

Umweltbeurteilung von Aminen und deren Zersetzungsprodukte aus der CO₂-Abscheidung am Standort KVA Linth

Erstellt im Auftrag des

ZAR CO₂ Kompetenzzentrum KVA Linth

Bericht Nr. I-29/25/UUh V&U Inst_24/019/1631 vom 12.02.2025 Version 2.0

Dieser Bericht darf nur vollinhaltlich, ohne Weglassen und Hinzufügen, veröffentlicht werden.

Sollte er auszugsweise abgedruckt oder vervielfältigt werden, so ist vorher die schriftliche Genehmigung der Verfasser einzuholen.

Umweltbeurteilung von Aminen und deren Zersetzungsprodukte aus der CO₂-Abscheidung am Standort KVA Linth

Erstellt: Dipl. Met. Dr. Ulrich Uhrner
Überarbeitet: Dipl. Met. Dr. Ulrich Uhrner

10.12.2025
12.02.2026

Inhalt

1.	Einleitung und Aufgabenstellung	7
2.	Untersuchungsmethodik	9
2.1.	Umweltbeurteilungen, Zielwerte	9
2.2.	Modellierung	11
2.3.	Ausbreitungsmodellierung und gleichzeitiger Abbau von Aminen	12
	Anwendung in Umweltbeurteilungen	14
2.4.	Deposition	16
2.5.	Vorgabe der OH-Radikal Konzentrationen	16
2.6.	Luftgüte Stickoxide	17
2.7.	Untersuchungsgebiet und Modell Set-Ups für primäre und sekundäre Amine, Nitramine, Nitrosamine und Aldehyde.....	17
2.8.	Emissionen	20
2.9.	Meteorologische Daten und Windfelder	21
2.10.	OH·Radikal	22
2.11.	Wind.....	24
	Wind Schmerikon	25
	Wind Glarus.....	25
	Synopsis Wind Schmerikon – Glarus – Standort.....	26
3.	Beurteilung Luft KVA Linth	36
3.1.	MEA-Ausbreitung Linth Ebene	37
	MEA Zusatzbelastung	37
	MEA Deposition.....	38
3.2.	Berechnung der Aminoradikal-Konzentration [MEA*] zur Abschätzung der Nitramin- und Imin-Reaktionsprodukte.....	40
	MEA* Zusatzbelastung als Proxy für Nitramin und Imin Bildung	41
	Abgeschätzte Nitramin Zusatzbelastung	42
	Deposition Nitramine und Imine	44
3.3.	Ausbreitung von Sekundären Aminen	46
	DMA* Zusatzbelastung als Proxy für Nitramin-, Nitrosamin- und Imin-Bildung	46
3.4.	Ausbreitung von Nitrosamin Emissionen.....	47
3.5.	Abschätzung der maximalen Nitramin- und Nitrosamin-Zusatzbelastung	48
3.6.	Rezeptoren NA, DMA* und NS Immission	51
3.7.	Ausbreitung von Aldehyden.....	55
	Aldehyd-Zusatzbelastung	55
	Aldehyd Deposition.....	55
4.	Zusammenfassung	56

5.	Abbildungsverzeichnis	60
6.	Literaturverzeichnis	63

Darstellung von Zahlen in diesem Bericht

Das Dezimaltrennzeichen in der Modellierung ist der Punkt „.“, hinsichtlich Ein- und Ausgabe. Aus Gründen der Konsistenz zu den Abbildungen und der jeweiligen Legende werden im Text Zahlenwerte wie z.B. Konzentrationen mit dem Dezimalpunkt „.“ statt dem im Deutschsprachigen Raum üblichen Komma „.“ separiert, also 1.5 statt 1,5.

