

VOC and the Photochemical Ozone Creation Potential (POCP)



Introduction



Concept



Significance



Example Germany

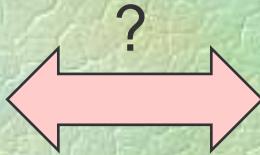


The Future

Rainer Steinbrecher

Einführung

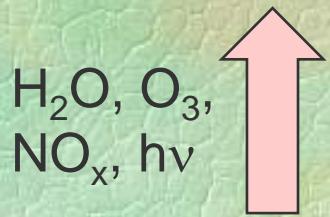
Climate Warming



Climate Cooling ?



Ozone

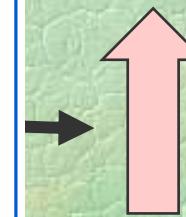


$H_2O, O_3,$
 $NO_x, h\nu$

VOC

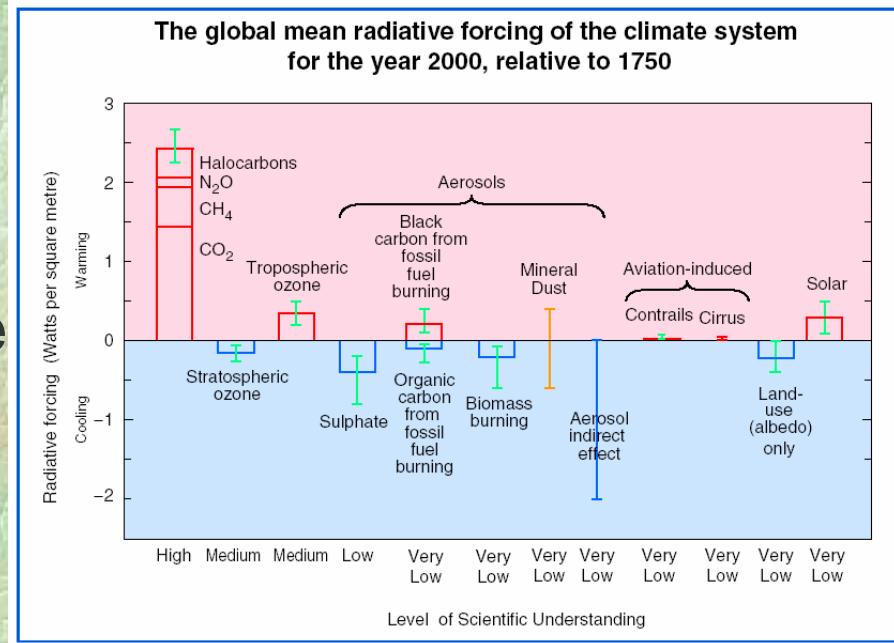


Particles



$H_2O, SO_2,$
 $NH_3, h\nu$

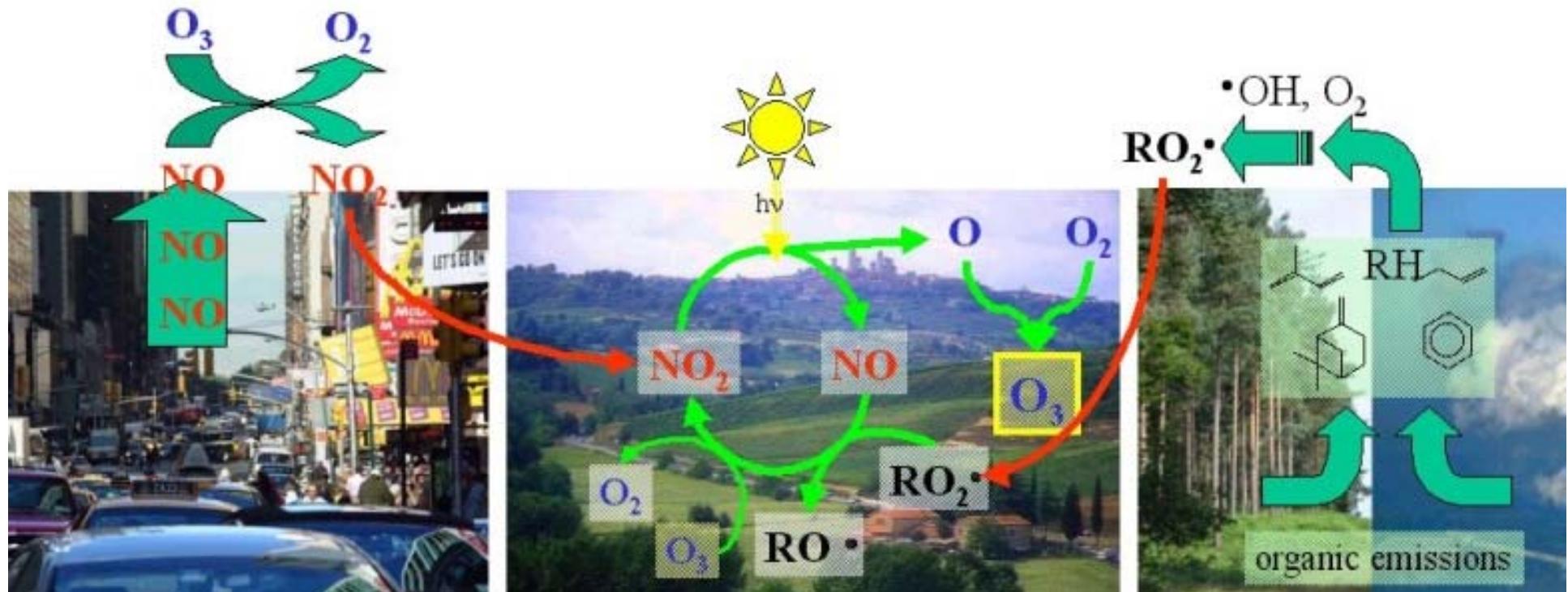
