



# **Introduction to a specific atmospheric chemistry mechanism**

---

Forschungszentrum Jülich  
Institut für Energie und Klimaforschung  
Troposphäre (IEK-8)  
Franz Rohrer

PS: Learning by doing

# Simulation Atmosphärischer Photochemie In einer großen Reaktionskammer



**Goal:** Investigation of atmospheric processes without interference of transport and emissions





**cylindrical shape 270 m<sup>3</sup>  
diameter 5 m, length 18 m**

**double wall FEP film,  
light transmission 85%**

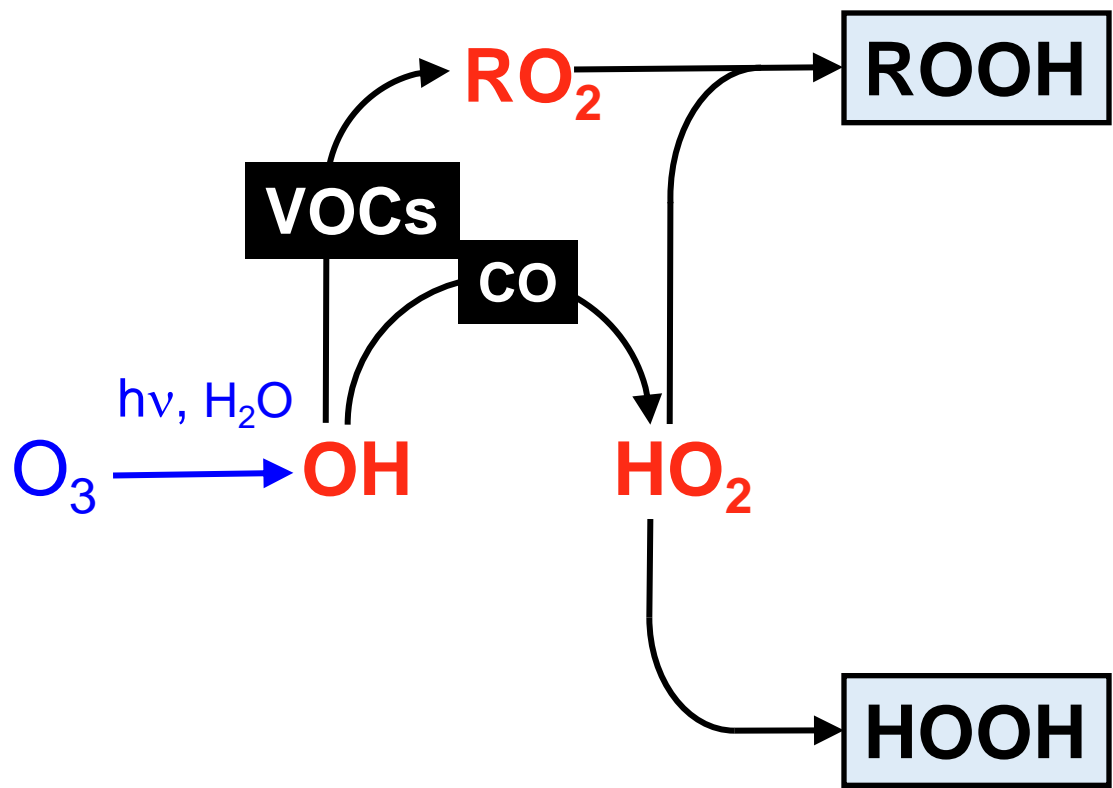


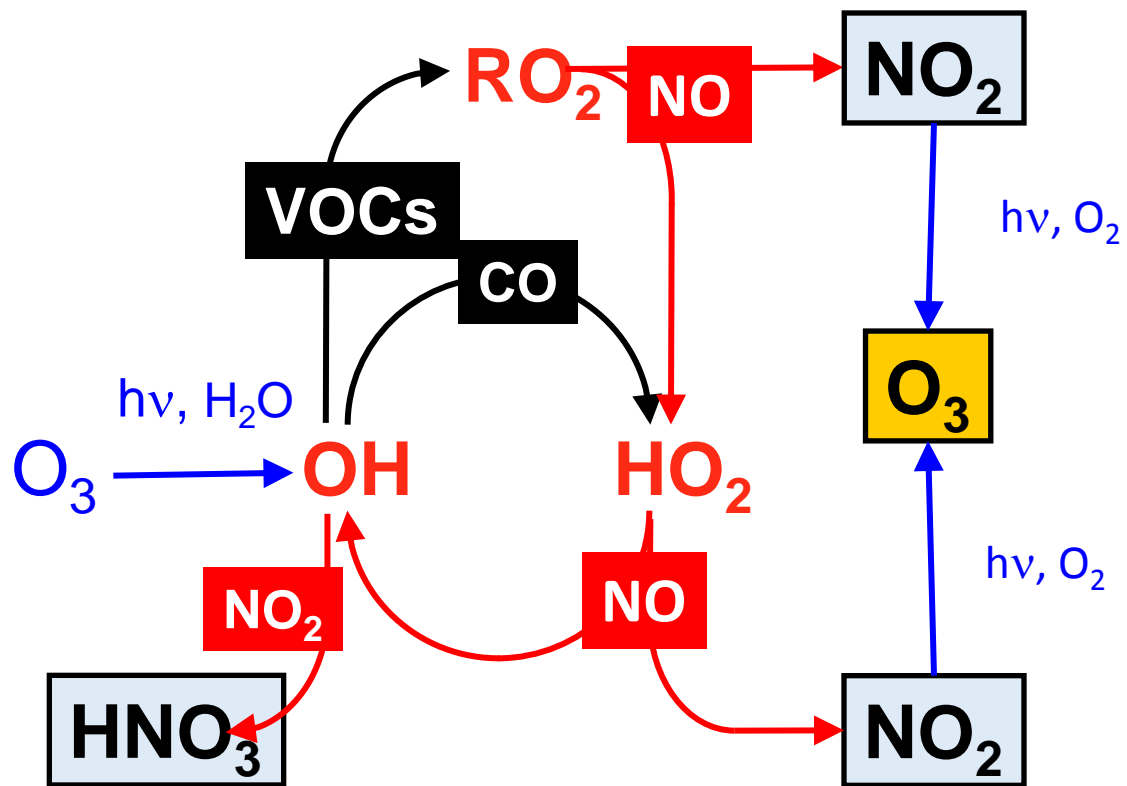
**high purity liquid N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>  
gas replacement flux: 0 – 400 m<sup>3</sup>/h**

# SAPHIR Instrumentation

---

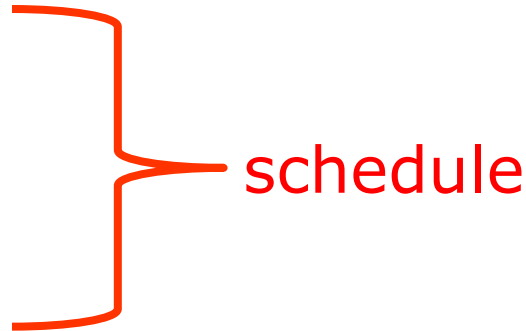
- OH, HO<sub>2</sub>, RO<sub>2</sub> (LIF)
- OH (DOAS)
- KOH
- NO, NO<sub>2</sub>  
(Chemiluminescence)
- O<sub>3</sub> (UV absorption)
- CO (GC)
- Hydrocarbons C<sub>2</sub>...C<sub>6</sub>  
(GC/FID)
- VOC C<sub>2</sub>... C<sub>10</sub> (GC-MS)
- HCHO (Hantzsch)
- HONO (LOPAP)
- HCHO, HONO, NO<sub>3</sub> (DOAS)
- VOC (PTR-MS)
- CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O (CRDS)
- Photolysis frequencies  
(spectralradiometer,  
filterradiometer)
- T, P, convection, r.H.





