

# IBOOT

## Impact van biogene emissies op organische aërosolen en oxidantia in de troposfeer

### DUUR VAN HET PROJECT

Fase 1: 15/12/2005 – 14/12/2007  
Fase 2: 01/01/2009 – 31/01/2010

### BUDGET

685.568 €

### SLEUTELWOORDEN

Biogene emissies, secundaire organische aerosolen, VOS (vluchtige organische stoffen), oxydatiemechanismen, troposferisch ozon, zelfreinigend vermogen van de atmosfeer

### CONTEXT

Dit project beoogt het beter begrijpen en kwantifiëren van de impact van Biogene Vluchtige Organische Stoffen (BVOS) op de luchtkwaliteit en op het klimaatsysteem (middels aërosolen en de broeikasgassen ozon en methaan). Het zal daardoor het betreffende beleid ondersteunen op internationaal (b.v. via het IPCC) zowel als op het Belgisch federaal niveau. Gedetailleerde degradatiemechanismen van belangrijke BVOS verbindingen (de mono- en sesquiterpenen) zullen ontwikkeld worden door middel van geavanceerde theoretische methoden en geïmplementeerd worden in een grootschalig model ten einde hun impact op de atmosfeer te bepalen. De mechanismen en het model zullen gevalideerd worden door laboratorium- en veldwaarnemingen, met inbegrip van metingen uitgevoerd in het raam van het BIOSOL zusterproject.

### BESCHRIJVING VAN HET PROJECT

#### Doelstellingen

Onze algemene doelstellingen zijn:

- 1) De bepaling van de impact van biogene organische stoffen in de atmosfeer
- 2) De vastlegging van de fotochemische-degradatiemechanismen en de aerosolvormingspotentialen van verscheidene mono- en sesquiterpenen

Meer specifiek beogen we:

- 1) De doorvoering van experimentele studies met betrekking tot de ozongeïnitieerde oxidatiemechanismen en de aerosolvormingspotentialen van twee sesquiterpenen
- 2) De ontwikkeling van een alomvattend model ter beschrijving van de gasfaze-oxidatie en de aerosolvorming bij de degradatie van de belangrijkste terpenen
- 3) De evaluatie van de impact van deze terpenen op troposferisch ozon en organische aerosolen op een globale schaal
- 4) De bepaling van de impact van reacties van zuurstofhoudende verbindingen in de hogere troposfeer

### Methodologie

- 1) Doorvoeren van oxidatie experimenten van twee sesquiterpenen,  $\beta$ -caryofylleen en  $\alpha$ -humuleen, in een grote reactor (Internationale partner MPI-Mainz), waarbij zowel de gas- als deeltjesvormige producten van de reacties met ozon zullen worden geanalyseerd, en de aerosolopbrengst, hun deeltjesgrootte en hun activiteit als wolkcondensatiekernen zullen bepaald worden. Eveneens zal de invloed van de reactieomstandigheden (zoals de temperatuur) onderzocht worden.
- 2) Inzetten van de meest geavanceerde theoretische methoden voor de ontwikkeling van Structuur-Activiteitsrelaties (SARs) die vereist zijn voor de uitwerking van gedetailleerde degradatiemechanismen van terpenen en andere VOS (KULeuven). Ontwikkelen van zulke mechanismen voor geselecteerde mono- en sesquiterpenen. Ontrafeling van de vormingspaden van cruciale laag-vluchtige verbindingen. Deze mechanismen kunnen als basis dienen voor oxydatie van andere terpenen.
- 3) Ontwikkelen van een model voor de partitie tussen de gas- en deeltjesfasen van de oxidatieproducten van mono- en sesquiterpenen, op basis van state-of-the-art voorspellingsmethodes van thermodynamische eigenschappen. Koppelen van dit model met een «box» model voor de gasfaze-degradatie van geselecteerde mono- en sesquiterpenen (BIRA). Valideren van dit model door confrontatie met laboratoriummetingen in diverse condities. Bepalen in hoeverre de waargenomen aerosolvorming kan gereproduceerd worden met of zonder parametrizaties van heterogene reacties.
- 4) Implementeren van een vereenvoudigde versie van dit model in een globaal chemie-transport atmosfeermodel, en bepalen van de impact van terpeenemissies op het budget en de distributie van oxidantia en organische aërosolen (BIRA).
- 5) Bepalen van de temperatuur- en drukafhankelijke snelheden en producten van de reacties van een aantal zuurstofhoudende verbindingen met OH en/of HO<sub>2</sub> radicalen, d.m.v. geavanceerde theoretische methoden, en evalueren van de impact van deze verbindingen in de atmosfeer (KULeuven).



