

BIOSOA

Biogene Invloeden op Oxidanten en Secundair Organisch Aerosol: theoretisch, laboratorium- en modelleringsonderzoek

DUUR VAN HET PROJECT
15/12/2010 – 15/12/2014

BUDGET
1.156.978 €

SLEUTELWOORDEN

Secundair organisch aerosol; troposferische samenstelling; oxiderende capaciteit; biogene emissies; isoprene; monoterpenen

CONTEXT

Wegens hun grote uitstoot (~1000 megaton per jaar wereldwijd), spelen biogene volatile organische stoffen (BVOS) die worden uitgestoten door planten een centrale rol voor de luchtkwaliteit en in het klimaatstelsel. Hun atmosferische oxidatie is een grote bron van secundair organisch aerosol (SOA), een belangrijke component van fijn stof; ze heeft ook een sterke impact op troposferisch ozon en op de oxiderende capaciteit van de atmosfeer, en daardoor op de concentratie van belangrijke broeikasgassen zoals methaan. Er blijven echter grote onzekerheden met betrekking tot (1) de invloed van isopreen, de belangrijkste BVOS op wereldvlak, op de concentratie van het hydroxylradicaal (OH), (2) de reactiepaden die leiden tot belangrijke SOA-componenten voor de voornaamste BVOS, en (3) de grootte van de SOA-bronnen als gevolg van de oxidatie van de verschillende BVOS.

PROJECTBESCHRIJVING

Doelstellingen

Voortbouwend op twee projecten uit het vorige SSD-programma (IBOOT en BIOSOL), stellen we nieuw laboratorium-, theoretisch en modelleringsonderzoek voor met als doel het verhelderen en beter kwantificeren van de rol van BVOS als bronnen van SOA en als een cruciale factor die de oxiderende capaciteit van de atmosfeer beïnvloedt. Dit project heeft als doelstelling bij te dragen aan een betere wetenschappelijke basis voor besluitvorming, vooral op internationaal vlak, daar de effecten van beperkingen van de emissie van vervuilingen op bijvoorbeeld luchtkwaliteit niet bepaald kunnen worden zonder een beter begrip van de oxidatie van BVOS en de vorming van biogeen SOA. De specifieke doelstellingen van BIOSOA zijn:

1. de impact van isopreenemissies op de concentraties van verschillende oxidanten verhelderen,
2. inzicht winnen in de chemische reacties die leiden tot cruciale SOA-componenten,
3. de bijdrage kwantificeren van specifieke BVOS aan aerosol,
4. de impact evalueren van BVOS-emissies op organisch aerosol op wereldvlak.

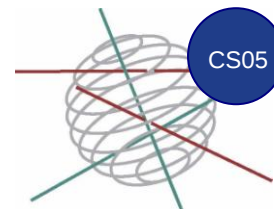
Methodologie

- Er zullen laboratoriumexperimenten uitgevoerd worden (UA, IFT) om de vormingsmechanismen van belangrijke SOA-tracers van isopreen en α -pineen, die in substantiële hoeveelheden voorkomen in SOA, te helpen verhelderen. De structuur van tot nog toe onbekende tracers voor α -pineen zal bepaald worden.
- Een geschikte methode zal ontwikkeld worden (UA) om de bijdrage van isopreen en α -pineen aan aerosol in de atmosfeer te bepalen. Deze methode zal toegepast worden op fijn aerosol verzameld tijdens meetcampagnes in Finland, Hongarije en mogelijk het Amazonewoud.
- Een volledig gasfasemechanisme voor de oxidatie van isopreen door het OH-radicaal zal ontwikkeld worden (KULeuven) door toepassing van theoretische methodes van hoog niveau, die reeds werden gebruikt in eerder werk, en het mechanisme zal geëvalueerd worden aan de hand van beschikbare laboratorium- en velddata.
- Een gedetailleerd model voor de scheikunde van de oxidatie in de gas/waterfase zal ontwikkeld worden (BIRA-IASB), gebaseerd op nieuwe, uitgebreide methodes voor de bepaling van thermodynamische eigenschappen van constituenten van SOA, met als bedoeling het evalueren van de impact van de scheikunde binnen wolken op het SOA-budget.
- Een cruciale gasfasereactie met betrekking tot multifasechemie zal onderzocht worden in het laboratorium (KULeuven).
- De impact van BVOS-emissies op het budget en de concentratie van SOA zal onderzocht worden met behulp van een globaal model (BIRA-IASB). De berekende bijdrage van verschillende BVOS zullen vergeleken worden met bepalingen gebaseerd op de waarneming van tracers.



