

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	- 1 -
2	Stand des Wissens	- 6 -
2.1	Reaktionen aromatischer Kohlenwasserstoffe in der Atmosphäre	- 6 -
2.2	OH-Reaktion aromatischer Kohlenwasserstoffe unter atmosphärischen Bedingungen	- 7 -
3	Aufgabenstellung der Arbeit	- 15 -
4	Experimenteller Teil	- 17 -
4.1	1080-Liter-Quarzglasreaktionskammer mit FTIR-Kopplung	- 17 -
4.2	Erzeugung von Radikalen	- 17 -
4.2.1	Hydroxylradikale aus H ₂ O ₂	- 17 -
4.2.2	Hydroxylradikale aus CH ₃ ONO / NO	- 18 -
5	Produktanalysen der OH-initiierten Oxidation von p-Xylol	- 20 -
5.1	Produktanalyse der OH-initiierten Oxidation von p-Xylol in Abwesenheit von NO _x	- 20 -
5.1.1	Diskussion der Ergebnisse	- 21 -
5.2	Produktanalyse der OH-initiierten Oxidation von p-Xylol in Anwesenheit von NO _x	- 24 -
5.2.1	Diskussion der Ergebnisse	- 25 -
5.2.2	Vergleich der Produkte aus der OH-initiierten Oxidation von p-Xylol in Ab- und Anwesenheit von NO _x	- 26 -
6	Untersuchungen an ausgewählten Produkten der p-Xylooxidation (2,5-Dimethylphenol, 3-Hexen-2,5-dion, 3-Hexen-3,4-diol-2,5-dion)	- 28 -
6.1	Wandraten, Photolysefrequenzen und OH-Geschwindigkeitskonstanten von 2,5-Dimethylphenol, 3-Hexen-2,5-dion und 3-Hexen-3,4-diol-2,5-dion	- 29 -
6.1.1	Ergebnisse	- 30 -
6.1.2	Diskussion	- 35 -

6.1.3	Vergleich mit Geschwindigkeitskonstanten von 1,4-Dicarbonylverbindungen aus der OH-initiierten Oxidation von Toluol	- 35 -
6.2	Produkte aus der Photolyse und OH-Reaktion von 2,5-Dimethylphenol, 3-Hexen-2,5-dion und 3-Hexen-3,4-diol-2,5-dion	- 37 -
6.2.1	Ergebnisse	- 37 -
6.2.2	Diskussion der Ergebnisse	- 44 -
6.3	Mögliche Produkte aus der Reaktion von 3-Hexen-3,4-diol-2,5-dion mit OH-Radikalen	- 56 -
6.3.1	Abschätzung der Ausbeute der unbekanntes Verbindung bei der Reaktion von p-Xylol mit OH-Radikalen	- 62 -
7	Abhängigkeit der Bildung von 2,5-Dimethylphenol bei der OH-initiierten Oxidation von p-Xylol von der H ₂ O ₂ -, O ₂ - bzw. NO _x -Konzentration	- 63 -
7.1	Ergebnisse	- 64 -
7.2	Diskussion	- 65 -
8	Gesamtdiskussion	- 69 -
8.1	Einfluß von NO _x auf die Produktbildung bei der OH-initiierten Oxidation von p-Xylol	- 69 -
8.2	Bildung von 2,5-Dimethylphenol bei der OH-initiierten Oxidation von p-Xylol	- 70 -
8.3	Bildung einer Tetracarbonylverbindung bei der OH-initiierten Oxidation von p-Xylol und 3-Hexen-2,5-dion	- 71 -
8.4	Abbaumechanismus für p-Xylol unter atmosphärischen Bedingungen	- 71 -
9	Zusammenfassung	- 72 -
A 1	Anhang	- 74 -
A 1.1	Eichung von 2,5-Dimethylphenol	- 74 -
A 1.2	Eichung von 2,6-Dimethyl-p-benzochinon	- 75 -
A 1.3	Produkte aus der Reaktion von 2,6-Dimethylphenol mit OH-Radikalen	- 76 -
A 1.4	Bestimmung der Photolysefrequenzen der UV- und VIS-Photolyse sowie der Geschwindigkeitskonstante der OH-Reaktion von 2,6-Dimethyl-p-benzochinon	- 77 -

A 1.5	Korrektur der Chinonkonzentrationen	- 79 -
A 2	Synthese von 4-Hydroxy-2,3,5-hexantrion	- 81 -
A 3	FTIR-Referenzspektren	- 84 -
10	Literaturverzeichnis	- 94 -