### NUMERISCHE SIMULATIONEN ZUR WIRKUNG DES AEROSOLS AUF DIE TROPOSPHÄRISCHE CHEMIE UND DIE SICHTWEITE

Zur Erlangung des akademischen Grades eines DOKTORS DER NATURWISSENSCHAFTEN von der Fakultät für Physik der Universität Karlsruhe (TH) genehmigte

### DISSERTATION

von

Dipl. Met. Nicole Riemer aus Karlsruhe

Tag der mündlichen Prüfung: Referent: Korreferent: 15. Februar 2002 Prof. Dr. F. Fiedler Prof. Dr. H. Fischer

#### Zusammenfassung

Das mesoskalige Modellsystem KAMM/DRAIS wird im Rahmen dieser Arbeit um das Aerosolmodul MADE erweitert, um das troposphärische Aerosol sowohl bezüglich seiner Zusammensetzung als auch bezüglich seiner Größenverteilung möglichst detailliert zu behandeln. Insbesondere wird das Aerosolmodul MADE um die Behandlung der Substanz Ruß ergänzt. Hierbei wird der Alterungsprozess von Ruß durch Koagulation der Rußteilchen mit löslichen Partikeln und durch Kondensation von Schwefelsäure auf den Rußpartikeln, wodurch der Ruß von einer externen in eine interne Mischung übergeht und seine hygroskopischen Eigenschaften ändert, parametrisiert.

Mit dem so erweiterten Modellsystem wird für zwei Themenschwerpunkte die Wirkung des Aerosols auf die physikalischen und chemischen Bedingungen in der Troposphäre untersucht. Beim ersten Themenschwerpunkt handelt es sich um die Quantifizierung des Einflusses der heterogenen Hydrolyse von Distickstoffpentoxid ( $N_2O_5$ ) auf die troposphärische Chemie bei Sommersmogbedingungen. Diese Reaktion ist von besonderer Bedeutung, da sie in den atmosphärischen Stickstoffhaushalt eingreift, und sich damit auch auf die Photochemie auswirken kann. Die Untersuchungen zeigen, dass es zur Beurteilung des Einflusses der Hydrolyse von  $N_2O_5$  nicht ausreicht, nur die chemischen Prozesse allein zu betrachten, sondern dass ebenso die Wirkung von Transportprozessen miteinbezogen werden muss. Es zeigt sich außerdem, dass Substanzen, die bei der nächtlichen Chemie eine Rolle spielen, stark davon beeinflusst werden, ob die Hydrolyse berücksichtigt wird oder nicht, während diese Reaktion für die Ozonkonzentration am Tage eher von untergeordneter Bedeutung ist. So wird Stickstofftrioxid ( $NO_3$ ) bei Berücksichtigung der Hydrolyse im Mittel um 70 % reduziert, während die Unterschiede beim Ozon maximal 5 % betragen.

Im zweiten Themenschwerpunkt werden die optischen Eigenschaften des Aerosols behandelt. Auf der Basis der berechneten Aerosolverteilungen wird gezeigt, wie sich die Extinktionskoeffizienten ableiten lassen. Ausgehend davon wird ein Verfahren zur Bestimmung der Sichtweite entwickelt. Es zeigt sich, dass es bei der Bestimmung der Sichtweite wichtig ist, der räumlichen Variabilität des Extinktionskoeffizienten entlang des Sehstrahls Rechnung zu tragen. Schließlich wird die Kenntnis der Extinktionskoeffizienten dazu eingesetzt, die Auswirkungen des Aerosols auf die an der Erdoberfläche ankommende solare Strahlung zu untersuchen. Die Ergebnisse zeigen, dass die Strahlungsflussdichte am Boden unter den betrachteten Bedingungen um maximal 25 W m<sup>-2</sup> verringert wird. Von diesem Effekt sind 30 % auf die Wirkung der Rußpartikel zurückzuführen.