# Excerpt from SAPHIR lab journal

- SaphirExperimente: Isoprenoxidation mit OH
  - 05:00 UT Ausspülen aus, Zugabe CO<sub>2</sub>
  - 05:30 UT Befeuchtung
  - 06:30 UT Kammerdach auf
  - 07:30 UT Zugabe Ozon (FR)
  - 09:30 UT Zugabe CO (FR)
  - 11:30 UT Zugabe Isopren 7ul (HF)
  - 13:30 UT Zugabe CH<sub>4</sub> (FR)
  - 15:30 UT Kammerdach zu (FR)
  - 16:30 UT Ende Experiment; Ausspülen (FR)



schedule

```
05:00 H.F. ZUSTAND: LindeAnlage: SpülFluss ein, ZwkFluss ein, P(IK)=37Pa, P(ZK)=20Pa
05:00 H.F. ZUSTAND: Mechanik: Dach zu, Schatten auf, Giebel zu, Hubboden unten
05:00 H.F. ZUSTAND: ADAM module und USA Aufzeichnung OK
05:00 H.F. ZUSTAND: Ventilator EIN
05:02 H.F. ÄNDERUNG: ExpFluss EIN
05:07 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe CO2 für 4min
05:30 H.F. ÄNDERUNG: LindeAnlage Befeuchtung SpülFluss EIN, 150m3/h (PDCV701 65%, FCV401 7%)
    Feuchte-IK EIN
06:20 H.F. ÄNDERUNG: Befeuchtung AUS, Feuchte-IK AUS bei RH 67% @ 23°C
06:22 H.F. ÄNDERUNG: SpülFluss AUS, ExpFluss EIN
06:30 H.F. ÄNDERUNG: Kammerdach AUF, Giebel AUF
06:47 P.S. ÄNDERUNG: Start AMS-Messung, ca. 380 mL Fluss in das Instrument

07:30 F.R. ÄNDERUNG: Zugabe 23s Ozon für 50 ppb
(Linde wird am 28. und 31.6. LN2 nachfüllen)
09:30 F.R. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 24s CO 100% 1 SLM für 1500ppb 10s-1
11:30 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 6µl Isopren
13:30 H.F. ÄNDERUNG: GASMISCHANLAGE: CH4 5.5 Air Liquide Zugabe 20 slm für 3.0 min
    für ca. 72 ppm
    (Laut MKS hat Methan einen Korrekturfaktor von 0.72)

15:30 F.R. ÄNDERUNG: Kammerdach zu
16:43 F.R. ÄNDERUNG: Ausspülen mit 200 m3/h (72,12)
```



# Excerpt from SAPHIR lab journal

- SaphirExperimente: Isoprenoxidation mit OH
  - 05:00 UT Ausspülen aus, Zugabe CO<sub>2</sub>
  - 05:30 UT Befeuchtung
  - 06:30 UT Kammerdach auf
  - 07:30 UT Zugabe Ozon (FR)
  - 09:30 UT Zugabe CO (FR)
  - 11:30 UT Zugabe Isopren 7ul (HF)
  - 13:30 UT Zugabe CH<sub>4</sub> (FR)
  - 15:30 UT Kammerdach zu (FR)
  - 16:30 UT Ende Experiment; Ausspülen (FR)

```
05:00 H.F. ZUSTAND: LindeAnlage: SpülFluss ein, ZwkFluss ein, P(IK)=37Pa, P(ZK)=20Pa
05:00 H.F. ZUSTAND: Mechanik: Dach zu, Schatten auf, Giebel zu, Hubboden unten
05:00 H.F. ZUSTAND: ADAM module und USA Aufzeichnung OK
05:00 H.F. ZUSTAND: Ventilator EIN
05:02 H.F. ÄNDERUNG: ExpFluss EIN
05:07 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe CO2 für 4min
05:30 H.F. ÄNDERUNG: LindeAnlage Befeuchtung SpülFluss EIN, 150m^3/h (PDCV701 65%, FCV401 7%)
    Feuchte-IK EIN
06:20 H.F. ÄNDERUNG: Befeuchtung AUS, Feuchte-IK AUS bei RH 67% @ 23°C
06:22 H.F. ÄNDERUNG: SpülFluss AUS, ExpFluss EIN
06:30 H.F. ÄNDERUNG: Kammerdach AUF, Giebel AUF
06:47 P.S. ÄNDERUNG: Start AMS-Messung, ca. 380 mL Fluss in das Instrument

07:30 F.R. ÄNDERUNG: Zugabe 23s Ozon für 50 ppb
(Linde wird am 28. und 31.6. LN2 nachfüllen)
09:30 F.R. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 24s CO 100% 1 SLM für 1500ppb 10s-1
11:30 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 6µl Isopren
13:30 H.F. ÄNDERUNG: GASMISCHANLAGE: CH4 5.5 Air Liquide Zugabe 20 slm für 3.0 min
    für ca. 72 ppm
    (Laut MKS hat Methan einen Korrekturfaktor von 0.72)

15:30 F.R. ÄNDERUNG: Kammerdach zu
16:43 F.R. ÄNDERUNG: Ausspülen mit 200 m³/h (72,12)
```

log

# Excerpt from SAPHIR lab journal

- SaphirExperimente: Isoprenoxidation mit OH
  - 05:00 UT Ausspülen aus, Zugabe CO<sub>2</sub>
  - 05:30 UT Befeuchtung
  - 06:30 UT Kammerdach auf
  - 07:30 UT Zugabe Ozon (FR)
  - 09:30 UT Zugabe CO (FR)
  - 11:30 UT Zugabe Isopren 7ul (HF)
  - 13:30 UT Zugabe CH<sub>4</sub> (FR)
  - 15:30 UT Kammerdach zu (FR)
  - 16:30 UT Ende Experiment; Ausspülen (FR)

05:00 H.F. ZUSTAND: LindeAnlage: SpülFluss ein, ZwkFluss ein, P(IK)=37Pa, P(ZK)=20Pa

05:00 H.F. ZUSTAND: Mechanik: Dach zu, Schatten auf, Giebel zu, Hubboden unten

05:00 H.F. ZUSTAND: ADAM module und USA Aufzeichnung OK

05:00 H.F. ZUSTAND: Ventilator EIN

05:02 H.F. ÄNDERUNG: ExpFluss EIN

05:07 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe CO<sub>2</sub> für 4min