VOC



Oxidation in the Troposphere

Photochemie der Troposphäre

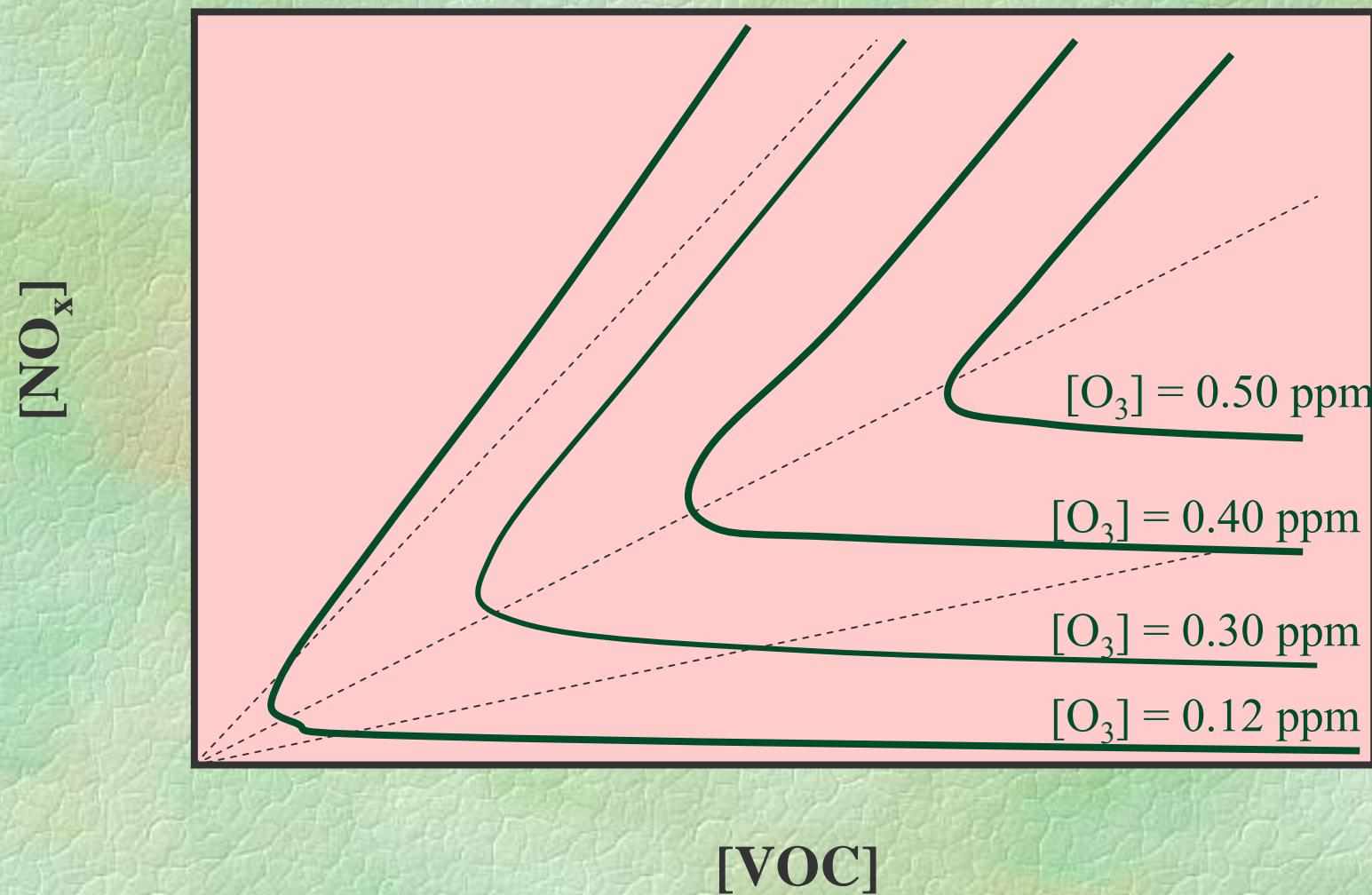
Radikal-Chemie von Ozon/HO/NO_x



Definition von VOC

- EU Direktive: VOC ist eine organische Verbindung mit einem Dmpfdruck $\geq 0.01 \text{ kPa}$ bei 20°C :
Es wird keine Reaktivität berücksichtigt!
- US EPA: VOC ist eine Kohlenstoffverbindung, die *photochemisch aktiv* ist.

Ozonproduktion – Das Isoplethen-Diagramm!

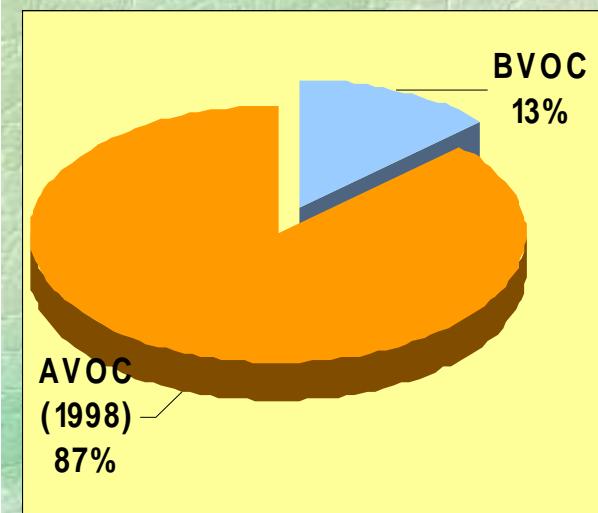