Abkürzungsverzeichnis

Acronym	Bedeutung
A	Amin
A*	Amino-Radikal
br	branching ratio
CC	Carbon Capture
Cl	Chlor
CTM	Chemie Transport Model
DJF	Dezember-Januar-Februar (Untersuchungszeitraum)
DEYA	Diethylamin
DMA	Dimethylamin
DMA*	Dimethylamin-Radikal
GRAL	GRAz Lagrangian (- Ausbreitungsmodell)
GRAMM	GRAz Mesoscale Model (- Windfeldmodell)
IM	Imin
JJA	Juni-Juli-August (Untersuchungszeitraum)
JMW	Jahresmittelwert
k	Geschwindigkeitsreaktionskonstante
KVA	Kehricht Verbrennungsanlage
MA	Methylamin
MAK	Maximale Arbeitsplatz Konzentration
MEA	Monoethanolamin
MEA*	Monoethanolamin Radikal
Molek	Moleküle
MW8	8-Stunden Mittelwert
NA	Nitramin
NIPH	Norwegian Institute of Public Health
Nm ³	Normkubikmeter (bei 101325 Pa und 273.15 K)

NO	Stickstoffmonoxid
NO ₂	Stickstoffdioxid
NO _x	Stickoxide x=1,2
NS	Nitrosamin
OSHA	Occupational Safety and Health Administration
O ₃	Ozon
•OH	Hydroxylradikal
[] _{ss}	Steady-State bzw Gleichgewichtskonzentration
Vol	Volumen

1. Einleitung und Aufgabenstellung

Am Standort der KVA Linth ist eine CO₂-Abscheidung (CC) geplant. Mittels Aminwäsche können die CO₂-Emissionen von Kehrlichtverbrennungsanlagen aus dem Rauchgas abgetrennt werden. Dieser Prozessschritt initiiert das sogenannte „Carbon-Capture“ – die Abscheidung von CO₂. In einem nachfolgenden Verfahrensschritt werden saure Gase (CO₂, SO₂, u.a.) thermisch, durch Erhitzen, wieder vom Amin getrennt und das zurückgewonnene Amin erneut zur Wäsche eingesetzt. In der Absorber-Stufe kann dabei ein verhältnismäßig kleiner Anteil des Amins und seiner Zersetzungsprodukte mit dem Rauchgas in die Atmosphäre entweichen. Nachfolgend werden diese entwichenen Amine in der Atmosphäre turbulent verdünnt und verfrachtet, sowie durch chemische Reaktionen und mittels trockener bzw. feuchter Deposition abgebaut (siehe Abbildung 1). Beim chemischen Abbau, vorwiegend über Stickoxid und Hydroxylradikal-(•OH) Reaktionen, können schädliche Reaktionsprodukte wie Nitrosamine und Nitramine entstehen [1]. Nitramine und insbesondere Nitrosamine sind karzinogen. Im Vergleich zur CO₂-Abscheidung (Zeitskala: ~Sekunden) laufen die atmosphärischen Zersetzungsreaktionen (Zeitskala Stunden) vergleichsweise langsam ab.

