k^{2}\right)(r^{*}H_{\theta}) = k_{1}\frac{\partial \mathcal{H}_{r}}{\partial \theta} \qquad (\mathbf{b},\gamma)$$

Estas ecuaciones junto con (A.17a, α) constituyen un sistema de ecuaciones para ${}^{*}E_{r}$, ${}^{*}H_{\theta}$ y ${}^{*}H_{\phi}$. Sin embargo, no todas las soluciones de este sistema representan campos físicos, sólo aquellas que satisfacen la condición $div{}^{*}H = 0$. En coordenadas polares esféricas y bajo la suposición de que ${}^{*}H_{r} = 0$, la condición anterior queda como

$$\frac{\partial}{\partial \theta}(\operatorname{sen}\theta^* H_{\theta}) + \frac{\partial}{\partial \phi}(^* H_{\phi}) = 0, \qquad (A.22)$$

y asegura que se satisfaga la ecuación (A.17b, α). Para (A.17b, α) llega a ser en sustitución de (A.20)

$$\frac{1}{k^2 r^2 \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} (r \operatorname{sen} \theta' H_{\theta}) + \frac{\partial}{\partial \phi} (r' H_{\phi}) \right],$$

y debido a (A.22) ésta es identicamente satisfecha.

Consideraciones similares se aplican al caso complementario con ${}^{m}E_{r} = 0$.

La solución con campo magnético radial desaparecido es llamada la onda eléctrica(u onda magnética transversal) y aquella con campo eléctrico desaparecido es llamada la onda magnética(u onda eléctrica transversal). Se demostrará ahora que cada una de ellas puede derivarse de un potencial escalar 'Π y "Π, respectivamente, los cuales son conocidos como los potenciales de Debye.

Ya que ' $H_r = 0$, entonces de (A.17b, α) se tiene que ' E_{ϕ} y ' H_{θ} pueden representarse en términos del gradiente de un escalar:

$${}^{*}E_{\phi} = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial U}{\partial \phi}, \quad {}^{*}E_{\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial \theta}$$
(A.23)

Definiendo U tal que

$$=\frac{\partial(r'\Pi)}{\partial r} \tag{A.24}$$

entonces tenemos de (A.23)

$${}^{*}E_{\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial^{2}(r^{*}\Pi)}{\partial r \partial \theta}, \qquad {}^{*}E_{\phi} = \frac{1}{r \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial^{2}(r^{*}\Pi)}{\partial r \partial \phi}$$
(A.25)

La ec. (A.20) puede ser satisfecha por

$${}^{e}H_{\phi} = k_{1}\frac{\partial^{e}\Pi}{\partial \theta} = \frac{k_{1}}{r}\frac{\partial(r^{e}\Pi)}{\partial \theta}$$

$${}^{e}H_{\theta} = -\frac{1}{\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial^{e}\Pi}{\partial \phi} = -\frac{k_{1}}{r\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial(r^{e}\Pi)}{\partial \phi}$$
(A.26)

si sustituimos (A.26) en (A.17 a,α) obtendremos

$${}^{\bullet}E_{r} = -\frac{1}{r \operatorname{sen} \theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} (\operatorname{sen} \theta \frac{\partial^{\bullet} \Pi}{\partial \theta}) + \frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial^{2}{}^{\bullet} \Pi}{\partial \phi^{2}} \right]$$
(A.27)

la sustitución de (A.26) y (A.27) en (A.21) da dos ecuaciones, la primera de las cuales expresa la desaparición de la derivada en ϕ , la segunda la desaparición de la derivada en 0. Por lo tanto, estas ecuaciones pueden satisfacerse igualando esta expresión a cero, lo cual nos da

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2(r^2\Pi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}(\sin\theta\frac{\partial^2\Pi}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2^2\Pi}{\partial \phi^2} + k^{2^2}\Pi = 0. \quad (A.28)$$

Por medio de esta ecuacion, (A.27) se puede reescribir como

$${}^{e}E_{r} = \frac{\partial^{2}(r^{e}\Pi)}{\partial r^{2}} + k^{2}r^{e}\Pi.$$
(A.29)

Se puede verficar por sustitución de (A.25), (A.26), (A.27), (A.28) y (A.29) en (A.17) que se ha obtenido una solución de nuestro conjunto de ecuaciones