Definition „Photochemical Ozone creation“, POCP

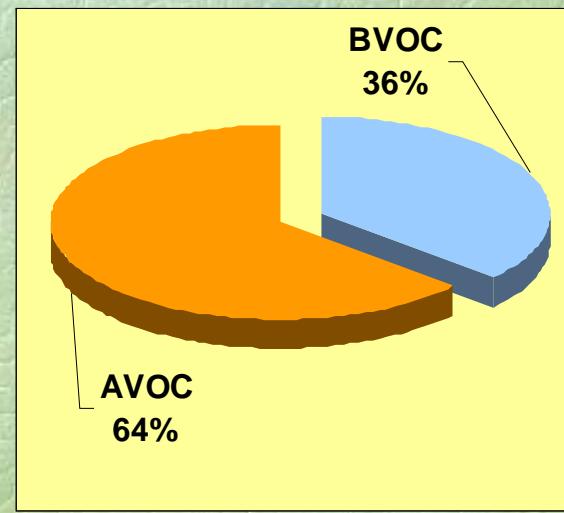
- POCP ist ein Index, der die Fähigkeit eines VOC zur phototchemischen Ozonproduktion beschreibt, und damit zu einer Änderung des bodennahen Ozonspiegels führt.
- VOCs besitzen eine unterschiedliche Reaktivität mit Oxidantien (Ozon, HO, NO_x) der Atmosphäre und tragen deshalb unterschiedlich zur Ozonbildung bei.
- Das Konzept wurde von Derwent und Jenkin in den 1990iger entwickelt.