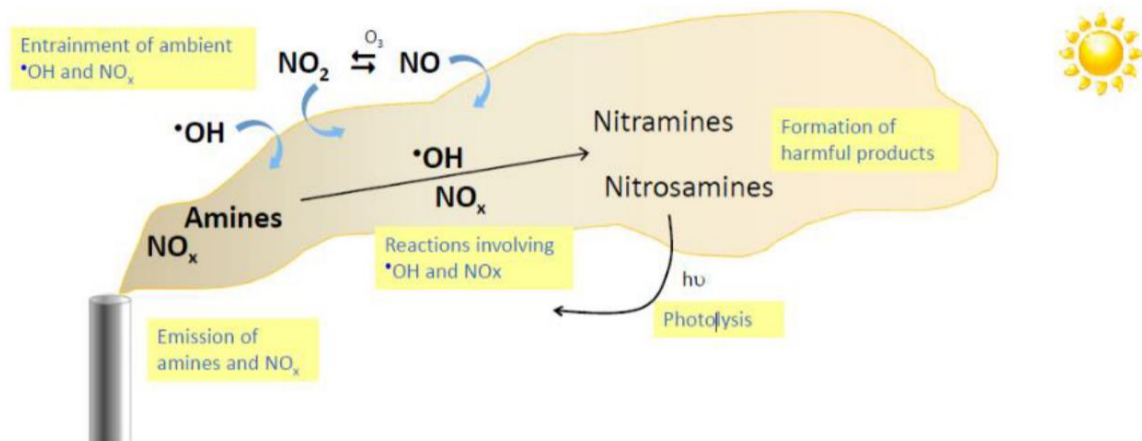


Abbildung 1: Vereinfachtes Schema zur Darstellung der Entstehung schädlicher Amin Abbauprodukte und deren Zerfall in der Amin- und Stickoxid Abgasfahne, aus [2].

Der Umfang der Nitramin- und Nitrosamin-Bildung in der Atmosphäre hängt in erster Linie von folgenden Parametern ab:

- den vorherrschenden Umweltbedingungen, wie der Globalstrahlung (G)
- den Emissionen, insbesondere den Aminen + Stickoxiden (NO_x)
- den photochemischen Verhältnissen im Umfeld der Anlage (G, Ozon (O₃), NO_x, ... •OH)
- der Art des verwendeten Amins.

In der KVA Linth soll das primäre Amin Monoethanolamin (MEA) zur CO₂-Abscheidung verwendet werden. Primäre Amine wie MEA bieten den Vorteil, dass in der Atmosphäre zwar stabile Nitramine gebildet werden, jedoch gebildete Nitrosamine wieder zerfallen. Allerdings können beim Abscheidungsprozess und der Rückgewinnung von MEA in sehr geringem Umfang sekundäre Amine wie z.B. Dimethylamin (DMA) bilden, die dann in der Atmosphäre neben Nitraminen auch Nitrosamine bilden. Ebenso können bei der CO₂-Abscheidung und Amin Rückgewinnung in geringem Umfang Nitramine (NA) und Nitrosamine

(NS) gebildet werden, die dann mit dem Rauchgas direkt emittiert werden. Weitere Zersetzungsprodukte bei Verwendung von MEA sind Formaldehyd und Acetaldehyd.

Die mit dem Rauchgas entweichenden MEA, DMA, NA und NS Emissionen werden nach Freisetzung in der Atmosphäre verdünnt, abgebaut und deponiert.

Vom Norwegischen Gesundheits-Institut (NIPH Norwegian Institute of Public Health) wurde ein Luftgüte-Zielwert von 0.3 ng/m^3 als Kriterium zur Genehmigung von Carbon Capture Anlagen ausgegeben, der als Summenwert für Nitrosamine und Nitramine Anwendung findet [3]. Seitens der schweizerischen Umweltbehörden wird ein strengerer Immissions-Risikowert von 0.03 ng/m^3 als Summenparameter eingefordert [4]. Für Einträge in Vegetation, Böden, Gewässer und Trinkwassereinzugsgebieten gibt es bislang keine Zielwerte.