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung				
<b>2</b>	Gru	Indlagen 11			
	2.1	Leben	slauf des troposphärischen Aerosols	11	
	2.2	Bedeutung des troposphärischen Aerosols		15	
	2.3	Modellierung von Aerosolprozessen		18	
3	Mo	odellbeschreibung			
	3.1	Das M	Iodellsystem KAMM/DRAIS	23	
	3.2	Das A	erosoldynamikmodul MADE	25	
		3.2.1	Mathematische Beschreibung	26	
		3.2.2	Die Aerosoldynamikgleichung	30	
		3.2.3	Formulierung der aerosoldynamischen Prozesse in MADE	31	
		3.2.4	Formulierung der Aerosolchemie in MADE	48	
	3.3	Nume	rische Lösungsverfahren in MADE	55	
		3.3.1	Lösung der Gleichungen für das nullte Moment	56	
		3.3.2	Lösung der Gleichungen für die Massendichte	57	
		3.3.3	Kopplung des Moduls MADE an KAMM/DRAIS $\ .\ .\ .\ .$ .	58	
4 Modellierung heterogener Reaktion		dellier	ung heterogener Reaktionen im regionalen Bereich	61	
	4.1	Berech	nnung der Raten heterogener Reaktionen	61	
	4.2	2 Hydrolyse von $N_2O_5$ an flüssigen Aerosolpartikeln		65	
		4.2.1	Boxmodellsimulationen	68	
		4.2.2	Eindimensionale (1D-) Simulationen	70	
		4.2.3	Dreidimensionale (3D-) Simulationen	80	

<b>5</b>	Behandlung von Ruß 9				
	5.1	Erweiterung des Modells um die Substanz Ruß	94		
	5.2 Ergebnisse von eindimensionalen (1D-) Simulationen $\ldots$		98		
	5.3	Ergebnisse einer dreidimensionalen (3D-) Simulation	102		
6	Mo	dellierung der optischen Eigenschaften von Aerosolpartikeln	115		
	6.1	Die Sichtweite	115		
		6.1.1 Herleitung der Koschmieder Formel	118		
		6.1.2 Berechnung der Sichtweite	121		
	6.2	6.2 Modellierung des Strahlungstransports			
		6.2.1 Das Strahlungsmodell STAR	131		
		6.2.2 Einfluss auf die Strahlungsflussdichte	131		
		6.2.3 Einfluss auf die Photolyseraten	135		
	6.3	Schlussfolgerungen	136		
7	$\mathbf{Zus}$	ammenfassung	139		
8	Symbolverzeichnis 14				
	Lite	eraturverzeichnis	153		
$\mathbf{A}$	Anł	hang	173		
	A.1	Liste der Substanzen in RADM2	173		
	A.2	Liste der Reaktionen	175		
		A.2.1 Photolysereaktionen	175		
		A.2.2 Thermische Reaktionen	176		
	A.3	Eingabedaten für die Boxmodellrechnungen im Standardfall	180		
	A.4	Berechnung der Koagulationskoeffizienten	181		
		A.4.1 Kontinuumsregime	181		
		A.4.2 Freimolekulares Regime	182		

\_\_\_\_\_

## 1 Einleitung

Mit fortschreitender Industrialisierung verändern anthropogene Emissionen in zunehmendem Maße die chemische Zusammensetzung der Atmosphäre. Die Atmosphärenforschung konzentrierte sich für lange Zeit auf die Untersuchung der Ausbreitung und Umwandlung von gasförmigen Luftbeimengungen. Diese Schwerpunktlegung wurde durch Phänomene wie den Sommersmog, der in den 1940er Jahren zu neuartigen Pflanzenschäden in Südkalifornien führte, begünstigt. In den folgenden Jahren haben zahlreiche Studien zum Verständnis dieser photochemischen Prozesse beigetragen (Fiedler 1998, Fiedler 2000, Poppe und Zimmermann 2000, Vogel et al. 2000). Chemie-Transport-Modelle haben inzwischen ein Stadium erreicht, das die Prognose von Sommersmogepisoden erlaubt (Jakob et al. 2001, Brandt et al. 2001, Kiilsholm et al. 2001) und es weiterhin möglich macht, in Verbindung mit *in-situ*-Messungen zur Entscheidungsfindung in umweltpolitischen Fragen beizutragen (Obermeier et al. 1995).