Tratando de manera similar la onda magnética, se encuentra que esta onda puede derivarse de un potencial "II, el cual satisface también la ecuación diferencial (A.28). La solución de las ecuaciones de campo se obtiene sumando los dos campos; esto da

$$\begin{split} E_{r} = {}^{*}E_{r} + {}^{*}E_{r} &= \frac{\partial^{2}(r^{*}\Pi)}{\partial r^{2}} + k^{2}r^{*}\Pi, \qquad (\alpha) \\ E_{\theta} = {}^{*}E_{\theta} + {}^{*}E_{\theta} &= \frac{1}{r}\frac{\partial^{2}(r^{*}\Pi)}{\partial r\partial \theta} + k_{2}\frac{1}{r \sin\theta}\frac{\partial(r^{*}\Pi)}{\partial \phi}, \qquad (\beta) \\ E_{\phi} = {}^{*}E_{\phi} + {}^{*}E_{\phi} &= \frac{1}{r \sin\theta}\frac{\partial^{2}(r^{*}\Pi)}{\partial r\partial \phi} - k_{2}\frac{1}{r}\frac{\partial(r^{*}\Pi)}{\partial \theta}, \qquad (\gamma) \\ H_{r} = {}^{*}H_{r} + {}^{*}H_{r} &= k^{2}r^{*}\Pi + \frac{\partial^{2}(r^{*}\Pi)}{\partial r^{2}}, \qquad (\alpha) \\ H_{\theta} = {}^{*}H_{\theta} + {}^{*}H_{\theta} &= -k_{1}\frac{1}{r \sin\theta}\frac{\partial^{2}(r^{*}\Pi)}{\partial \phi} + \frac{1}{r}\frac{\partial^{2}(r^{*}\Pi)}{\partial r\partial \theta}, \qquad (\beta) \\ H_{\phi} = {}^{*}H_{\phi} + {}^{*}H_{\phi} &= k_{1}\frac{1}{r}\frac{\partial(r^{*}\Pi)}{\partial \theta} + \frac{1}{r \sin\theta}\frac{\partial^{2}(r^{*}\Pi)}{\partial r\partial \phi}, \qquad (\beta) \end{split}$$

Ambos potenciales " Π y " Π son soluciones de la ecuación diferencial (A.28) la cual no es otra sino la ecuación de onda

$$\nabla^2 \Pi + k^2 \Pi = 0,$$

escrita en coordenadas polares. Para que las componentes $E_{\theta}, E_{\phi}, H_{\theta}$ y H_{ϕ} sean continuas sobre la superficie esférica (r=a), es suficiente que las cuatro cantidades

$$k_1 r^* \Pi, \ k_2 r^m \Pi, \frac{\partial}{\partial r} (r^* \Pi) \ y \ \frac{\partial}{\partial r} (r^m \Pi)$$
 (A.31)

sean contínuas sobre esta superficie. Así, las condiciones de frontera también se dividen en condiciones independientes para 'II y "II.

El problema de esparcimiento se reduce así al problema de encontrar dos soluciones independientes de la ecuación de onda que satisfagan las condiciones a la frontera anteriores.

Primero, representaremos la solución de las ecuaciones de onda como expansiones con coeficientes determinados, cada término representando un entero particular. Los coeficientes se determinan usando las condiciones de frontera. Se sugieren integrales de la forma

$$\Pi = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \tag{A.32}$$

Como puede comprobarse, por sustitución directa en (A.28) las funciones R, Θ y Φ , satisfacen las ecuaciones diferenciales ordinarias siguientes:

$$\frac{d^{2}(rR)}{dr^{2}} + \left(k^{2} - \frac{\alpha}{r^{2}}\right)rR = 0, \qquad (a)$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left(\alpha - \frac{\beta}{\sin^{2}\theta}\right)\Theta = 0, \qquad (b)$$

$$\frac{d^{2}\Phi}{d\Phi^{2}} + \beta\Phi = 0 \qquad (c)$$

donde α y β son constantes de integración.

Como el campo (E, H) es una función univaluada de la posición, entonces Π debe de serlo también, este requerimiento impone ciertas condiciones en Θ y Φ .

Para cada una de las ecuaciones en (A.33) se puede escribir la solución general; para c) ésta es

$$\Phi = \operatorname{acos}(\sqrt{\beta\phi}) + \operatorname{bsen}(\sqrt{\beta\phi}).$$

la condición de univaluación demanda que

$$\beta = m^2$$
, (m= entero) (A.34)

Entonces la solución univaluada de (A.33c) es

$$= a_m \cos(m\phi) + b_m \sin(m\phi)$$
 (A.35)

la ecuación (A.33b) es la bien conocida ecuación para armonicos esféricos. Una condición necesaria y suficiente para la solución univaluada es que

$$\alpha = |(1+1),$$
 (|> |m|, entero) (A.36)