Die in Abbildung 1 schematisierten chemischen Prozesse wurden in einfachen Gauß'schen Fahnenmodellen wie ADMS 5 mit Aminchemie-Erweiterung [5], sowie in komplexeren regionalen Chemie-Transport-Modellen implementiert [6][7]. Grundlegend für Modellierungsarbeiten in der Schweiz ist eine gute Repräsentation schwieriger Windverhältnisse durch das äußerst komplexe Gelände, wie es im Umfeld der KVA Linth vorliegt. Für die Strömungsmodellierung sollten Modelle verwendet werden, die die komplexen, topographisch bedingten Windverhältnisse mit adäquater Auflösung abbilden können. Daher werden für Anwendungen in der Schweiz die Windfelder durch ECOLOT [8] mit dem numerischen Modell GRAMM (GRAz Mesoscale Model, [9],[10],[11]) gerechnet. Für die Ausbreitungsmodellierung werden numerische Modelle benötigt, die die hohen quellnahen Konzentrationsgradienten unter komplexen topographischen Bedingungen auflösen. Lagrange'sche Partikelmodelle sind prinzipiell sehr gut geeignet, die Ausbreitung von tracerartigen Spurenstoffen auch in komplexem Gelände zu simulieren. Für diese Studie wird das Lagrange'sche Partikel Modell GRAL (GRAz Lagrangian, [12],[13],[14],[15]) verwendet. Das Model GRAL wurde um eine einfache, äußerst effiziente und anwendungsorientierte Chemie erweitert und bereits für Sommer- und Winterperioden im Umfeld der KVA Horgen ausgiebig getestet [16]. Der Forschungsbericht [16] wurde einem Expert-Review [17] unterzogen und vorgeschlagene aktualisierte Anpassungen von wichtigen Parametern, der Methodik sowie der Beurteilung von Ergebnissen werden in dieser Umweltbeurteilung berücksichtigt.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Beurteilung der Ausbreitung von Aminen und deren Zersetzungsprodukte aus der geplanten CO_2 -Abscheidung im Umfeld der KVA Linth. Durch Vorgabe der Emissionen für Acetaldehyd, Formaldehyd, MEA, DMA (als Proxy-Substanz für sekundäre Amine, siehe [16]) und direkten Nitrosamin Emissionen werden die Jahresmittelwerte der Immissionen (Zusatzbelastungen) unter Berücksichtigung der trockenen und nassen Deposition berechnet und dargestellt, siehe Schema Abbildung 2. Ebenso werden die Jahresmittelwerte der trockenen und nassen Depositionseinträge dargestellt.

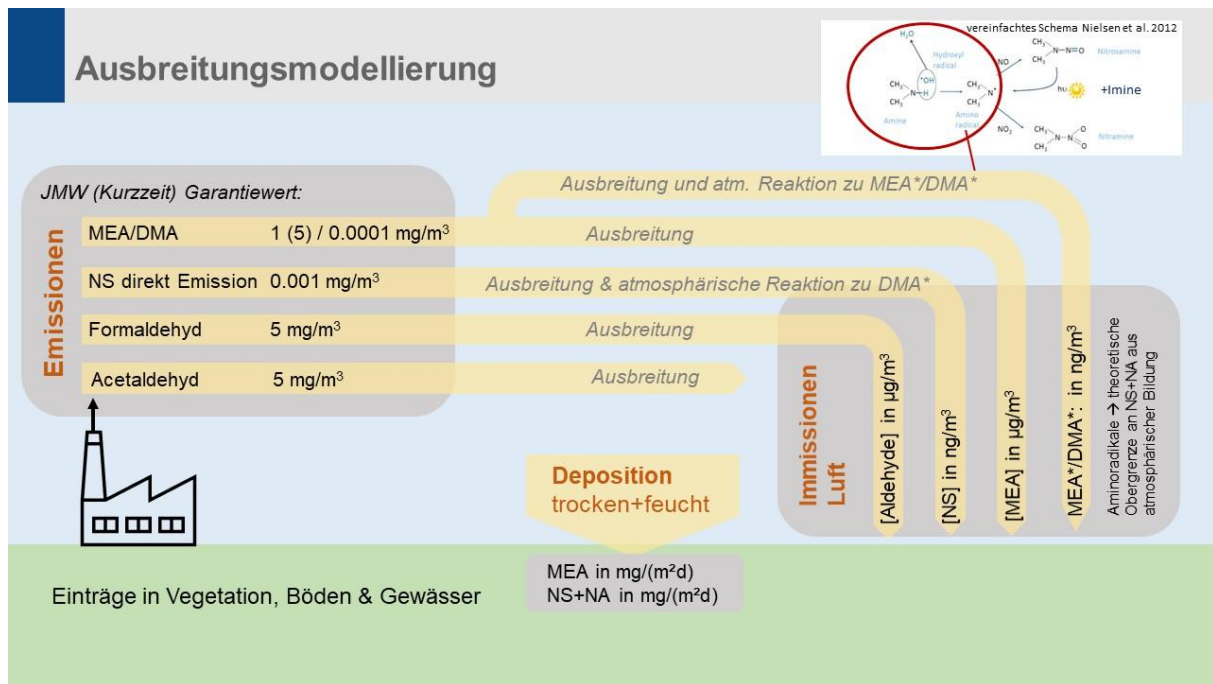


Abbildung 2: Beurteilungsschema für die Ausbreitungsmodellierung.