Potentielle VOC-Emission für Deutschland

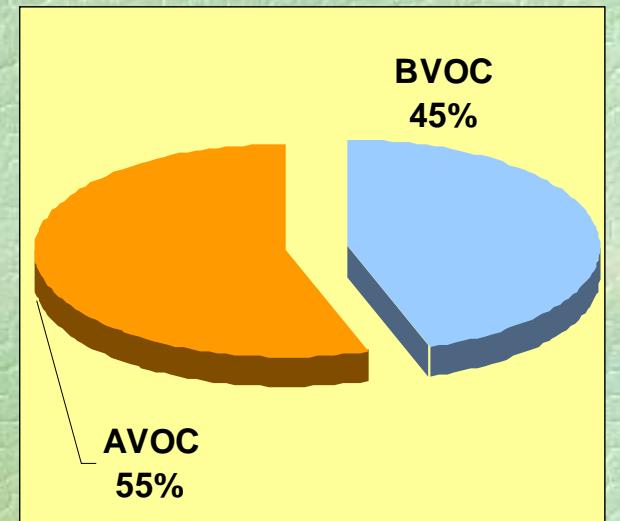
Jahr 2000



August 2003



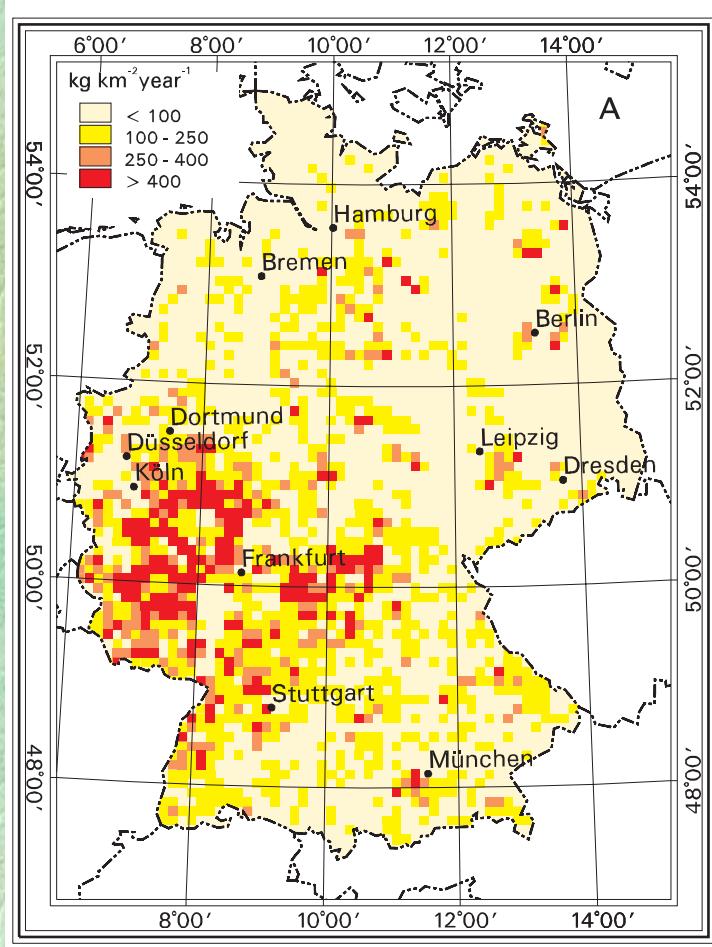
01.08.2003 -10.08.2003



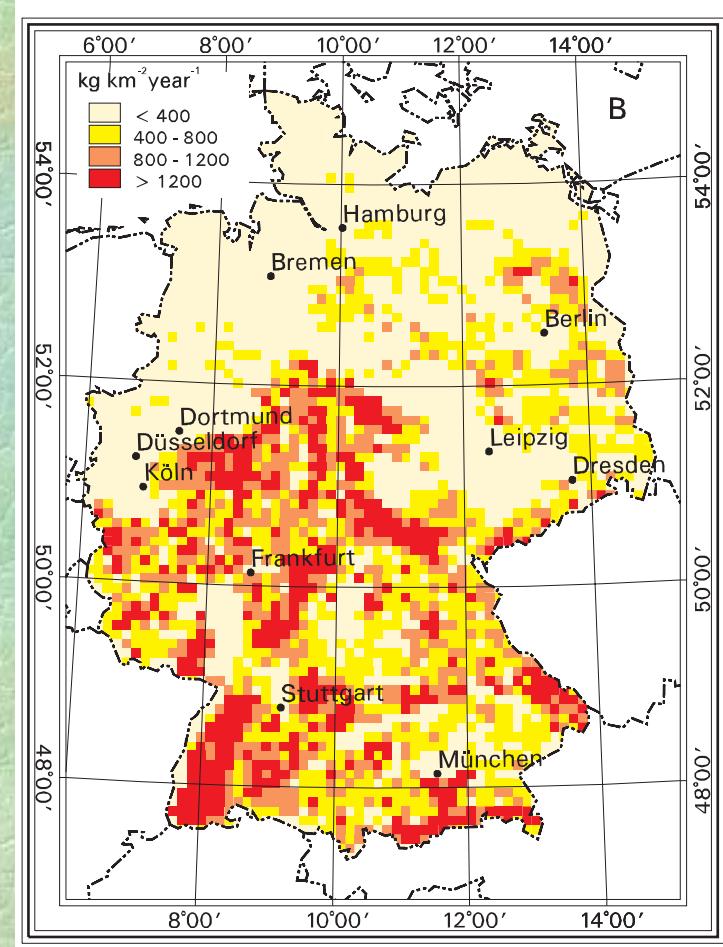
Quelle anthropogene Emissionen: IER, Stuttgart