In der Atmosphäre sind jedoch außer den gasförmigen Luftbeimengungen auch gewaltige Mengen an festem und flüssigem Material, dem atmosphärischen Aerosol, suspendiert. Der Begriff Aerosol bedeutet wörtlich "in Luft gelöst" und bezeichnet im strengen Sinne ein Trägerfluid mit darin suspendierten Partikeln. Häufig wird der Begriff jedoch für die Partikel selbst verwendet. Der Kenntnisstand bezüglich der Vorgänge in der Aerosolphase weist im Moment noch wesentlich größere Lücken auf als der der Gasphase. Hohe Anforderungen werden an die Messtechnik gestellt, da zur umfassenden Charakterisierung des atmosphärischen Aerosols nicht nur die Messung der Masse und der chemischen Zusammensetzung ausreicht, sondern auch weitere Parameter, wie die Größenverteilung und der Mischungszustand des Aerosols, bestimmt werden müssen. Die Beschreibung des atmosphärischen Aerosols mittels dreidimensionaler Modellierung erfolgt im Moment ebenfalls noch weniger detailliert als die der Gasphasensubstanzen. In den letzten Jahren ist die Bedeutung des atmosphärischen Aerosols jedoch immer mehr ins wissenschaftliche Interesse gerückt.

Die Wirkung der atmosphärischen Aerosolpartikel auf die Luftqualität erstreckt sich über einen weiten Bereich räumlicher Skalen und greift in zahlreiche Prozesse im

#### System der Atmosphäre ein.

Das atmosphärische Aerosol wirkt sich zum einen auf den Strahlungshaushalt der Atmosphäre aus. Am einfachsten zu beobachten ist dies an der reduzierten Sichtweite in belasteten Luftmassen. Aerosolpartikel verursachen einen direkten Klimaantrieb, indem sie kurzwellige Sonnenstrahlung zurückstreuen und Strahlung absorbieren (IPCC (Intergovernmental Panel of Climate Change) 2001). Weiterhin sind Aerosolpartikel bei den Prozessen der Wolkenbildung wichtig, was gleichzeitig mit einem indirekten Klimaantrieb verbunden ist.

Da ein Großteil des Aerosols, die so genannten Sekundärpartikel, aus gasförmigen Vorläufersubstanzen gebildet wird, besteht eine enge Verbindung zwischen Gas- und Aerosolphase. An der Oberfläche des atmosphärischen Aerosols laufen weiterhin zahlreiche chemische und physikalische Umwandlungen ab, die sich auf den Spurenstoffhaushalt auswirken. Die atmosphärische Chemie kann daher nur verstanden werden, wenn Gasphase und Aerosolphase gekoppelt betrachtet werden. Die Prozesse, die zur Entstehung des Ozonlochs in der Stratosphäre über der Antarktis führen, sind ein Beispiel dafür (Fischer 1994). Doch auch in der Troposphäre laufen heterogene Reaktionen ab, deren Einfluss auf die troposphärische Chemie Gegenstand aktueller Forschung ist (Schurath 1999).