2. Untersuchungsmethodik

Um Auswirkungen der projizierten CO₂-Abscheidung mittels Amine auf die Umwelt bei komplexer Topografie für die KVA Linth beurteilen zu können, wurde das Ausbreitungsmodell GRAL weiterentwickelt und bereits am Beispiel der KVA Horgen getestet [16]. Der für diese Untersuchung relevante aktuelle Wissensstand, methodische Ansätze, umfangreiche Testrechnungen für sommerliche und winterliche Verhältnisse sind ebenso in diesem Forschungsbericht [16] beschrieben. Die im Expert-Review von Nielsen und Wisthaler, 2025 [17] vorgeschlagenen aktualisierten Anpassungen hinsichtlich der MEA Emissionen, des MEA branching ratios, der Methodik sowie der Beurteilung von Ergebnissen werden in dieser Arbeit berücksichtigt. Auch eine Überschätzung der direkten Nitrosamin Emissionen in [16] wird hier korrigiert.

Die projizierte CO₂-Abscheidung bei der KVA Linth stellt wohl das zweite Projekt dieser Art in der Schweiz dar. Im Gegensatz zu Umweltbeurteilungen für Luftschadstoffe zu denen es auf staatlicher Ebene Richtlinien und Regelwerke und auch Grenzwertregelungen gibt, stellen Umweltbeurteilungen von Aminen und deren Zersetzungsprodukten aus der CO₂-Abscheidung noch Neuland dar. Im Gegensatz zu Luftschadstoffen wie NO₂, SO₂, PM u.a. sind im Bereich der Amine und deren Zersetzungsprodukten keine Immissions-Grenzwerte definiert. Es gibt Zielwert Vorgaben. Hinzu kommt, dass Emissions- und vor allem Immissionsmessungen aufgrund der Nachweisgrenzen äußerst schwierig durchzuführen sind [18]. Auch typische Hintergrundbelastungen sind derzeit nicht bekannt.

2.1. Umweltbeurteilungen, Zielwerte

In Europa wurden bisher vor allem in Norwegen und UK Pilotprojekte zur CO₂-Abscheidung und auch Lagerung durchgeführt. Im Rahmen dieser Projekte wurde neben der großtechnischen Umsetzung und Skalierbarkeit der CO₂-Abscheidung [19],[20],[21] auch Grundlagenforschung zu Aminen und deren atmosphärischen Abbau mittels Photooxidations-

Experimenten (z.B. [22],[23]) und auch theoretischen Studien [24] betrieben. Dabei wurden die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten zu den gasförmigen Abbaumechanismen experimentell sowie durch theoretische Quantenchemie und kinetische Modellierung bestimmt [25]. Unter Nutzung dieser Forschungsergebnisse konnten Modelle und Methodiken zur Beurteilung der luftseitigen Umweltauswirkungen von Aminen und deren Zersetzungsprodukte etabliert und weiterentwickelt werden. Ebenso wurden Untersuchungen [3] zur Wirkung von Aminen und deren Zersetzungsprodukte auf die menschliche Gesundheit im Zuge von Pilotprojekten im Technology Centre Mongstad (TCM) [19][20][21] in Norwegen durchgeführt. Im Rahmen dieser Arbeiten wurden Zielwerte zur Wirkung von Aminen und deren Abbauprodukte aus verschiedensten Gesundheits- und Umweltuntersuchungen in den Expositionsbereichen Luft/Einatmung bzw. Gewässer und Trinkwasser von Knudsen et al, 2009 [26] zusammengestellt und von Karl et al., 2011 [27] und um neuere Werte NIPH [3] ergänzt. Dabei wurden Untersuchungen z.B. zur Herstellung von Sprengstoffen und auch Richtlinien zum Arbeitsschutz (z.B. MAK bzw. OSHA Werte) zur Orientierung verwendet. Eine Zusammenstellung der Ziel- und Richtwerte für MEA, Diethylamin (DEYA), die atmosphärischen Amin Abbauprodukte der Nitrosamine und Nitramine sowie weitere Abbauprodukte wie Formamid und Acetamid ist in Tabelle 1 dargestellt. Bei den Trinkwasser Zielwerten geht es primär um den Schutz der menschlichen Gesundheit und bei den Gewässer Zielwerten geht es darum toxische Wirkungen auf Algen/Bakterien bzw. Fische oder wirbellose Wassertiere zu vermeiden.