05:30 H.F. ÄNDERUNG: LindeAnlage Befeuchtung SpülFluss EIN, 150m<sup>3</sup>/h (PDCV701 65%, FCV401 7%)  
Feuchte-IK EIN

06:20 H.F. ÄNDERUNG: Befeuchtung AUS, Feuchte-IK AUS bei RH 67% @ 23°C

06:22 H.F. ÄNDERUNG: SpülFluss AUS, ExpFluss EIN

06:30 H.F. ÄNDERUNG: Kammerdach AUF, Giebel AUF

06:47 P.S. ÄNDERUNG: Start AMS-Messung, ca. 380 mL Fluss in das Instrument

07:30 F.R. ÄNDERUNG: Zugabe 23s Ozon für 50 ppb

(Linde wird am 28. und 31.6. LN<sub>2</sub> nachfüllen)

09:30 F.R. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 24s CO 100% 1 SLM für 1500ppb 10s-1

11:30 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 6µl Isopren

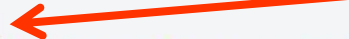
13:30 H.F. ÄNDERUNG: GASMISCHANLAGE: CH<sub>4</sub> 5.5 Air Liquide Zugabe 20 slm für 3.0 min  
für ca. 72 ppm

(Laut MKS hat Methan einen Korrekturfaktor von 0.72)

15:30 F.R. ÄNDERUNG: Kammerdach zu

16:43 F.R. ÄNDERUNG: Ausspülen mit 200 m<sup>3</sup>/h (72,12)

addition of CO<sub>2</sub>



# Excerpt from SAPHIR lab journal

- SaphirExperimente: Isoprenoxidation mit OH
  - 05:00 UT Ausspülen aus, Zugabe CO<sub>2</sub>
  - 05:30 UT Befeuchtung
  - 06:30 UT Kammerdach auf
  - 07:30 UT Zugabe Ozon (FR)
  - 09:30 UT Zugabe CO (FR)
  - 11:30 UT Zugabe Isopren 7ul (HF)
  - 13:30 UT Zugabe CH<sub>4</sub> (FR)
  - 15:30 UT Kammerdach zu (FR)
  - 16:30 UT Ende Experiment; Ausspülen (FR)

```
05:00 H.F. ZUSTAND: LindeAnlage: SpülFluss ein, ZwkFluss ein, P(İK)=37Pa, P(ZK)=20Pa
05:00 H.F. ZUSTAND: Mechanik: Dach zu, Schatten auf, Giebel zu, Hubboden unten
05:00 H.F. ZUSTAND: ADAM module und USA Aufzeichnung OK
05:00 H.F. ZUSTAND: Ventilator EIN
05:02 H.F. ÄNDERUNG: ExpFluss EIN
05:07 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe CO2 für 4min
05:30 H.F. ÄNDERUNG: LindeAnlage Befeuchtung SpülFluss EIN, 150m3/h (PDCV701 65%, FCV401 7%)
    Feuchte-İK EIN
06:20 H.F. ÄNDERUNG: Befeuchtung AUS, Feuchte-İK AUS bei RH 67% @ 23°C
06:22 H.F. ÄNDERUNG: SpülFluss AUS, ExpFluss EIN
06:30 H.F. ÄNDERUNG: Kammerdach AUF, Giebel AUF
06:47 P.S. ÄNDERUNG: Start AMS-Messung, ca. 380 mL Fluss in das Instrument

07:30 F.R. ÄNDERUNG: Zugabe 23s Ozon für 50 ppb
(Linde wird am 28. und 31.6. LN2 nachfüllen)
09:30 F.R. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 24s CO 100% 1 SLM für 1500ppb 10s-1
11:30 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 6µl Isopren
13:30 H.F. ÄNDERUNG: GASMISCHANLAGE: CH4 5.5 Air Liquide Zugabe 20 slm für 3.0 min
    für ca. 72 ppm
    (Laut MKS hat Methan einen Korrekturfaktor von 0.72)

15:30 F.R. ÄNDERUNG: Kammerdach zu
16:43 F.R. ÄNDERUNG: Ausspülen mit 200 m3/h (72,12)
```

humidification



# Excerpt from SAPHIR lab journal

- SaphirExperimente: Isoprenoxidation mit OH
  - 05:00 UT Ausspülen aus, Zugabe CO<sub>2</sub>
  - 05:30 UT Befeuchtung
  - 06:30 UT Kammerdach auf
  - 07:30 UT Zugabe Ozon (FR)
  - 09:30 UT Zugabe CO (FR)
  - 11:30 UT Zugabe Isopren 7ul (HF)
  - 13:30 UT Zugabe CH<sub>4</sub> (FR)
  - 15:30 UT Kammerdach zu (FR)
  - 16:30 UT Ende Experiment; Ausspülen (FR)

```
05:00 H.F. ZUSTAND: LindeAnlage: SpülFluss ein, ZwkFluss ein, P(IK)=37Pa, P(ZK)=20Pa
05:00 H.F. ZUSTAND: Mechanik: Dach zu, Schatten auf, Giebel zu, Hubboden unten
05:00 H.F. ZUSTAND: ADAM module und USA Aufzeichnung OK
05:00 H.F. ZUSTAND: Ventilator EIN
05:02 H.F. ÄNDERUNG: ExpFluss EIN
05:07 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe CO2 für 4min
05:30 H.F. ÄNDERUNG: LindeAnlage Befeuchtung SpülFluss EIN, 150m3/h (PDCV701 65%, FCV401 7%)
    Feuchte-IK EIN
06:20 H.F. ÄNDERUNG: Befeuchtung AUS, Feuchte-IK AUS bei RH 67% @ 23°C
06:22 H.F. ÄNDERUNG: SpülFluss AUS, ExpFluss EIN
06:30 H.F. ÄNDERUNG: Kammerdach AUF, Giebel AUF
06:47 P.S. ÄNDERUNG: Start AMS-Messung, ca. 380 mL Fluss in das Instrument

07:30 F.R. ÄNDERUNG: Zugabe 23s Ozon für 50 ppb
(Linde wird am 28. und 31.6. LN2 nachfüllen)
09:30 F.R. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 24s CO 100% 1 SLM für 1500ppb 10s-1
11:30 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 6µl Isopren
13:30 H.F. ÄNDERUNG: GASMISCHANLAGE: CH4 5.5 Air Liquide Zugabe 20 slm für 3.0 min
    für ca. 72 ppm
    (Laut MKS hat Methan einen Korrekturfaktor von 0.72)

15:30 F.R. ÄNDERUNG: Kammerdach zu
16:43 F.R. ÄNDERUNG: Ausspülen mit 200 m3/h (72,12)
```