Sustituyendo para β de (A.34) en (A.33b) e introduciendo la nueva variable

$$\xi = \cos\theta \tag{A.37}$$

la ecuación se transforma en

$$\frac{d}{d\xi}\left((1-\xi^2)\frac{d\Theta}{d\xi}\right) + \left(\ell(\ell+1) - \frac{1}{1-\xi^2}\right)\Theta = 0 \qquad (A.38)$$

de la cuales son soluciones las funciones asociadas de Legendre

$$\Theta = P_1^{(m)}(\xi) = P_1^{(m)}(\cos\theta) \tag{A.39}$$

Estas funciones desaparecen identicamente si $|m| \ge 1$ para cada 1 hay por lo tanto 21 + 1 de tales funciones, nombrandolas esas como m = -1, -1 + 1, ..., 1 - 1, 1. Para integrar la ecuación sobrante (A.33a) definimos

$$kr = \rho,$$
 $R(r) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} Z(\rho)$ (A.40)

y obtenemos la ecuación de Bessel

$$\frac{d^2 Z}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dZ}{d\rho} + \left(1 - \frac{(\ell + 1/2)^2}{\rho^2}\right) Z = 0$$
 (A.41)

la solución de esta ecuación es, en general, una función cilíndrica $Z = Z_{1+1/2}(\rho)$ de orden 1 + 1/2, tal que la solución de (A.33a) es

$$R = \frac{1}{(kr)^{1/2}} Z_{1+1/2}(kr)$$
(A.42)

Cada función cilíndrica puede expresarse como una combinación lineal de dos funciones cilíndricas de tipo estandar, por ejemplo las funciones de Bessel $J_{i+1/2}(\rho)$ y las funciones de Newmann $N_{i+1/2}(\rho)$. Para el proposito presente es conveniente emplear las funciones

$$\psi_{\ell}(\rho) = \left(\frac{\pi\rho}{2}\right)^{1/2} J_{\ell+1/2}(\rho), \quad \chi_{\ell}(\rho) = -\left(\frac{\pi\rho}{2}\right)^{1/2} N_{\ell+1/2}(\rho) \quad (A.43)$$

Las funciones $\psi_1(\rho)$ son regulares en cada dominio finito del plano, incluyendo el origen, mientras que las funciones $\chi_1(\rho)$ tienen singularidades en el origen, en $\rho=0$, donde llegan a ser infinitas. Podemos, por lo tanto, usar funciones $\psi_1(\rho)$ pero no las funciones $\chi_1(\rho)$ para representar la onda dentro de la esfera.

н. ,*

$$rR = c_1 \psi_1(kr) + d_1 \chi_1(kr)$$
 (A.44)

En particular con $c_i = 1$, $d_i = -i$ tenemos

$$rR = \zeta_l^{(1)}(kr) \tag{A.45}$$

donde

$$\zeta_{\ell}^{(1)}(\rho) = \psi_{\ell}(\rho) - i\chi_{\ell}(\rho) = \left(\frac{\pi\rho}{2}\right)^{\nu} H_{\ell+\nu_{2}}^{(1)}(\rho)$$
(A.46)

siendo H⁽¹⁾ una de las funciones de Hankel. Las funciones de Hankel se distinguen de otras funciones cilíndricas por la propiedad de que desaparecen en el infinito en el plano complejo.

La que se utilizan aquí con el indice 1 desaparece en la mitad del plano de la parte imaginaria positiva de ρ y asi es viable para representar la onda esparcida.

De acuerdo a (A.32) una integral particular $\Pi_1^{(m)}$ se obtiene multiplicando las funciones dadas por (A.35), (A.39) y (A.44), obteniendo la siguiente solución general de la ecuación de onda:

$$r\Pi = r \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \prod_{\ell}^{(m)} =$$

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \{c_{\ell}\psi_{\ell}(kr) + d_{\ell}\chi_{\ell}(kr)\} \{P_{\ell}^{m}(\cos\theta)\} \{a_{m}\cos(m\phi) + b_{m}\sin(m\phi)\},$$
(A.47)

donde, a, b, c, y d, son constantes arbitrarias

Ahora debemos de determinar estas constantes de tal manera que satisfagan las condiciones a la frontera, para esto es necesario expresar los potenciales ${}^{\prime}\Pi^{(0)}$ y ${}^{m}\Pi^{(0)}$ de la onda incidente como series de la forma (A.47). Transformando la expresión (A.11) para la onda incidente en coordenadas polares esféricas de acuerdo con (A.15):

$$E_{r}^{(i)} \approx \operatorname{sen} \theta \cos\phi \exp(ik^{(l)}r\cos\theta),$$