Aktuelle epidemologische Studien zeigen, dass durch atmosphärische Aerosolpartikel akute und langfristige gesundheitliche Effekte verursacht werden können (Dockery und Pope 1996, Pope und Dockery 1996, Lippmann et al. 2000, Wichmann et al. 2000). Bei erhöhter Aerosolbelastung steigt die Zahl der Menschen mit Erkrankungen der Atemwege und des Herz-Kreislauf-Systems. Die Häufigkeit der Asthmaanfälle nimmt zu, vorzeitige Todesfälle treten auf. Allerdings sind die genauen Mechanismen, die zu einer Schädigung führen, im Moment noch ungeklärt. So wird beispielsweise diskutiert, ob die Größe der Partikel allein ausschlaggebend für die gesundheitsgefährdende Wirkung ist oder ob und in welchem Maße die Zusammensetzung der Partikel eine entscheidende Rolle spielt. Die Europäische Kommission hat aufgrund dieser Risiken im April 1999 die Richtlinie (1999/30/EG) verabschiedet. Diese nennt Grenzwerte für die Partikelmasse, die wesentlich tiefer liegen als die Werte, die bisher in Deutschland galten. Diese Grenzwerte werden in Deutschland und in anderen europäischen Ländern zur Zeit in vielen Gebieten überschritten. Es dürfte schwierig werden, die neuen EU-Werte in Deutschland einzuhalten, weil über viele Quellen und Verbreitungsmuster der Aerosolpartikel noch zu wenig bekannt ist. Das Umweltbundesamt spricht sich in diesem Zusammenhang auch für den Einbau von Partikelfiltern in Kraftfahrzeugen aus.

Wie bei den Prozessen in der Gasphase, bietet die numerische Modellierung mit einem komplexen Chemie-Transportmodell auch für die Aerosolphase eine Möglichkeit, Erkenntnisse bezüglich der Entstehung und Ausbreitung von Aerosolpartikeln und ihrer Wechselwirkung mit der Umgebung zu gewinnen. Dabei ist es wichtig, sowohl die Zusammensetzung als auch die Größenverteilung der Partikel zu berücksichtigen.

Ziel dieser Arbeit ist es, mit Hilfe eines numerischen Modells die Aerosolverteilung in der Mesoskala zu beschreiben und ihre Wirkung auf die chemische Zusammensetzung der Troposphäre und auf den Strahlungshaushalt zu untersuchen.

Das regionale Modellsystem KAMM <sup>1</sup>/DRAIS <sup>2</sup> (Tangermann-Dlugi und Fiedler 1983, Nester et al. 1987, Adrian und Fiedler 1991, Vogel et al. 1995), in Verbindung mit dem Aerosolmodell MADE<sup>3</sup> (Binkowski und Shankar 1995, Ackermann et al. 1998) stellt dafür eine eine geeignete Basis dar. Eine Beschreibung des Modellsystems findet sich in Kapitel 3. Eine allgemeine Übersicht über den aktuellen Stand der Modellierung von Aerosolprozessen wird in Kapitel 2.3 gegeben.

Bezüglich der untersuchten Fragestellungen werden zwei Schwerpunkte gesetzt. Der erste Schwerpunkt betrifft die Untersuchung der Wechselwirkung der Aerosolphase und der Gasphase aufgrund einer heterogenen Reaktion, der Hydrolyse von  $N_2O_5$  an der Oberfläche von flüssigen Aerosolteilchen. Während für eine Reihe der identifizierten, an der Oberfläche von Aersolen ablaufenden Reaktionen gezeigt werden konnte, dass sie für die atmosphärische Chemie nicht relevant sind (Saathoff et al. 2001), ist die Rolle der heterogenen Hydrolyse von N<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Gegenstand aktueller Forschung. Dentener und Crutzen (1993) leiten aus ihrer Studie einen signifikanten Einfluss dieser Reaktion auf die troposphärische Chemie ab. Die besondere Bedeutung dieser Reaktion liegt darin, dass sie in den Stickoxidhaushalt der Troposphäre eingreift und somit modifizierend auf die Bildung von Photooxidantien wirken kann. In dieser Arbeit wird die Relevanz dieser Reaktion für die troposphärische Chemie im regionalen Bereich untersucht. Dabei fließen aktuelle Labordaten für die Reaktionswahrscheinlichkeiten (Wahner et al. 1998, Mentel et al. 1999) und im Gegensatz zu Dentener und Crutzen (1993) berechnete Aerosolverteilungen ein. Die Ergebnisse dieser Untersuchung werden im Kapitel 4 dargelegt.