open roof

# Excerpt from SAPHIR lab journal

- SaphirExperimente: Isoprenoxidation mit OH
  - 05:00 UT Ausspülen aus, Zugabe CO<sub>2</sub>
  - 05:30 UT Befeuchtung
  - 06:30 UT Kammerdach auf
  - 07:30 UT Zugabe Ozon (FR)
  - 09:30 UT Zugabe CO (FR)
  - 11:30 UT Zugabe Isopren 7ul (HF)
  - 13:30 UT Zugabe CH<sub>4</sub> (FR)
  - 15:30 UT Kammerdach zu (FR)
  - 16:30 UT Ende Experiment; Ausspülen (FR)

```
05:00 H.F. ZUSTAND: LindeAnlage: SpülFluss ein, ZwkFluss ein, P(IK)=37Pa, P(ZK)=20Pa
05:00 H.F. ZUSTAND: Mechanik: Dach zu, Schatten auf, Giebel zu, Hubboden unten
05:00 H.F. ZUSTAND: ADAM module und USA Aufzeichnung OK
05:00 H.F. ZUSTAND: Ventilator EIN
05:02 H.F. ÄNDERUNG: ExpFluss EIN
05:07 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe CO2 für 4min
05:30 H.F. ÄNDERUNG: LindeAnlage Befeuchtung SpülFluss EIN, 150m3/h (PDCV701 65%, FCV401 7%)
    Feuchte-IK EIN
06:20 H.F. ÄNDERUNG: Befeuchtung AUS, Feuchte-IK AUS bei RH 67% @ 23°C
06:22 H.F. ÄNDERUNG: SpülFluss AUS, ExpFluss EIN
06:30 H.F. ÄNDERUNG: Kammerdach AUF, Giebel AUF
06:47 P.S. ÄNDERUNG: Start AMS-Messung, ca. 380 mL Fluss in das Instrument

07:30 F.R. ÄNDERUNG: Zugabe 23s Ozon für 50 ppb
(Linde wird am 28. und 31.6. LN2 nachfüllen)
09:30 F.R. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 24s CO 100% 1 SLM für 1500ppb 10s-1
11:30 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 6µl Isopren ←
13:30 H.F. ÄNDERUNG: GASMISCHANLAGE: CH4 5.5 Air Liquide Zugabe 20 slm für 3.0 min
    für ca. 72 ppm
    (Laut MKS hat Methan einen Korrekturfaktor von 0.72)

15:30 F.R. ÄNDERUNG: Kammerdach zu
16:43 F.R. ÄNDERUNG: Ausspülen mit 200 m3/h (72,12)
```

addition of  
isoprene

# Excerpt from SAPHIR lab journal

- SaphirExperimente: Isoprenoxidation mit OH
  - 05:00 UT Ausspülen aus, Zugabe CO<sub>2</sub>
  - 05:30 UT Befeuchtung
  - 06:30 UT Kammerdach auf
  - 07:30 UT Zugabe Ozon (FR)
  - 09:30 UT Zugabe CO (FR)
  - 11:30 UT Zugabe Isopren 7ul (HF)
  - 13:30 UT Zugabe CH<sub>4</sub> (FR)
  - 15:30 UT Kammerdach zu (FR)
  - 16:30 UT Ende Experiment; Ausspülen (FR)