$$E_{\theta}^{(i)} \approx -\operatorname{sen} \theta \exp(ik^{(l)}r\cos\theta),$$

$$H_{r}^{(i)} = \frac{ik^{(l)}}{k_{2}^{(l)}} \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \phi \exp(ik^{(l)}r\cos\theta),$$

$$H_{\theta}^{(i)} = \frac{ik^{(l)}}{k_{2}^{(l)}} \cos\theta \operatorname{sen} \phi \exp(ik^{(l)}r\cos\theta),$$

$$H_{\theta}^{(i)} = \frac{ik^{(l)}}{k_{2}^{(l)}} \cos\theta \operatorname{sen} \phi \exp(ik^{(l)}r\cos\theta),$$

$$H_{\theta}^{(i)} = \frac{ik^{(l)}}{k_{2}^{(l)}} \cos\theta \exp(ik^{(l)}r\cos\theta).$$
(A.48)

Para determinar los potenciales $\Pi^{(0)}$ o $\Pi^{(0)}$ solamente es necesario usar una de las ecuaciones (A.30); la primera de ellas proporciona:

$$\operatorname{sen} \theta \cos\phi \, \exp(ik^{(l)}r\cos\theta) = \frac{\partial^2 (r^{\bullet}\Pi^{(l)})}{\partial r^2} + k^{(l)2}r^{\bullet}\Pi^{(l)}. \tag{A.49}$$

El último factor del lado izquierdo de esta ecuación puede expresarse en la forma de una serie diferenciable de polinomios de Legendre

$$\exp(ik^{(l)}r\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^{l} (2l+1) \frac{\psi_{l}(k^{(l)}r)}{k^{(l)}r} P_{l}(\cos\theta)$$
(A.50)

También tenemos las identidades:

$$\exp(ik^{(l)}r\cos\theta) \equiv -\frac{1}{ik^{(l)}r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\exp(ik^{(l)}r\cos\theta)\right], \quad (A.51)$$
$$\frac{\partial}{\partial\theta}P_{1}(\cos\theta) \equiv -P_{1}^{(l)}(\cos\theta); \quad P_{0}^{(l)}(\cos\theta) \equiv 0 \quad (A.52)$$

Usando estas relaciones, el lado izquierdo de (A.49) puede expresarse en la forma:

$$\exp(ik^{(l)}r\cos\theta)\sin\theta\cos\phi = \frac{1}{(k^{(l)}r)^2}\sum_{i=1}^{\infty}i^{i-1}(2i+1)\psi_i(k^{(l)}r)P_i^{(1)}(\cos\theta)\cos\phi.$$
(A.53)

Comparando tomamos como solución trivial de (A.49) una serie de forma similar

$$r \Pi^{(l)} = \frac{1}{k^{(l)2}} \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \psi_i (k^{(l)} r) P_i^{(l)}(\cos\theta) \cos\phi.$$
 (A.54)

De la sustitución de (A.53) y (A.54) en (A.49) y comparando coeficientes obtenemos la relación.

$$\alpha_{1}\left[k^{(l)2}\psi_{\ell}(k^{(l)}r) + \frac{\partial^{2}\psi_{\ell}(k^{(l)}r)}{\partial r^{2}}\right] = i^{\ell-1}(2\ell+1)\frac{\psi_{\ell}(k^{(l)}r)}{r^{2}}.$$
 (A.55)

Ahora de (A.44), con $c_i = 1$ y $d_i = 0$, se sigue que:

$$k^{(I)}r = rR \tag{A.56}$$

es una solución de la ecuación (A.33a)

$$\frac{d^2\psi_{\ell}}{dr^2} + \left(k^{(\ell)2} - \frac{\alpha}{r^2}\right)\psi_{\ell} = 0, \qquad (A.57)$$

Ya que(ver ec. (A.36)) $\alpha = 1(1 + 1)$. Comparando (A.57) con (A.55) tenemos que

$$\alpha_{l} = i^{l-1} \frac{2l+1}{l(l+1)}$$
(A.58)

Los cálculos relacionados con el potencial magnético " $\Pi^{(0)}$ son similares. Así, obtenemos la siguiente expresión para los dos potenciales de la onda incidente

$$r^{*}\Pi^{(0)} = \frac{1}{k^{(l)2}} \sum_{l=1}^{\infty} i^{l-1} \frac{2l+1}{l(l+1)} \psi_{l}(k^{(l)}r) P_{l}^{(1)}(\cos\theta) \cos\phi,$$

$$r^{m}\Pi^{(0)} = \frac{1}{k^{(l)2}} \sum_{l=1}^{\infty} i^{l} \frac{k^{(l)}}{k^{(l)}} \frac{2l+1}{l(l+1)} \psi_{l}(k^{(l)}r) P_{l}^{(0)}(\cos\theta) \sin\phi.$$
(A.59)