Der zweite Schwerpunkt besteht in der Erweiterung des Aerosolmoduls MADE um die Substanz Ruß (Kapitel 5). Bisher waren in MADE als chemische Substanzen

 $<sup>{}^{1}\</sup>mathbf{K}$ arlsruher  $\mathbf{A}$ tmosphärisches  $\mathbf{M}$ esoskaliges  $\mathbf{M}$ odell

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Dreidimensionales Regionales Ausbreitungs Immissions Simulationsmodell

 $<sup>{}^{3}\</sup>mathbf{M}$ odales  $\mathbf{A}$ erosol $\mathbf{d}$ ynamikmodell für  $\mathbf{E}$ uropa

Ammonium, Sulfat, Nitrat und Wasser vorgesehen. Die primär emittierte Substanz Ruß stellt einen wichtigen Bestandteil des troposphärischen Aerosols dar und sollte daher im Rahmen eines numerischen Ausbreitungsmodells repräsentiert werden. Diese Erweiterung liefert einen wesentlichen Beitrag zur vollständigeren Behandlung des troposphärischen Aerosols mit einem numerischen Modell. Dabei wird besonders auf die Parametrisierung des Alterungsprozesses von Ruß Wert gelegt, durch den die hygroskopischen Eigenschaften der Rußpartikel verändert werden. Dies wirkt sich auf das Wachstumsverhalten der Rußpartikel, auf ihre optischen Eigenschaften und letztlich auf ihre Lebensdauer aus.

Aus den mit dem so erweiterten Modellsystem berechneten Aerosolverteilungen für das Modellgebiet Baden-Württemberg werden anschließend die optischen Eigenschaften des Aerosols bestimmt (Kapitel 6). Darauf aufbauend wird ein Verfahren zur Bestimmung der Sichtweite aus den berechneten Aerosolverteilungen entwickelt (Kapitel 6.1). Abschließend wird der durch die Aerosolbelastung verursachte Einfluss auf die Photolyseraten sowie die Änderung des Strahlungsflusses am Erdboden untersucht (Kapitel 6.2). Hierbei wird der Einfluss von Ruß quantifiziert.

### 7 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde das Modellsystem KAMM/DRAIS um das Aerosolmodul MADE erweitert. Dies stellt die Basis für weiterführende Modellsimulationen dar, um die Wirkung des troposphärischen Aerosols in der Mesoskala bezüglich verschiedener Aspekte abzuschätzen.

Das von Ackermann et al. (1998) übernommene Aerosolmodul MADE wurde im Rahmen dieser Arbeit um die Substanz Ruß ergänzt. Da diese Substanz ein wichtiger Bestandteil des troposphärischen Aerosols ist, leistet diese Weiterentwicklung einen wesentlichen Beitrag dafür, das troposphärische Aerosol im regionalen Bereich mit einem Modell realistischer zu beschreiben.