Tabelle 1: Überblick Umwelt Zielwerte für Amine und deren Zersetzungsprodukte [26],[27] und um NIPH Werte [3] ergänzt, MMW Monatsmittelwert, MW Mittelwert, JMW Jahresmittel.

Komponente	Exposition	Toxizität	Ziel-/Grenzwert (Δt Exposition)	Referenz
MEA	Einatmung	Gesundheit, subchronisch	10 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (MMW)	Låg et al., 2009 [29]
	Gewässer	Algen/Bakterien, chronisch	7500 ng/l	Brooks & Wright (2008) [30]
DEYA	Einatmung	Gesundheit, akut	75 mg/m^3 (8-h MW)	OSHA (2010) [31]
	Gewässer	Algen/Bakterien, chronisch	200000 ng/l	Calamari et al. (1980) [32]
Nitrosamine (NS)	Einatmung	Gesundheit karzinogen	0.75/0.075 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ MAK	Deutschland TRGS [33]
	Einatmung	Gesundheit karzinogen	0.02 ng/m^3 (MMW)*1	US EPA [34]
	Einatmung	Gesundheit karzinogen	0.3 ng/m^3 (JMW)*2	Låg et al., 2011 [3]
	Trinkwasser	Gesundheit karzinogen	7 ng/l	Richardson et al. (2007) [35]
	Trinkwasser	Gesundheit karzinogen	4 ng/l als $\sum\text{NA}+\text{NS}$	NIPH Låg et al., 2011 [3]
Nitramine (NA)	Gewässer	Algen/Bakterien, chronisch	25 ng/l	Brooks & Wright (2008) [30]
	Einatmung	Gesundheit karzinogen	0.3 ng/m^3 (JMW)*2	Låg et al., 2011 [3]
	Trinkwasser	Gesundheit karzinogen	1 $\mu\text{g}/\text{l}$	Wollin & Dieter (2005) [36]
	Trinkwasser	Gesundheit karzinogen	4 ng/l als $\sum\text{NA}+\text{NS}$	NIPH Låg et al., 2011 [3]
Formamid	Gewässer	Fische chronisch	200 ng/l	Brooks & Wright (2008) [30]
Acetamid	Gewässer	Wirbellose Chronisch	24 000 ng/l	Brooks & Wright (2008) [30]
Acetamid	Einatmung	Gesundheit karzinogen	0.05 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (MMW)	California EPA (1999) [37]
Formaldehyd	Einatmung	Gesundheit karzinogen	938 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ (8-h MAK OSHA)	Siegel et al., 1983 [38]

*1 Langzeitwert für N-itosodiethylamine (DEN)

*2 als Summenwert für NA+NS

2011 sprach das Norwegische Gesundheitsinstitut (NIPH) die Empfehlung für die Festlegung von Nitrosamin und Nitramin Zielwerten aus, dass die Gesamtkonzentrationen von Nitrosaminen und Nitraminen 0.3 ng/m^3 für die Luft und 4 ng/l für Trinkwasser nicht überschreiten dürfen [3]. Diese Werte basieren auf einem Lebenszeitrisiko (life time risk) von 10^{-5} für die Luft, bzw. 10^{-6} für Trinkwasser. Das gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass eine Person von 100'000 Personen im Laufe eines Lebens an Krebs aufgrund Überschreitung dieses luftseitigen Schadstoffwertes erkrankt. Für Umweltbeurteilungen in Norwegen werden seither diese Werte verwendet [6]. Im vereinigten Königreich (UK) werden 0.2 ng/m^3 für die zusätzliche Nitramin und Nitrosaminbelastung in Summe im Jahresmittel angewandt. In der Schweiz soll ein Lebenszeitrisiko von 10^{-6} angesetzt werden und deshalb ein Luftgüte Zielwert von 0.03 ng/m^3 für Nitramine und Nitrosamine in Summe zur Anwendung kommen.