Una vez expresados ambos potenciales como series de la forma (A.47), las constantes desconocidas pueden ser fácilmente determinadas. Reescribamos las condiciones a la frontera (A.31) en forma más adecuada

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r({}^{\ast}\Pi^{(i)} + {}^{\ast}\Pi^{(s)}) \right)_{r=s} = \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{\ast}\Pi^{(w)} \right)_{r=s}, \quad (a)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r({}^{\ast}\Pi^{(i)} + {}^{\ast}\Pi^{(s)}) \right)_{r=s} = \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{\ast}\Pi^{(w)} \right)_{r=s}, \quad (b)$$

$$k_{1}^{(I)} \left(r({}^{\ast}\Pi^{(i)} + {}^{\ast}\Pi^{(s)}) \right)_{r=s} = k_{2}^{(II)} \left(r^{\ast}\Pi^{(w)} \right)_{r=s}, \quad (c)$$

$$k_{2}^{(I)} \left(r({}^{\ast}\Pi^{(i)} + {}^{\ast}\Pi^{(s)}) \right)_{r=s} = k_{2}^{(II)} \left(r^{\ast}\Pi^{(w)} \right)_{r=s} \quad (d)$$

De acuerdo con (A.59) estas ecuaciones puede ser satisfechas solamente si estos términos ocurren en las expansiones (A.47) para los potenciales desconocidos $\Pi^{(*)}$ y $\Pi^{(*)}$ para los cuales m=1 y sí además, a=0 para el potencial magnético y b=0 para el potencial eléctrico.

En la expresión de $\Pi^{(w)}$ solamente las funciones ψ_1 son apropiadas, ya que estas permanecen regulares en el origen, mientras que las funciones χ_1 llegan a ser infinitas allí. Por lo tanto se tiene

$$r^{e}\Pi^{(w)} = \frac{1}{k} \sum_{\ell=1}^{\infty} {}^{e}A_{\ell} \psi_{\ell}(k^{(l)}r) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \cos\phi, (a)$$

$$r^{e}\Pi^{(w)} = \frac{i}{k^{(ll)}k^{(ll)}} \sum_{\ell=1}^{\infty} {}^{m}A_{\ell} \psi_{\ell}(k^{(ll)}r) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \operatorname{sen} \phi. (b)$$
(A.61)

También hemos visto que para la onda esparcida es apropiada una representación en términos de las funciones $\zeta_{i}^{(1)} = \psi_{1} - i\chi_{i}$, donde $\zeta_{i}^{(1)}$ se obtiene de la función de Hankel multiplicada por $(\pi \rho/2)^{1/2}$ ver (A.46). Para valores grandes de ρ , $H^{(1)}$ se comporta como $\exp(i\rho)/\sqrt{\rho}$, es decir, $\zeta_{i}^{(1)}$ tiende a $\exp(i\rho)$ y $R \approx \zeta_{i}^{(1)}(k^{(i)}r)/r$ tiende a $\exp(ik^{(i)}r)/r$.

Así, a grandes distancias de la esfera, la onda esparcida es esférica, con centro en el origen, r≈0. Por lo tanto puede escribirse:

$$r^{*}\Pi^{(s)} \approx \frac{1}{k^{(l)2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} {}^{*}B_{\ell} \zeta_{\ell}^{(l)}(k^{(l)}r) P_{\ell}^{(l)}(\cos\theta) \cos\phi, \quad (a)$$

$$r^{m}\Pi^{(s)} = \frac{i}{k^{(l)}k^{(l)}} \sum_{\ell=1}^{\infty} {}^{m}B_{\ell} \zeta_{\ell}^{(l)}(k^{(l)}r) P_{\ell}^{(l)}(\cos\theta) \sin\phi. (b)$$
(A.62)