BVOC Emissionen (10jähriges Mittel 1994 - 2003)

Isoprene

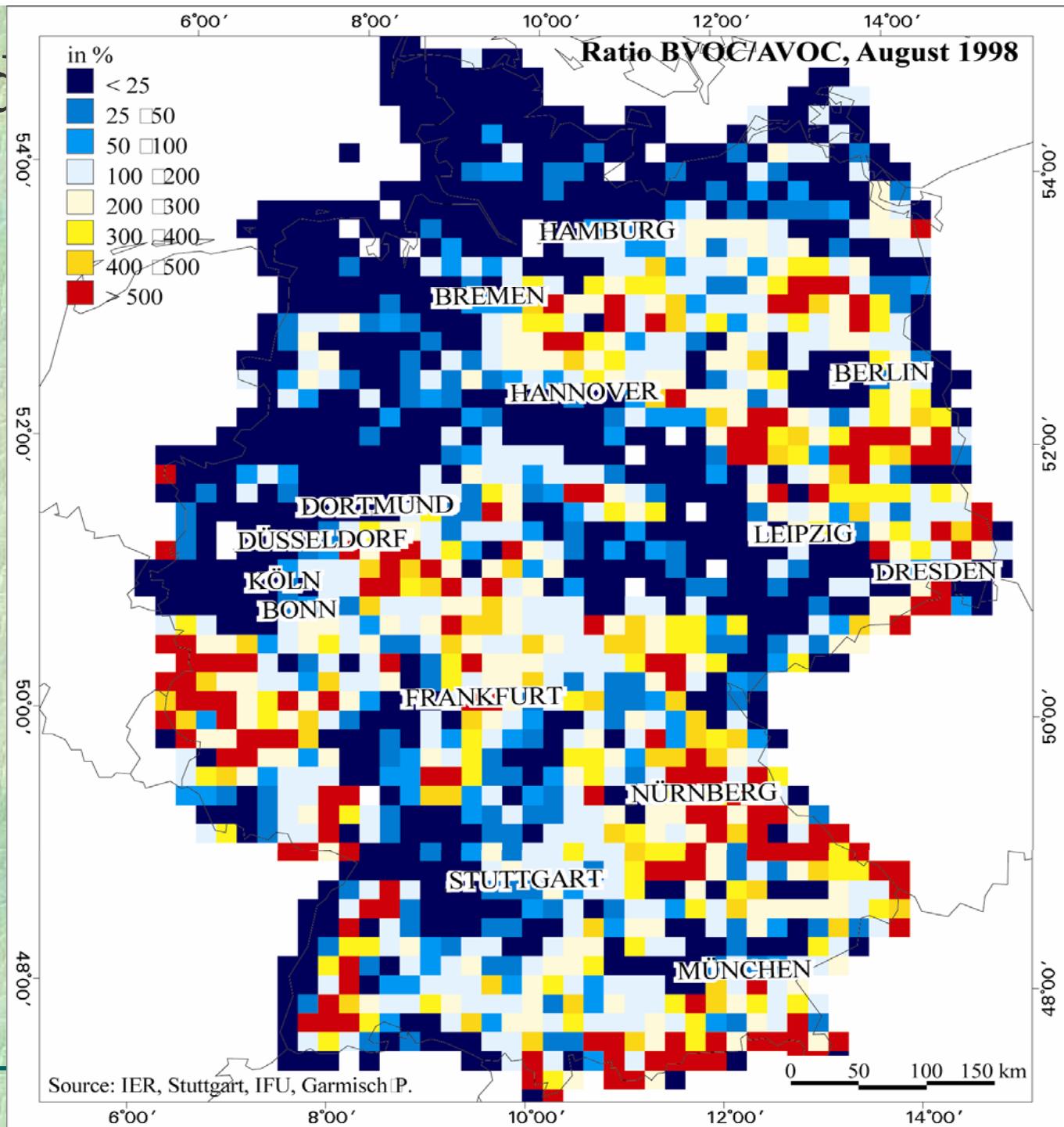