Bei der Behandlung von Ruß stellt sich das Problem, dass der Alterungsprozess von Ruß, durch den der Ruß von einer externen in die interne Mischung übergeht und seine hygroskopischen Eigenschaften ändert, beschrieben werden muss. Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Methode entwickelt, bei der sich dieser Alterungsprozess durch Koagulation der Rußpartikel mit Partikeln, die aus löslichen Substanzen bestehen und durch Kondensation von Schwefelsäuredampf auf den Rußpartikeln vollziehen kann. Wie Studien mit einer 1D-Version des Modellsystems zeigen, erweist sich die Kondensation unter den gegebenen Bedingungen dabei als der effektivere Prozess. Mit der erweiterten Modellversion wurde eine dreidimensionale Simulation für sommerliche Verhältnisse für das Modellgebiet Baden-Württemberg durchgeführt. Die maximalen Rußkonzentrationen werden hier am Morgen in der Nähe von Mannheim erreicht und betragen 10  $\mu g m^{-3}$ . Tagsüber liegen die Werte im Modellgebiet unterhalb von 2  $\mu g m^{-3}$ . Diese Werte befinden sich in einer Größenordnung, die Messungen in Mitteleuropa bestätigen. Der Tagesgang der Rußmasse in externer Mischung (d.h. der hydrophobe Anteil des Rußes) weist ein charakteristisches Maximum am Morgen und am Abend auf. Auch dieses Verhalten lässt sich in Messungen wiederfinden.

Die Wirkung des troposphärischen Aerosols auf das System der Troposphäre wurde mit dem Modellsystem für zwei Schwerpunkte untersucht. Beim ersten Schwerpunkt handelt es sich um die Untersuchung des Einflusses der heterogenen Hydrolyse von  $N_2O_5$  auf die troposphärische Chemie.  $N_2O_5$  ist eine Substanz, die ihre maximalen Konzentrationen nachts aufweist. Da diese Reaktion in den Stickstoffhaushalt der troposphärischen Chemie eingreift, liegt die Vermutung nahe, dass die Reaktion auch Auswirkungen auf die Photochemie haben kann. Zur Untersuchung dieser Hypothese wurden Simulationen mit einem Boxmodell, eindimensionale Simulationen und dreidimensionale Simulationen durchgeführt. Dabei wurden verschiedene Emissionsszenarien und Parametrisierungen der heterogenen Hydrolyse von  $N_2O_5$ betrachtet.

Beschränkt man sich nur auf die Ergebnisse der Boxmodellrechnungen und lässt damit die Effekte des Transports außer Betracht, ergibt sich, dass die Ozonkonzentration stark davon abhängt, ob die Hydrolyse von  $N_2O_5$  berücksichtigt wird. Dabei hängt die Sensitivität stark vom photochemischen Regime ab. Berücksichtigt man dagegen außerdem die turbulente Diffusion und die Advektion, zeigt sich, dass die Auswirkungen auf die Ozonkonzentration am Tage relativ gering sind (kleiner als 5 % für die dreidimensionale Simulation). Hier wird deutlich, dass es zur Beurteilung des Einflusses der heterogenen Reaktion nicht ausreicht, nur die chemischen Prozesse allein zu betrachten, sondern dass ebenso die Wirkung von Transportprozessen miteinbezogen werden muss.

Konzentrationen von Stoffen der nächtlichen Chemie, wie  $N_2O_5$  und  $NO_3$  werden dagegen auch in der dreidimensionalen Simulation stark davon beeinflusst, ob die Hydrolyse berücksichtigt wird oder nicht. Hier ergeben sich Unterschiede von bis zu 85 % für  $N_2O_5$  und 80 % für  $NO_3$ . Große Unterschiede ergeben sich außerdem für HNO<sub>3</sub> und den Nitratgehalt des Aerosols. Da  $NO_3$  ein wichtiges Radikal der nächtlichen Chemie ist, was unter anderem den Abbau der VOC kontrolliert, lässt die hier durchgeführte Untersuchung den Schluss zu, dass es für eine adäquate Beschreibung der troposphärischen Chemie entscheidend ist, die heterogene Hydrolyse von  $N_2O_5$  möglichst richtig zu erfassen, obwohl sie für die Ozonkonzentration bei Sommersmogbedingungen nur von untergeordneter Bedeutung ist.