Ahora si se sustituyen las expresiones (A.59), (A.61) y (A.62) en las condiciones a la frontera (A.60) se obtienen las siguientes relaciones líneales entre los coeficientes ${}^{*}A_{1}$, ${}^{*}A_{1}$, ${}^{*}B_{1}$ y ${}^{*}B_{1}$:

$${}^{*}B_{\ell} \frac{1}{k^{(\ell)}} \zeta_{\ell}^{(1)}(k^{(\ell)}\mathbf{a}) + \frac{1}{k^{(\ell)}} i^{\ell-1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \psi_{\ell}(k^{(\ell)}\mathbf{a})$$

$$= \frac{1}{k^{(U)}} {}^{*}A_{\ell} \psi_{\ell}(k^{(U)}\mathbf{a}),$$

$${}^{m}B_{\ell} \frac{1}{k_{2}^{(\ell)}} \zeta_{\ell}^{(1)}(k^{(\ell)}\mathbf{a}) + \frac{1}{k_{2}^{(\ell)}} i^{\ell-1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \psi_{\ell}(k^{(\ell)}\mathbf{a})$$

$$= \frac{1}{k_{2}^{(U)}} {}^{*}A_{\ell} \psi_{\ell}(k^{(U)}\mathbf{a}),$$

$${}^{*}B_{\ell} \frac{1}{k_{2}^{(\ell)}} \zeta_{\ell}^{(1)}(k^{(\ell)}\mathbf{a}) + \frac{1}{k_{2}^{(\ell)}} i^{\ell-1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \psi_{\ell}(k^{(\ell)}\mathbf{a})$$

$$= \frac{1}{k_{2}^{(U)}} {}^{*}A \psi_{\ell}(k^{(U)}\mathbf{a}),$$

$${}^{m}B_{\ell} \frac{1}{k^{(\ell)}} \zeta_{\ell}^{(1)}(k^{(\ell)}\mathbf{a}) + \frac{1}{k^{(\ell)}} i^{\ell-1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \psi_{\ell}(k^{(\ell)}\mathbf{a})$$

$$= \frac{1}{k^{(U)}} {}^{*}A_{\ell} \psi_{\ell}(k^{(U)}\mathbf{a}).$$
(A.63)

La onda esparcida esta caracterizada por los coeficientes " B_1 y " B_1 los cuales pueden obtenerse de la eliminación de " A_1 y " A_1 , lo cual da

$${}^{*}B_{l} = i^{l+1} \frac{(2l+1)k_{2}^{(l)}k^{(ll)}\psi_{l}(k^{(l)}a)\psi_{l}(k^{(ll)}a) - k_{2}^{(l)}k^{(l)}\psi_{l}(k^{(ll)}a)\psi_{l}(k^{(ll)}a)}{|(l+1)k_{2}^{(l)}k^{(ll)}\zeta_{l}^{(l)}(k^{(l)}a)\psi_{l}(k^{(ll)}a) - k_{2}^{(ll)}k^{(l)}\psi_{l}(k^{(ll)}a)\zeta_{l}^{(l)}(k^{(l)}a)}$$

$${}^{*}B_{l} = i^{l+1} \frac{(2l+1)k_{2}^{(l)}k^{(ll)}\psi_{l}(k^{(l)}a)\psi_{l}(k^{(l)}a) - k_{2}^{(ll)}k^{(l)}\psi_{l}(k^{(ll)}a)\psi_{l}(k^{(l)}a)}{|(l+1)k_{2}^{(l)}k^{(ll)}\zeta_{l}^{(l)}(k^{(l)}a)\psi_{l}(k^{(ll)}a) - k_{2}^{(ll)}k^{(l)}\zeta_{l}^{(l)}(k^{(l)}a)\psi_{l}(k^{(l)}a)}$$

$$(A.64)$$

Finalmente las componentes de los vectores del campo de la onda esparcida se obtienen de la sustitución de (A.62) en (A.30), obteniéndose:

$$E_{r}^{(s)} = \frac{1}{k} \frac{\cos\phi}{r^{2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} \ell(\ell+1)^{r} B_{\ell} \zeta_{\ell}^{(1)}(k^{(\ell)}r) P_{\ell}^{1}(\cos\theta),$$

$$E_{\theta}^{(s)} = -\frac{1}{k^{(\ell)}} \frac{\cos\phi}{r} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left({}^{s} B \zeta(kr) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \sin\theta - i^{m} B_{\ell} \zeta_{\ell}^{(1)}(k^{(1)}r) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \frac{1}{\sin\theta} \right),$$

$$E_{\phi}^{(s)} = -\frac{1}{k} \frac{\sin\phi}{r} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left({}^{s} B \zeta(kr) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \sin\theta - i^{m} B_{\ell} \zeta_{\ell}^{(1)}(k^{(1)}r) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \frac{1}{\sin\theta} \right)$$

$$H_{r}^{(s)} = -\frac{1}{k^{(\ell)} k_{2}^{(\ell)}} \frac{\sin\phi}{r^{2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} \ell(\ell+1)^{m} B \zeta,$$