2.2. Modellierung

Der Schwerpunkt dieser Modellierungsarbeiten liegt auf der räumlich hochaufgelösten Modellierung ($\Delta x, y = 50 \text{ m}$) der Aminfahne und Zersetzungsprodukten in komplexem Gelände. Die Gasphasen- chemischen Abbauprozesse in der Aminfahne werden für das Amin MEA vereinfacht berechnet, im Vergleich zu den Studien mit regionalen Chemie-Transport Modellen ($\Delta x, y > 1 \text{ km}$) [7] bzw. Gauß'schen Fahnenmodell ($\Delta x, y \geq 100 \text{ m}$) [2],[25],[28]. In dieser Arbeit wird auf die von ECOLOT/Luzi Bergamin erstellten Windfeldbibliotheken zurückgegriffen. Zur Erstellung der Windfeldbibliotheken wurde das Modell GRAMM verwendet. Im komplexen Gelände resultieren räumlich sehr inhomogene Windverhältnisse im Vergleich zu ebenem Gelände. Wegen der sehr inhomogenen Windverhältnisse erfordert die Modellierung der Aminabgasfahne der KVA Linth eine hohe räumliche Auflösung. Zur Modellierung der Ausbreitung wird das Lagrange'sche Partikel Modell GRAL verwendet. Dabei wird die nasse und trockene Deposition von Aminen berücksichtigt. Hierzu wird das Ausbreitungsmodell GRAL im transienten Modus betrieben [39]. Bei den transienten Berechnungen werden stündliche Änderungen der Windgeschwindigkeit und -richtung, der atmosphärischen Turbulenz und des Niederschlags bei den Ausbreitungsrechnungen berücksichtigt. Die Berechnung der nassen Deposition (GRAL User Guide, VDI 3945-3 [40]) erfolgt über eine Luftschadstoff spezifische Auswaschrates und erfordert die Vorgabe einer gemessenen oder berechneten stündlichen Niederschlagsrate. Um die nasse Deposition und chemische Prozesse adäquat zu repräsentieren, wird ein ganzes Jahr durchgerechnet, d.h. $24 \cdot 365$ stündliche Ausbreitungsmuster werden berechnet.

Die in Tabelle 1 gelisteten Werte für Trinkwasser und Gewässer sind schwierig mit den modellierten Einträgen durch Deposition in Bezug zu setzen, da die nachfolgenden Vermischungs- und Abbauprozesse in Gewässern zu berücksichtigen wären. Letztendlich kann der über Gewässern und Trinkwassereinzugsgebieten berechnete Depositionseintrag durch einen Gewässerökologen zur Abschätzung der in Seen auftretenden Konzentrationsniveaus verwendet werden.

Im Rahmen dieser Umweltstudie werden die in Tabelle 2 gelisteten Zielwerte auf Jahresmittelbasis verwendet.

Tabelle 2: Zur luftseitigen Beurteilung verwendete Zielwerte.