Σ -Monoterpenes



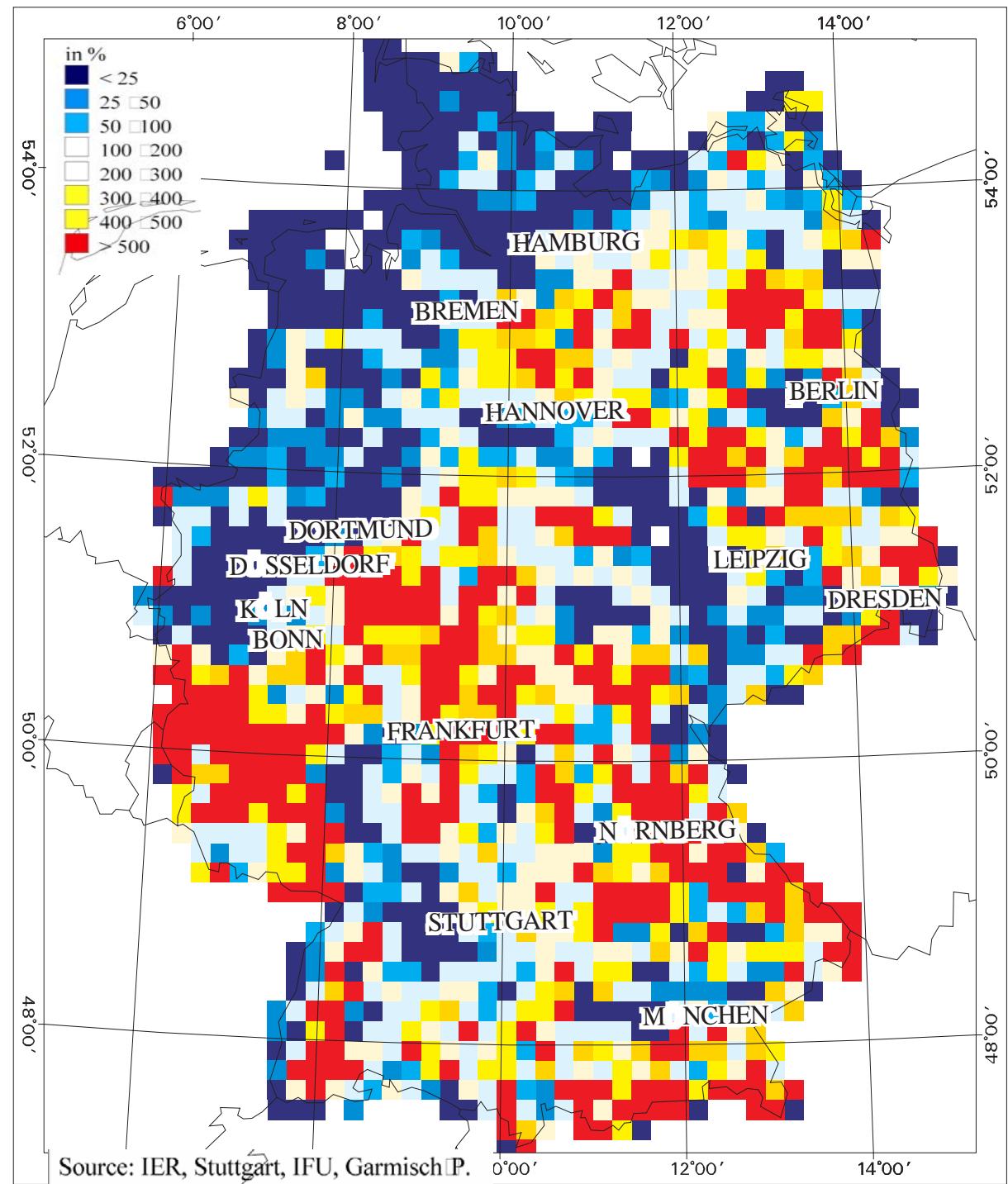
BVOC und AVOC Emissionen 1998

(ohne Reaktivität)