$$H_{\theta}^{(s)} = -\frac{1}{k_{2}^{(1)}} \frac{\sin\phi}{r} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left({}^{s} B \zeta(kr) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \sin\theta - i^{m} B_{\ell} \zeta_{\ell}^{(1)}(k^{(1)}r) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \frac{1}{\sin\theta} \right)$$

$$H_{\phi}^{(s)} = \frac{1}{k_{2}^{(\ell)}} \frac{\cos\phi}{r} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left({}^{s} B \zeta(kr) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \sin\theta - i^{m} B_{\ell} \zeta_{\ell}^{(1)}(k^{(1)}r) P_{\ell}^{(1)}(\cos\theta) \frac{1}{\sin\theta} \right)$$

$$(A.65)$$

Para $E_r^{(s)}$ y $H_r^{(s)}$ es necesario encontrar las relaciones que existen entre $d^2\zeta_1/d\rho^2$ y ζ_1 las cuales se encuentran a partir de las relaciones de recurrencia para funciones de la forma $\psi_1(\rho) = (\pi \rho/2)^{1/2} J_{1+1/2}(\rho)$ siendo la utilizada

$$\frac{d}{d\rho} \Big[\rho^{-(l+1)} \psi_{l}(\rho) \Big] = - \rho^{-(l+1)} \psi_{l+1}(\rho)$$

lo cual nos conduce a la relación buscada

$$\frac{d^2\zeta_1}{d\rho^2} = -\zeta_1 + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\zeta_1$$

Esto completa la solución formal de nuestro problema de valores a la frontera.

De acuerdo con las condiciones del problema: $\sigma^{(0)} = 0$. Si escribimos σ en lugar de $\sigma^{(0)}$ para la conductividad de la esfera, tenemos de (A.9)

$$k_{1}^{(I)} = \frac{i\omega}{c} \varepsilon^{(I)} = i \frac{2\pi}{\lambda_{0}} \varepsilon^{(I)}, \quad k_{2}^{(I)} = \frac{i\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda_{0}}, \quad (a)$$

$$k_{1}^{(I)} = \sqrt{-k_{1}^{(I)} k_{2}^{(I)}} = \frac{2\pi}{\lambda_{0}} \sqrt{\varepsilon^{(I)}} = \frac{2\pi}{\lambda^{(I)}}, \quad (b)$$

$$k_{1}^{(II)} = \frac{i\omega}{c} \left(\varepsilon^{(II)} + i \frac{4\pi\sigma}{\omega} \right), \quad k_{2}^{(II)} = \frac{i\omega}{c} = i \frac{2\pi}{\lambda_{0}}, \quad (c)$$

$$k_{1}^{(II)} = \sqrt{-k_{1}^{(II)} k_{2}^{(II)}} = \frac{2\pi}{\lambda_{0}} \sqrt{\varepsilon^{(II)} + \frac{4\pi\sigma}{\omega}}, \quad (d)$$
(A.66)

donde λ_0 es la longitud de onda de la luz en el vacio y $\lambda^{(0)}$ es la longitud de onda en el medio alrededor de la esfera.

Es conveniente introducir también el índice de refracción complejo del medio; denotando este indice por *h* tenemos

$$\hbar^{2} = \frac{\hbar^{(l)2}}{\hbar^{(l)2}} = \frac{k^{(l)2}}{k^{(l)2}} = \frac{\varepsilon^{(l)}}{\varepsilon^{(l)}} + i\frac{4\pi\sigma}{\omega\varepsilon^{(l)}} = \frac{k_{1}^{(l)}}{k_{1}^{(l)}}.$$
 (A.67)

también se introduce el parametro adimencional x ya definido Entonces usando la relación

.

$$\frac{k^{(l)}k_2^{(l)}}{k^{(l)}k_2^{(l)}} = \hbar$$

podemos expresar los coeficientes (A.64) en la forma

$${}^{*}B_{\ell} = i^{1+1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \frac{\hbar \psi_{\ell}(x)\psi_{\ell}(\hbar x) - \psi_{\ell}(x)\psi_{\ell}(\hbar x)}{\hbar \zeta_{\ell}^{(1)^{*}}(x)\psi_{\ell}(\hbar x) - \zeta_{\ell}^{(1)}(x)\psi_{\ell}(\hbar x)}, \quad (a)$$

$${}^{*'}B_{\ell} = i^{+1} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \frac{\hbar \psi_{\ell}(x)\psi_{\ell}(\hbar x) - \psi_{\ell}(x)\psi_{\ell}(\hbar x)}{\hbar \zeta_{\ell}^{(1)}(x)\psi_{\ell}(\hbar x) - \zeta_{\ell}^{(1)^{*}}(x)\psi_{\ell}(\hbar x)}. \quad (b)$$

De (A.65) se ve que la amplitud de las componentes radiales de la onda esparcida : $E_r^{(s)}$ y $H_r^{(s)}$, decaen inversamente al cuadrado de la distancia del centro de esparcimiento, mientras que las amplitudes de las otras componentes lo hacen más lentamente: como el inverso de esta distancia. Para distancias lo suficientemente grandes, ($r > \lambda$), es decir en la zona de radiación o zona de la onda, las componentes radiales pueden, por lo tanto, despreciarse en comparación con las componentes tangenciales, i.e. en esta región la onda es transversal.

