

Modellrechnungen zur troposphärischen Multiphasenchemie mittels CAPRAM2.4

B. Ervens, O. Böge, R. Wolke und H. Herrmann

Institut für Troposphärenforschung e.V.,
Permoserstr. 15, D-04303 Leipzig

Zur Beschreibung troposphärischer Multiphasenprozesse wird ein Boxmodell verwendet. Die Chemie in der Gasphase wird durch RACM [1] beschrieben. Der verwendete Flüssigphasenmechanismus CAPRAM2.4 (**C**hemical **A**queous **P**hase **R**adical **M**echanism) stellt die weiterentwickelte Version des CAPRAM2.3-Mechanismus [2] dar. Zur Vervollständigung der Chemie organischer C₂-Spezies in der flüssigen Phase wurden -zusätzlich zu den in CAPRAM2.3 enthaltenen- Reaktionen von Oxalsäure/Oxalat und Glyoxal aufgenommen.

Zusätzlich zu dem Basismechanismus CAPRAM2.4 wurde ein Reaktionsmodul entwickelt, in dem die Chemie aromatischer Verbindungen in der flüssigen Phase in belasteten Szenarien beschrieben wird. Hierfür wurden nicht nur Reaktionen der Spezies im Tropfen berücksichtigt, sondern auch die Aufnahmeprozesse der Aromaten aus der Gasphase in die flüssige Phase mithilfe der Henry-Konstanten, Gasphasendiffusions- und Massenakkommodationskoeffizienten formuliert. Die Auswirkungen der Berücksichtigung der Multiphasen-Aromatenchemie werden diskutiert.

- [1] Stockwell, W. R., Kirchner, F., Kuhn, M. and Seefeld, S., A new mechanism for regional atmospheric chemistry modeling, *J. Geophys. Res.*, Vol. 102, No. D22, **102**, 25847-25879, 1997.
- [2] Herrmann, H., Ervens, B., Jacobi, H.-W., Wolke, R., Nowacki, P. and Zellner, R., CAPRAM2.3: A Chemical Aqueous Phase Radical Mechanism for Tropospheric Chemistry, submitted to *J. Atm. Chem.*, 1998