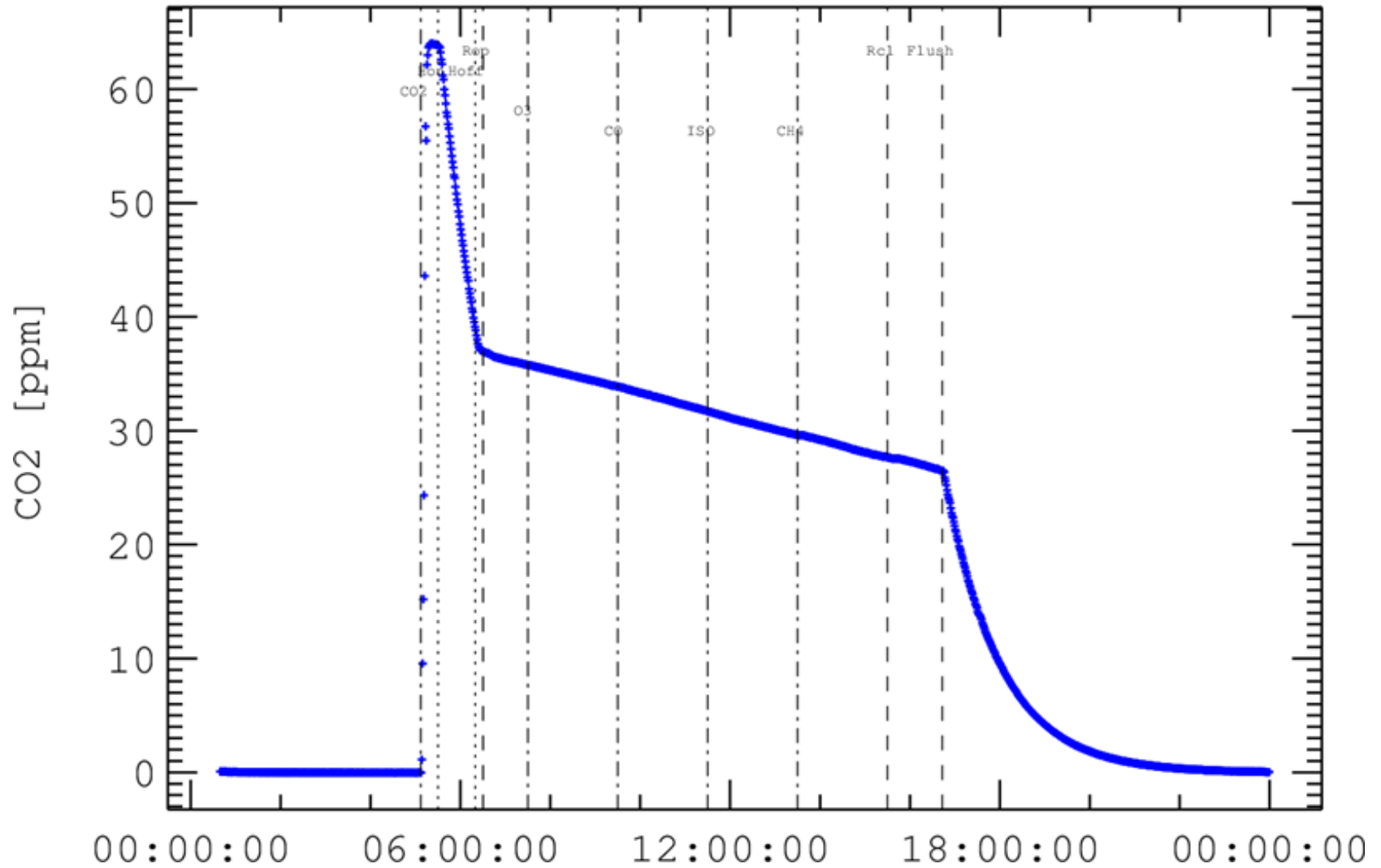
```
05:00 H.F. ZUSTAND: LindeAnlage: SpülFluss ein, ZwkFluss ein, P(İK)=37Pa, P(ZK)=20Pa
05:00 H.F. ZUSTAND: Mechanik: Dach zu, Schatten auf, Giebel zu, Hubboden unten
05:00 H.F. ZUSTAND: ADAM module und USA Aufzeichnung OK
05:00 H.F. ZUSTAND: Ventilator EIN
05:02 H.F. ÄNDERUNG: ExpFluss EIN
05:07 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe CO2 für 4min
05:30 H.F. ÄNDERUNG: LindeAnlage Befeuchtung SpülFluss EIN, 150m^3/h (PDCV701 65%, FCV401 7%)
    Feuchte-İK EIN
06:20 H.F. ÄNDERUNG: Befeuchtung AUS, Feuchte-İK AUS bei RH 67% @ 23°C
06:22 H.F. ÄNDERUNG: SpülFluss AUS, ExpFluss EIN
06:30 H.F. ÄNDERUNG: Kammerdach AUF, Giebel AUF
06:47 P.S. ÄNDERUNG: Start AMS-Messung, ca. 380 mL Fluss in das Instrument

07:30 F.R. ÄNDERUNG: Zugabe 23s Ozon für 50 ppb
(Linde wird am 28. und 31.6. LN2 nachfüllen)
09:30 F.R. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 24s CO 100% 1 SLM für 1500ppb 10s-1
11:30 H.F. ÄNDERUNG: Gasmischanlage, Zugabe 6µl Isopren
13:30 H.F. ÄNDERUNG: GASMISCHANLAGE: CH4 5.5 Air Liquide Zugabe 20 slm für 3.0 min
    für ca. 72 ppm
    (Laut MKS hat Methan einen Korrekturfaktor von 0.72)

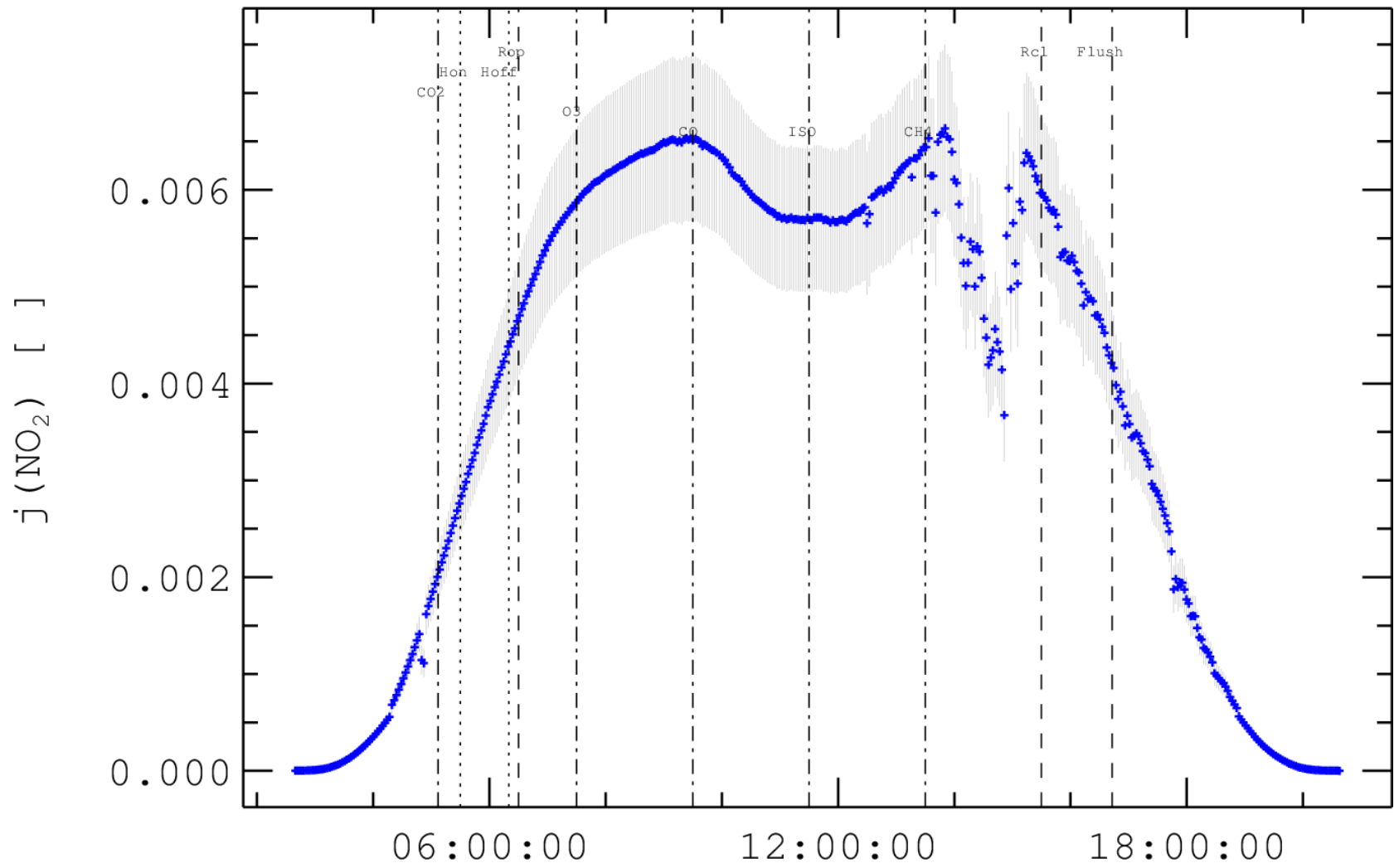
15:30 F.R. ÄNDERUNG: Kammerdach zu ←
16:43 F.R. ÄNDERUNG: Ausspülen mit 200 m³/h (72,12)
```