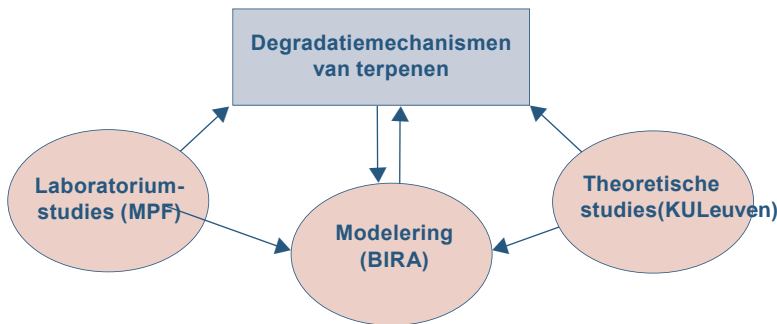
# IBOOT

Impact van biogene emissies op organische aërosolen en oxidantia in de troposfeer

## INTERACTIE TUSSEN DE VERSCHILLENDE PARTNERS

De onderzoeksresultaten van zowel KULeuven als de Internationale partner MPI Mainz zijn vereist voor het opstellen van de terpeenoxidatiemechanismen. Deze zullen geïncorporeerd worden in het model ont-

wikkeld door BIRA, dat zal gevalideerd worden op basis van laboratoriumdata verkregen in dit project (door MPI) zowel als in eerdere studies.



## VERWACHTE RESULTATEN EN/OF PRODUCTEN

Onze onderzoeksresultaten zullen verspreid worden via publicaties in internationale tijdschriften en mededelingen op internationale congressen, en tevens via onze website ([www.oma.be/TROPO/IBOOT/Home.html](http://www.oma.be/TROPO/IBOOT/Home.html)). Andere valorisatieactiviteiten omvatten:

1) de ontwikkeling van een website voor Structuur-Activiteitsrelaties (SARs), met pedagogische werktuigen, een discussie van de methoden, de chemisch-kinetische datasets, en de statistische analy-

ses daarvan. Een programma zal ontwikkeld worden voor geautomatiseerd gebruik van de SARs, 2) workshop/school over mechanismenontwikkeling, in samenwerking met het BIOSOL project en onder de auspiciën van het INTROP programma van de NSF, en 3) data overdracht naar internationale databases (b.v. binnen het FP6 network of excellence ACCENT).

## PARTNERS - ACTIVITEITEN

**BIRA** heeft een lange traditie in atmosfeeronderzoek, dat één van zijn hoofdpodochten is. Een groot deel van het wetenschappelijke werk is gewijd aan de stratosfeer en de troposfeer door middel van laboratoriumstudies, modellering en in situ atmosferemonitoring.

De laboratoria van KULeuven betrokken bij dit project leggen zich toe op de chemische kinetika van radicalaire reacties en tevens op de ontwikkeling/aanwending van hoog-niveau kwantumchemische en

kwantumstatistische theoretische methoden o.m. voor reactiemechanismen, reactie-kinetica en product-distributies.

Het onderzoek van de **Internationale partner MPI-Mainz** is toegespitst op ozon en op radicalen in foto-oxidatiemechanismen die een centrale rol vervullen in het zelfreinigende vermogen van de atmosfeer. MPI ontwikkelt hoogsensitieve instrumentatie voor spoorgasmetingen, en voor het ontrafelen van fotochemische reactieketens.

## CONTACT INFORMATION

### Project website:

[www.oma.be/TROPO/IBOOT/Home.html](http://www.oma.be/TROPO/IBOOT/Home.html)

### Coördinator

#### Jean-François Müller

Belgisch Instituut voor Ruimte-Aëronomie (BIRA)  
Avenue Circulaire 3  
B-1180 Brussel  
Tel: +32 (0)2 373.03.66  
Fax: +32 (0)2 374.84.23  
Jean-Francois.Muller@aeronomie.be  
[www.oma.be/TROPO](http://www.oma.be/TROPO)

#### Jozef Peeters & Luc Vereecken

Katholieke Universiteit Leuven (KULeuven)  
Afdeling Kwantumchemie en Fysicochemie, Department Chemie  
Celestijnenlaan 200F  
B-3001 Heverlee  
Tel: +32 (0)16 32.73.82  
Fax: +32 (0)16 32.79.92  
Jozef.Peeters@chem.kuleuven.ac.be  
[arrhenius.chem.kuleuven.ac.be/labpeeters/](http://arrhenius.chem.kuleuven.ac.be/labpeeters/)

#### Geert Moortgat & Richard Winterhalter

Max-Planck Institut für Chemie, Mainz  
Division of Atmospheric Chemistry  
J.J.-Becherweg 27  
D-55020 Mainz  
Tel: +49 (0)6131 305.476  
Fax: +49 (0)6131 305.436  
[moo@mpch-mainz.mpg.de](mailto:moo@mpch-mainz.mpg.de)

### 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> of <http://www.belspo.be/ssd>