BIOSOA

Biogene Invloeden op Oxidanten en Secundair Organisch Aerosol:
theoretisch, laboratorium- en modelleringsonderzoek



INTERACTIE TUSSEN DE VERSCHILLENDE PARTNERS

Een nauwe samenwerking tussen de partners zal essentieel zijn voor het succes van BIOSOA. De theoretische en experimentele resultaten verkregen door de KULeuven zullen gebruikt worden in de modellen voor BVOS-degradatie en SOA-vorming ontwikkeld in BIRA-IASB. De evaluatie van deze modellen aan de hand van experimentele (veld- en laboratorium-)data moet voor bijkomende informatie zorgen die het theoretische mechanisme verder in de juiste richting kan sturen. De laboratoriumexperimenten op de vorming en veroudering van SOA-tracers zullen uitgevoerd worden in een reactiekamer in het IFT; chemische analyse van de aerosolsamples en de interpretatie van de resultaten zal gebeuren aan de UA. De resultaten van het globale model zullen gevalideerd worden met behulp van de relatieve bijdragen van verschillende BVOS aan de concentratie van atmosferisch SOA, geschat door de UA aan de hand van tracerconcentraties.

VERWACHTE RESULTATEN

- Een beter begrip van de processen die leiden tot de vorming SOA ten gevolge van de oxidatie van biogene vluchtige stoffen, in het bijzonder isopreen en α -pineen.
- Een verbeterde kwantificering van de bijdrage van verschillende BVOS aan de concentratie van fijn aerosol.
- Een 'state-of-the-art' scheikundig mechanisme voor de oxidatie van isopreen door OH, geëvalueerd tegenover laboratoriumdata en veldmetingen.
- Een 'state-of-the-art' model voor de vorming van SOA, dat zowel scheikunde in wolken als de scheikundige verouderingsprocessen behandelt, en een evaluatie van de invloed van biogene en antropogene emissies op het budget en de concentratie van SOA.

PARTNERS

Activiteiten

Verwachte resultaten

De groep 'Modellering van de troposferische chemie' van BIRA-IASB draagt bij tot emissiemodellen, ontwikkeling en evaluatie van scheikundige mechanismen, SOA-vorming en globale modellering.

De groep van de KULeuven levert bijdragen aan de chemische kinetika van elementaire gasfasereacties, en past kwantumchemische methodes van hoog niveau toe op chemische problemen, waaronder reactiemechanismen en reactiekinetika.

De groep van de UA focust zich op de karakterisatie van SOA-tracers afkomstig van de foto-oxidatie van isopreen en α -pineen, en op de ontwikkeling van een aangepaste methodologie gebaseerd op vloeistofchromatografie/ massaspectrometrie om de bijdragen van BVOS tot SOA in te schatten.

De groep van het IFT heeft ruime ervaring, en is goed uitgerust voor het uitvoeren van smogkamerexperimenten gesimuleerd onder atmosferische omstandigheden.

CONTACT INFORMATIE

Coördinator

Jean-François Müller

Belgisch Instituut voor Ruimte-Aeronomie (BIRA-IASB)
Ringlaan 3
B-1180 Brussel
Tel : 02 373.03.66
Fax : 02 374.84.23
Email : Jean-Francois.Muller@aeronomie.be
<http://tropo.aeronomie.be>

Shaun Carl & Jozef Peeters

Katholieke Universiteit Leuven (KULeuven)
Afdeling Kwantumchemie en Fysische Chemie
Department Scheikunde
Celestijnenlaan 200F
B-3001 Heverlee
Tel: 016 32.73.82
Fax: 016 32.79.92
Email: Jozef.Peeters@chem.kuleuven.ac.be,
Shaun.Carl.chem.kuleuven.ac.be
<http://arrhenius.chem.kuleuven.ac.be/labpeeters>

Magda Claeys & Willy Maenhaut

Universiteit Antwerpen (UA)
Campus Drie Eiken
Department Farmaceutische Wetenschappen
Universiteitplein 1
B-2610 Antwerpen
Tel.: 03 265 2707
Fax: 03 265 2734
Email: Magda.Claeys@ua.ac.be

Internationale partner

Yoshiteru Iinuma & Hartmut Herrmann

Leibniz Institute for Tropospheric Research (IFT)
Permoserstrasse 15
04318 Leipzig, Germany
Tel: 49 341 2352535
Fax: 49 341 2352325
Email: yoshi@tropos.de

Projectwebsite

<http://tropo.aeronomie.be/>

Opvolgingscomité

Voor de volledige en de meest up-to-date samenstelling van het Opvolgingscomité, gelieve onze databank van federale onderzoeksacties (FEDRA) te bezoeken op <http://www.belspo.be/fedra>