close roof

# Observations in SAPHIR

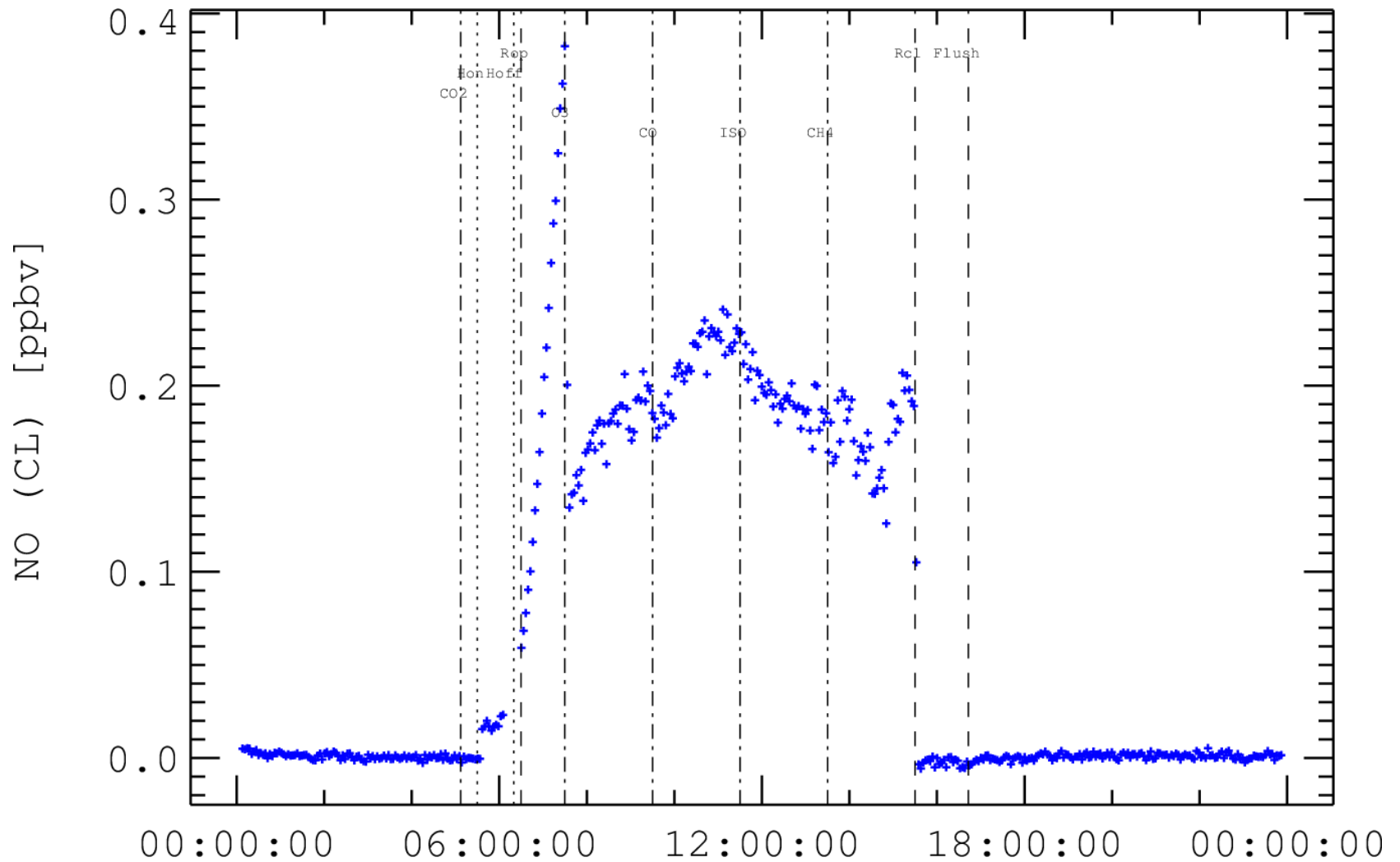


# Observations in SAPHIR

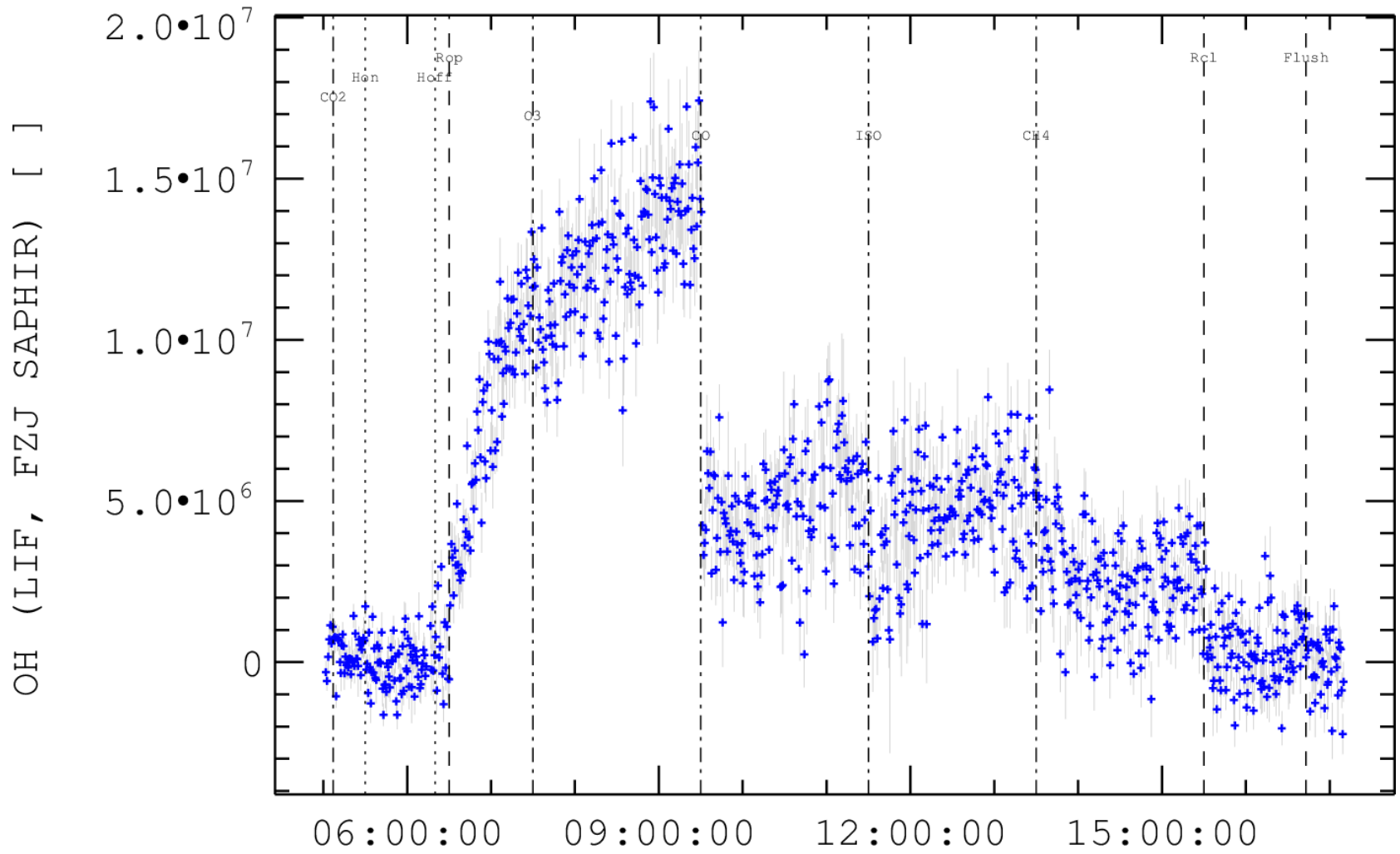




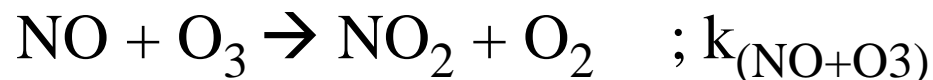
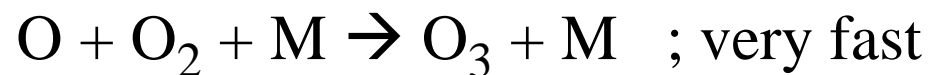
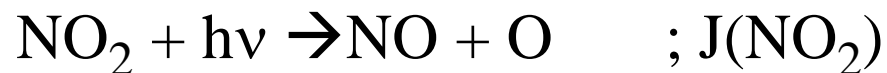
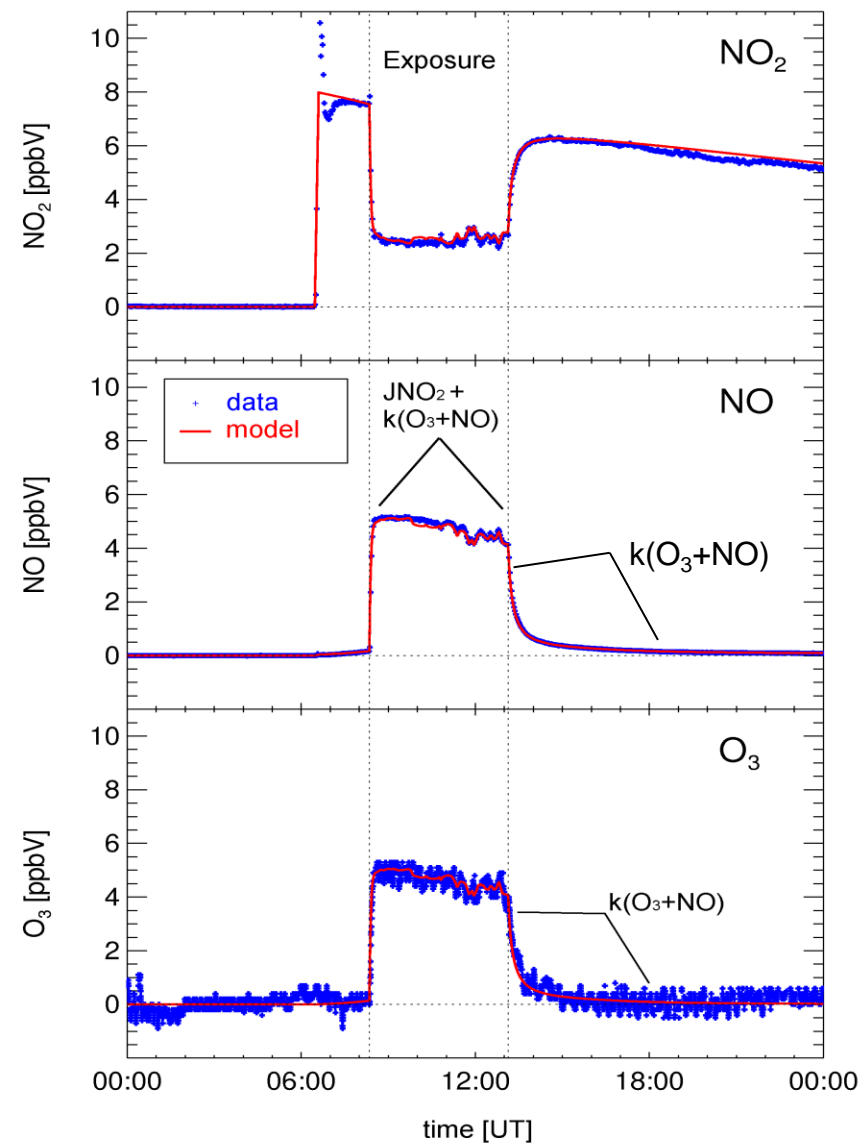
# Observations in SAPHIR



# Observations in SAPHIR



# Analysis of a simple NO, NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub> chemistry experiment



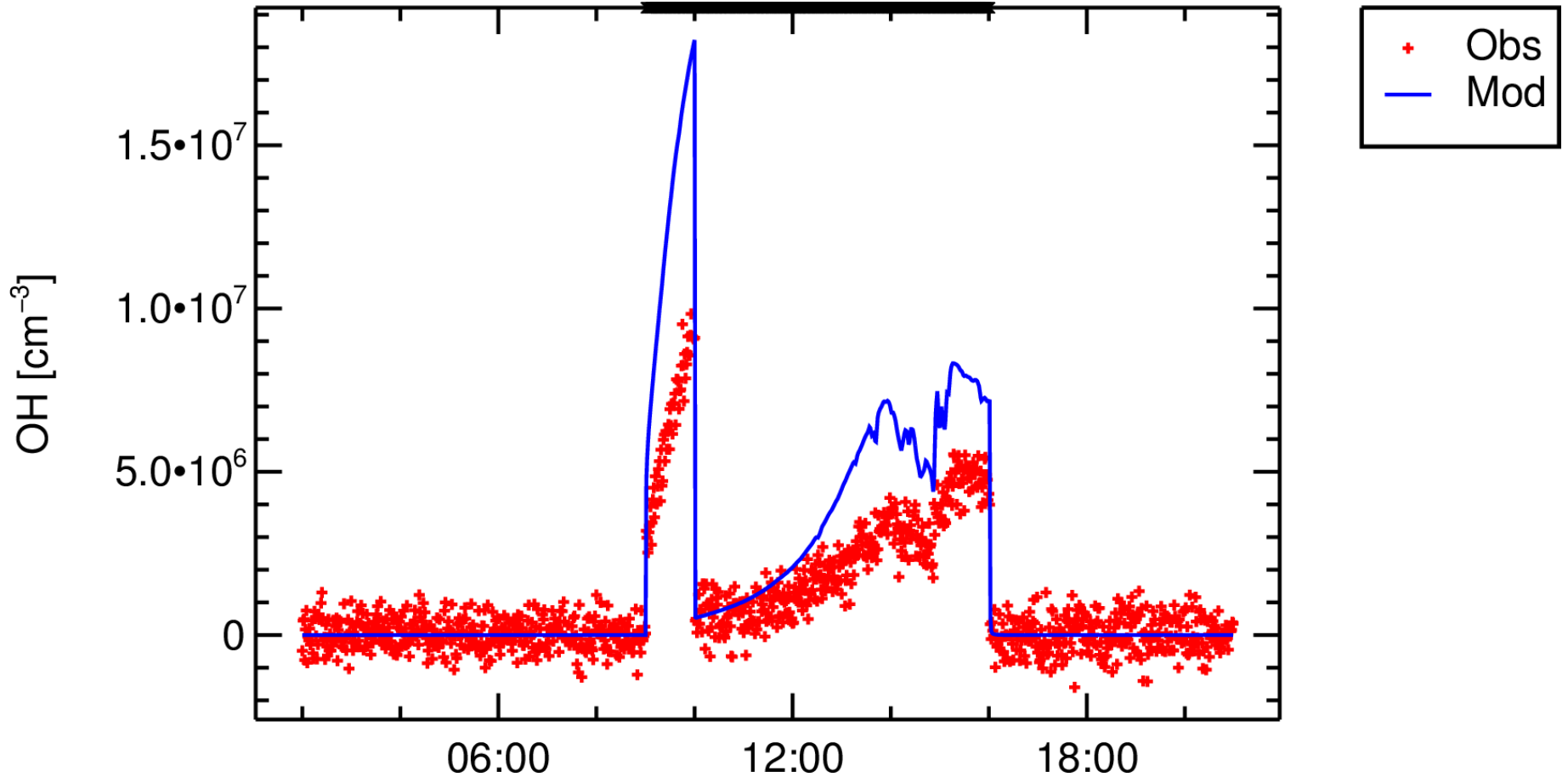
- $k_{(\text{NO}+\text{O}_3)} = 1.88 \times 10^{-14} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$   
 JPL1997:  $1.82 \times 10^{-14} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$   
 JPL2000:  $1.96 \times 10^{-14} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
- $\text{J}(\text{NO}_2) \pm 5\%$  (transfer-factor for spectral radiometer data)

# Concept of the workshop:

---

- You define boundary conditions for SAPHIR experiments.
- You send an EASY script and a ENZ file to the simulation server.
- The server simulates SAPHIR observations and model output of a simplified photochemical model.
- You compare the model to the observations and adjust the model accordingly.