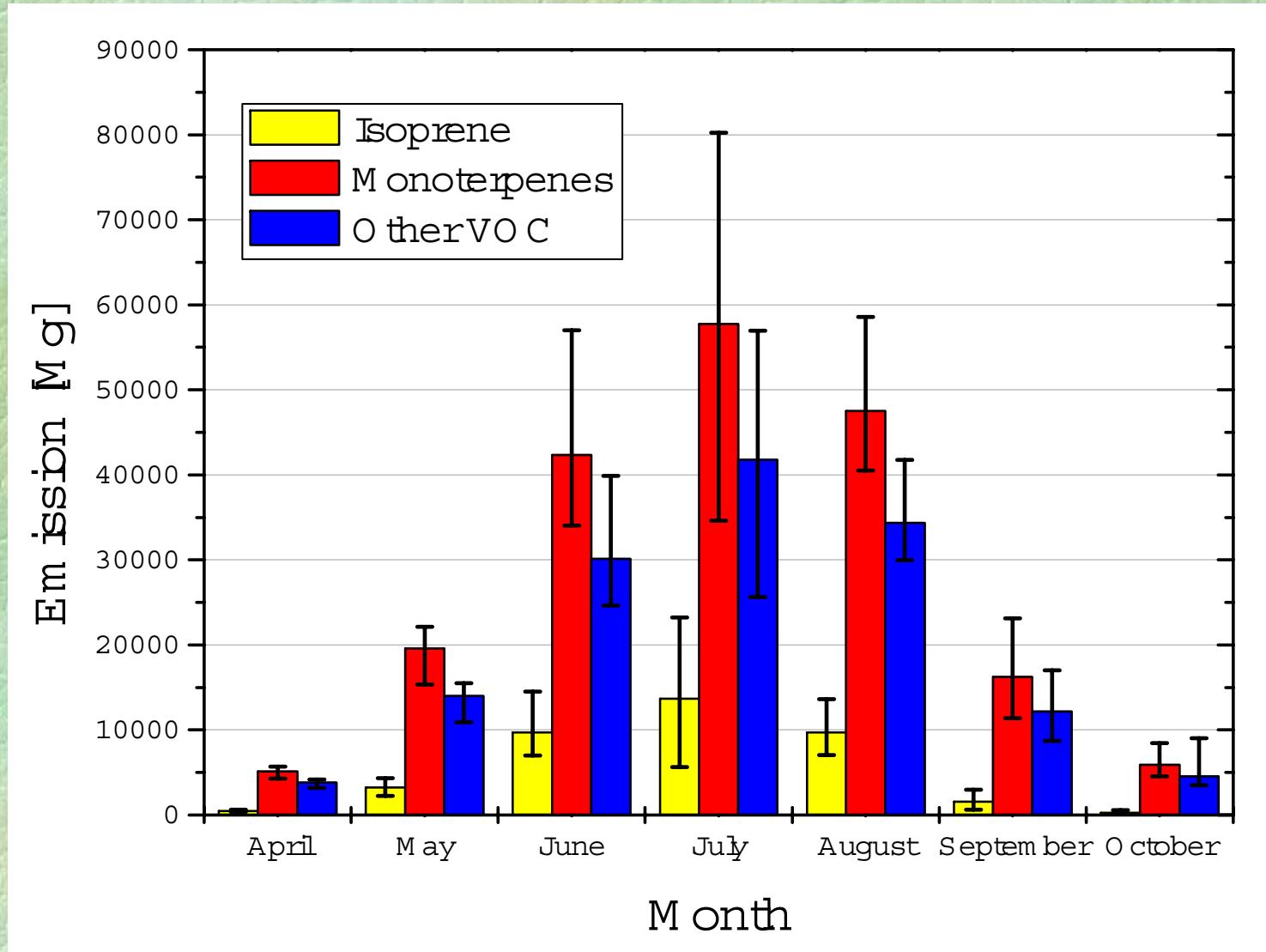


BVOC und AVOC Emissionen 1998

(mit Reaktivitäten,
nach Carter et al.
1994)