Im zweiten Schwerpunkt werden die optischen Eigenschaften des Aerosols behandelt. Auf der Basis der berechneten Aerosolverteilungen wurde gezeigt, wie sich auf die Extinktionskoeffizienten schließen lässt. Dazu wurden Mie-Rechnungen eingesetzt. Die Kenntnis des dreidimensionalen Felds der Extinktionskoeffizienten wurde im Modellgebiet dazu verwendet, ein Verfahren zur Bestimmung der Sichtweite zu entwickeln. Es zeigt sich, dass die zeitliche Entwicklung der Sichtweite stark von der Topografie bestimmt wird. Während sich bei der untersuchten Fallstudie auf einem Berg wie der Hornisgrinde im Tagesverlauf eine Sichtverschlechterung ergibt, steigt die Sichtweite im Rheintal. Dies ist mit der zeitlichen Entwicklung der Grenzschicht zu erklären, die verursacht, dass Partikel im Laufe des Tages in höhere Schichten transportiert werden und damit am Boden eine Verdünnung der Partikelkonzentration erzielt wird, während sich die Partikelkonzentration in höheren Schichten erhöht.

Außerdem wurde gezeigt, dass die Bestimmung der Sichtweite der räumlichen Variabilität der Extinktionskoeffizienten Rechnung getragen werden muss. Wird lediglich der Extinktionskoeffizient des Punktes, an dem die Sichtweite bestimmt werden soll, zur Bestimmung der Sichtweite herangezogen, kann das Ergebnis von der detaillierten Betrachtung stark abweichen.

Die Kenntnis der Extinktionskoeffizienten wurde auch dazu eingesetzt, die Auswirkungen des Aerosols auf die an der Erdoberfläche ankommende solare Strahlung im Wellenlängenbereich zwischen 280 und 700 nm zu quantifizieren. Für die dafür notwendigen Strahlungsrechnungen wurde das Modell STAR (Ruggaber et al. 1994) verwendet, wobei die optischen Eigenschaften der mit KAMM/DRAIS berechneten Aerosolverteilungen einflossen. Die Resultate zeigen, dass durch die Anwesenheit des Aerosols die Strahlungsflussdichte am Boden unter den betrachteten Bedingungen um maximal 25 W m<sup>-2</sup> vermindert wird. 30 % dieses Effekts sind auf die Wirkung der Rußpartikel zurückzuführen. Dieses Ergebnis demonstriert nochmals, dass der Ruß eine wichtige Komponente im atmosphärischen Aerosol darstellt, die in Ausbreitungsmodellen berücksichtigt werden sollte.

Bei der Betrachtung der Photolysefrequenzen ergibt sich, dass durch das Aerosol die Werte der Photolysefrequenzen am Boden erniedrigt werden, in der Schicht von etwa 600 m über Grund dagegen erhöht werden. Die Erhöhung ist auf die Rückstreuung der Aerosolpartikel zurückzuführen, da sich dadurch der aktinische Fluss oberhalb der Aerosolschicht erhöht. Die Differenzen bewegen sich allerdings im Bereich von wenigen Prozent, so dass eine Kopplung des Photolysemodells STAR mit dem Aerosolmodell MADE unter den hier vorliegenden Bedingungen nicht erforderlich ist.

Festzuhalten bleibt, dass die Untersuchung des Einflusses des Aerosols auf die physikalischen und chemischen Bedingungen der Atmosphäre ein breites Anwendungsfeld für das Modellsystem KAMM/DRAIS darstellt. Denkbar ist der Einsatz des Modellsystems beispielsweise für Fragestellungen bezüglich der Abhängigkeit von Nukleationsereignissen von meteorologischen Bedingungen und der Topographie oder bezüglich der Ausbreitung von biogenem Aerosol wie z.B. Pollen. Da die hier vorgestellte Modellversion bisher nur einen Teil des troposphärischen Aerosols beschreibt, wird zu den für zukünftige Anwendungen erforderlichen Erweiterungen daher auch die Behandlung weiterer Spezies im Aerosol, wie z.B. das organische Aerosol oder das Seesalzaerosol, gehören.