# Example of a SAPHIR simulation



# Concept of the workshop:

---

- The EASY script contains the chemical mechanism
- The ENZ file contains all time dependent parameters, for example solar radiation data or points in time for the injection of species into SAPHIR

# Concept of the workshop:

---

- The simulation server solves the ODEs derived from the chemical mechanism using a GEAR algorithm.
- The simulated observations contain realistic experimental noise, no bias or other problems.
- The simulated observations are derived from a chemical mechanism which is different from your version

# Concept of the workshop:

---

- You may change the parameters of the chemical model.
- You decide which substance is injected at which point in time.
- You optimize the design of an experiment so that you can optimize the performance of the model.



# EASY Script: declarations

---

```
CONST=FUNCTION[%1]
```

```
DENSITY=FUNCTION[%1/(%2*1.379E-19)]
```

```
T =CONST(298)
```

```
P =CONST(1013.)
```

```
M =DENSITY(P,T)
```

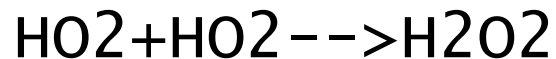
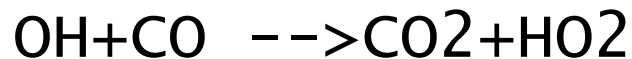
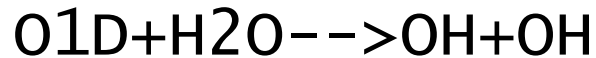
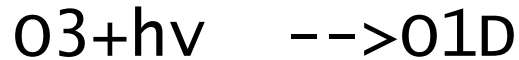
```
FILES[ENZ] = k_input.enz
```

```
FACS[HMAX] = 30
```

```
FACS[OUTSTEP]= 60
```

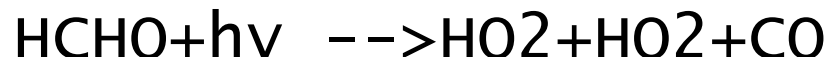
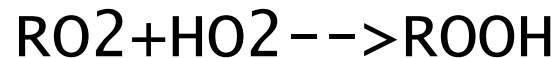
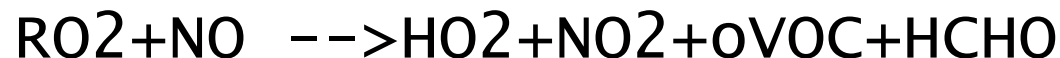
# EASY Script: anorganic chemistry

---



# EASY Script: organic chemistry

---



; (20 reactions, 18 species)

# EASY Script: rate parameter declarations

---

; reactions, k-values in  $s^{-1} \text{ cm}^3$

.

.

k[O1D+H2O-->OH+OH] = CONST(2.2e-10)

k[O1D+M -->] = CONST(2.6e-11)

k[O3+NO -->NO2] = CONST(1.8e-14)

k[OH+NO -->HONO] = CONST(5e-12)

.

.

.

; You may change rate constants, for example

; k[O3+NO -->NO2] = CONST(1.3\*1.8e-14)

# EASY Script: tracer „injections“

---

```
;injection of tracers
```

```
Q1-->H2O
```

```
Q2-->CO
```

```
Q3-->O3
```

```
k[Q1-->H2O]=CONST(0.01*M/(60))
```

```
k[Q2-->CO ]=CONST(100e-9*M/(60))
```

```
k[Q3-->O3 ]=CONST(50e-9*M/(60))
```

```
Q1=input(Q1)
```

```
Q2=input(Q2)
```

```
Q3=input(Q3)
```

**; You may change the amount injected, e.g.**

**; k[Q3-->O3 ]=CONST(75e-9\*M/(60))**

# EASY Script: photolysis rate parameters

---

;Photolysis reactions, J-values in  $s^{-1}$

```
hv_in           = input(HV)
initial[roof]   = CONST(0)
hv_in-->roof
k[hv_in-->roof] = CONST(1/(60))
hv              = CONST(roof)
```

**; You may open the roof by placing 1 into  
; column 4 (HV) of the ENZ file  
; at a specific point in time**

**; You may close the roof by placing -1 into  
; column 4 (HV) of the ENZ file  
; at a later point in time**

# EASY Script: photolysis rate parameters

---

; Photolysis reactions, J-values in  $s^{-1}$

```
jno2_in           = input(JNO2)
jno2              = CONST(jno2_in)
k[NO2+hv -->O3+NO] = CONST(jno2)
k[O3+hv  -->O1D]  = CONST(jno2/350)
k[HONO+hv --> OH+NO] = CONST(jno2/6)
k[HCHO+hv --> H2+CO] = CONST(jno2/280)
k[HCHO+hv --> HO2+HO2+CO] = CONST(jno2/350)
```

**; You may change photolysis rates, for example**  
**; jno2 = CONST(1.3\*jno2\_in)**

# EASY Script: dilution by refilling leakages

---

```
;dilution of tracers
```

```
O3 + DIL -->
```

```
OH + DIL -->
```

```
k[O3 + DIL --> ] =CONST(DILUTE)
```

```
k[OH + DIL --> ] =CONST(DILUTE)
```

```
VK = CONST(270.)
```

```
FL_in = input(Flow)
```

```
FL = CONST(FL_in*1)
```

```
DIL = CONST(1.)
```

```
DILUTE = CONST(FL/(VK*3600.))
```

**; You may change the dilution, e.g.**

**; FL = CONST(FL\_in\*1.3)**



# EASY Script: specific SAPHIR reactions

---

;background reactivity in CO equivalents

OH+X-->HO2

k[OH+X-->HO2]=CONST(2.4e-13)

X=CONST(200e-9\*M)

;background HONO generation

hv-->HONO

k[hv-->HONO]=CONST(jno2\*3e8)

**; You may change both processes, e.g.**

**; X=CONST(150e-9\*M)**

**; k[hv-->HONO]=CONST(jno2\*3e8\*1.3)**





# Guideline for experiments

---

- determine the dilution scaling
- determine  $j\text{NO}_2$
- determine the HONO source strength
- determine the background species X

# Guideline for experiments

---

- How much ozone is produced per molecule CO converted to CO<sub>2</sub>?
- How much ozone is produced per molecule VOC converted to oVOC?
- How depends ozone production on the concentration of NO?

# How to use the simulation server

---

- connect to the DROPBOX link send to you
- example EASY- and ENZ-files are in "example"
- set up a subdirectory with your name or initial and a label for the test scenario on your C-drive, for example in C:\temp\EASY\Franz.JNO2

# How to use the simulation server

---

- put the example EASY- and ENZ-files into the subdirectory
- edit the EASY- and ENZ-files to define a SAPHIR experiment
- upload the subdirectory to "incoming" at the DROPBOX
- download the results from "outgoing" at the DROPBOX to your local drive, for example to C:\temp\EASY\