Para valores grandes del argumento x, si λ es pequeña comparada con |x|, son validas las siguientes fórmulas asintóticas:

$$\begin{aligned} \zeta_{i}^{(1)}(x) &\cong (-i)^{i+1} exp(ix) \\ \zeta_{i}^{(1)}(x) &\cong (-i)^{i} exp(ix) \end{aligned} \tag{A.69}$$

Luego entonces, en la zona de radiación y utilizando las fórmulas anteriores, las componentes de campo (A.65) se transforman en

$$E_{r} = H_{r} = 0$$

$$E_{\theta} = H_{\theta} = \frac{i}{kr} \cos\phi S_{2}(\theta) \exp(ikr - i\omega t) \qquad (A.70)$$

$$E_{\theta} = H_{\theta} = \frac{i}{kr} \sin\phi S_{1}(\theta) \exp(ikr - i\omega t)$$

donde

$$S_{1}(\theta) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \{ a_{\ell} \pi_{\ell}(\cos\theta) + b_{\ell} \tau_{\ell}(\cos\theta) \},$$

$$(A.71)$$

$$S_{2}(\theta) = \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{2\ell+1}{\ell(\ell+1)} \{ b_{\ell} \pi_{\ell}(\cos\theta) + a_{\ell} \tau_{\ell}(\cos\theta) \}$$

con

$$\pi_{1}(\cos\theta) = \frac{1}{\sin\theta} P_{1}^{(1)}(\cos\theta),$$

$$\tau_{1}(\cos\theta) = \frac{d}{d\theta} P_{1}^{(1)}(\cos\theta).$$
(A.72)

y

$$a_{\ell} = \frac{\hbar \psi_{\ell}(x)\psi_{\ell}(\hbar x) - \psi_{\ell}(x)\psi_{\ell}(\hbar x)}{\hbar \zeta_{\ell}^{(1)}(x)\psi_{\ell}(\hbar x) - \zeta_{\ell}^{(1)}(x)\psi_{\ell}(\hbar x)},$$

$$b_{\ell} = \frac{\hbar \psi_{\ell}(x)\psi_{\ell}(\hbar x) - \psi_{\ell}(x)\psi_{\ell}(\hbar x)}{\hbar \zeta_{\ell}^{(1)}(x)\psi_{\ell}(\hbar x) - \zeta_{\ell}^{(1)}(x)\psi_{\ell}(\hbar x)}.$$
(A.73)

los cuales son los coeficientes de dispersión de Mie, a partir de los cuales se calculan algunos parámetros ópticos del aerosol atmosférico.

B. Gráficas complementarias

En este apéndice se muestran algunas gráficas que complementan los resultados presentados en el capítulo 3.

Las gráficas de las figuras B1-B11 representan la distribución númerica de tamaños para cada uno de los meses de todos los años del período estudiado.

La gráfica de la figura B12 representa la variación del albedo de esparcimiento simple para tres diferentes índices de refracción, en particular, se presentan los valores promedio mensuales del albedo para el año de 1995.

••

,



Figura B1. Gráfica que muestra la distribución por tamaños para los meses de 1985



Figura B2. Grafica que muestra la distribución por tamaños para los meses del año de 1986



Figura B3. Grafica que muestra la distribución por tamaños para los meses de 1987.



Figura B4. Gráfica que muestra la distribución por tamaños para los meses de 1988.



Figura B5. Gráfica que muestra la distribución por tamaños para los meses del año 1989.







Figura B7. Gráfica que muestra la distribución por tamaños para los meses del año de 1991.



Figura B8. Gráfica que muestra la distribución por tamaños para los meses del año de 1992.



Figura B9. Gráfica que muestra la distribución por tamaños para los meses del año de 1993.



Figura B10. Gráfica que muestre la distribución por tamaños para los meses del año de 1994.



Figura B11. Gráfica que muestra la distribución por tamaños para los meses del año de 1995.



Figura B12 Variación del albedo de esparcimiento simple para tres diferentes índices de refracción y para λ=0.55 μm Los datos corresponden al año de 1995.

120