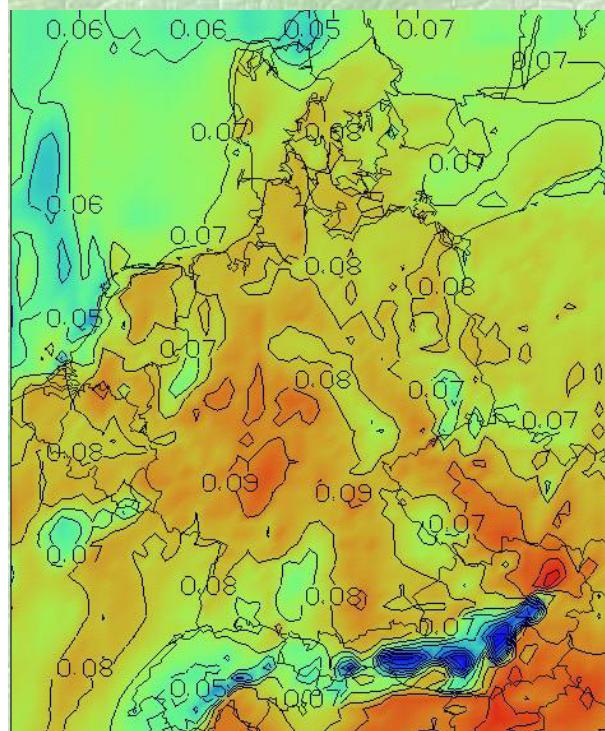
BVOC Split in Deutschland



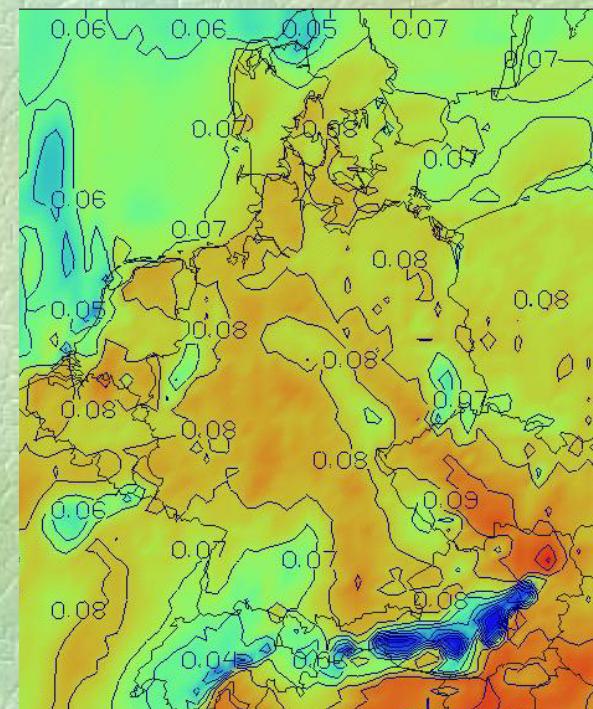
BVOC und Ozon

MCCM-Simulation

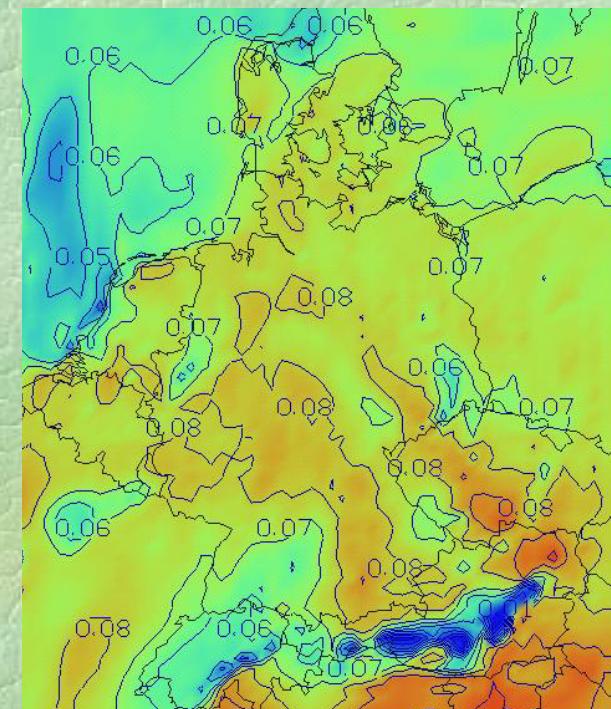
+ BVOC + BNO



- BVOC + BNO



- BVOC - BNO



13 Juli 1998; 13:00 Uhr, R. Forkel, IMK-IFU

VOC und Sekundäres Aerosol (SOA)

Alkane:

vernachlässigbar, z.B. n-octan 0,001%

Alkene:

Isoprene – vernachlässigbar

1-octene, 1-decene, ocimene – wenige Prozent

α -, β -Pinen und Limonen – 30-40%

trans-caryophyllene – bis zu 100%

Oxygenierte Verbindungen:

es gibt kaum Informationen darüber aber:

Partikelbildung ist bei der Reaktion von O₃ + Vinyl-Ether sowie (di)ethylene-glycol(di)vinyl-Ether beobachtet worden

Literatur:

- R. G. Derwent and M.E. Jenkin, ``Hydrocarbons and the Long-Range Transport of Ozone and PAN Across Europe," *Atmospheric Environment*, 25A, No. 8, 1661-1678, (1991).
- Carter, William P. L., ``Development of Ozone Reactivity Scales for Volatile Organic Compounds," *J. Air & Waste Manage. Assoc.*, 44: 881-899, (1994).
- B.J. Finlayson-Pitts, J.N. Pitts Jr, ``Atmospheric Chemistry of Tropospheric Ozone Formation: Scientific and Regulatory Implications," *J. Air Waste Manage. Assoc.* 43:1091-1100, (1993).
- R.G. Derwent, M.E. Jenkin, S.M. Saunders, M.J. Pilling, ``Characterization of the Reactivities of Volatile Organic Compounds Using a Master Chemical Mechanism," *J. Air and Waste Manage. Assoc.*, 51, 699-707, (2001).
- W.R. Stockwell, H. Geiger, K.H. Becker, ``Estimation of Incremental Reactivities for Multiple Day Scenarios: An Application to Ethane and Dimethyloxymethane," *Atmospheric Environment*, 35, 929-939, (2001).