Komponente	Exposition	Toxizität	Zielwert	Einheit
MEA	Luft	Gesundheit, subchronisch	10	µg/m³
NS+NA	Luft	Gesundheit, karzinogen	0.03	ng/m³

2.3. Ausbreitungsmodellierung und gleichzeitiger Abbau von Aminen

Die emittierten Amine werden in der Atmosphäre verdünnt und durch chemische Reaktionen abgebaut, sowie trocken und nass deponiert. In Abbildung 3 ist ein vereinfachtes, jedoch allgemein gültiges Schema für die atmosphärenchemischen Prozesse dargestellt. Beim chemischen Abbau, initiiert über die Reaktion desamins mit einem Hydroxylradikal, werden entweder H-Atome von Alkylketten desamins abgespalten oder es entsteht ein Amino-Radikal, das dann in weiterer Folge unter Einfluss von NO zu Nitrosaminen oder unter dem Einfluss von NO₂ zu Nitraminen oder Iminen weiter reagiert. Nitrosamine können unter dem Einfluss von photolytischer Strahlung wieder ein Amino-Radikal bilden, das wiederum Nitramine oder Imine bildet. Kettenförmige Imine sind toxikologisch gesehen weniger relevant.

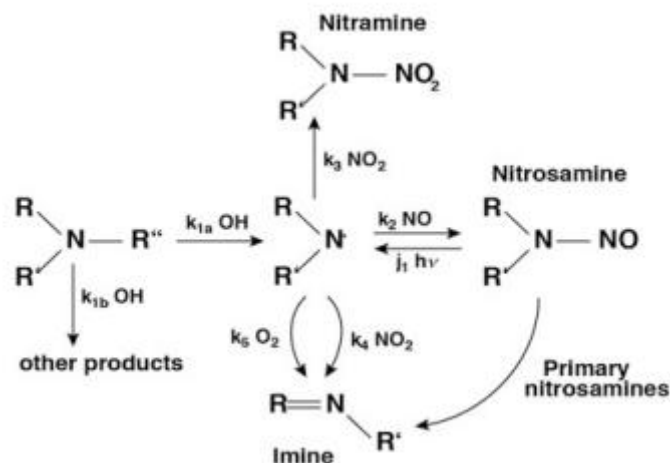


Abbildung 3: Verallgemeinertes Schema für vereinfachte atmosphärische Photo-Oxidation von Aminen, nach Nielsen et al., 2012 [1].

Die Bildung des Amino-Radikals ist der entscheidende Reaktionsschritt und liefert eine konservative Abschätzung für die maximale Bildung von Nitraminen, Nitrosaminen und Iminen (in der Summe). Anhand von Photooxidationsexperimenten in Atmosphärensimulationskammern konnten die atmosphärischen Abbauprozesse von Aminen studiert und der in Abbildung 3 dargestellte Mechanismus entwickelt und verifiziert werden sowie die Reaktionskonstanten bestimmt werden [22],[23]. Die Gasphasen-Reaktionen stehen dabei in Konkurrenz zu Kondensationsprozessen an Partikeln und Wassertropfen und Verlusten an

den Wänden der Reaktionskammer [22],[23]. Die Wandverluste bei den durchgeführten Experimenten deuten darauf hin, dass die trockene Deposition eine wichtige Rolle beim atmosphärischen Abbau von Aminen spielt. Aufgrund der hohen Volatilität von Aminen stellt die Bestimmung der Reaktionskonstanten eine große Herausforderung dar. Daher wurden diese ergänzend zu experimentellen Methoden auch über theoretische Methoden bestimmt [25]. Mittlerweile liegen Werte für die Reaktionskonstanten für verschiedenste Amin Verbindungen, basierend auf experimentellen und theoretischen Methoden, vor.

Die in der Atmosphäre ablaufenden Gasphasen Reaktionen lassen sich durch einen Satz von Differentialgleichungen (Glg 1 bis Glg 5) näherungsweise beschreiben.

Glg 1

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_{1a}[OH][A]$$

Glg 2

$$\frac{d[A^*]}{dt} = k_{1a}[OH][A] + j_{1hv}[NS] - k_2[NO][A^*] - k_3[NO_2][A^*] - k_4[NO_2][A^*] - k_5[O_2][A^*]$$

Glg 3

$$\frac{d[NS]}{dt} = k_2[NO][A^*] - j_{1hv}[NS]$$

Glg 4

$$\frac{d[NA]}{dt} = k_3[NO_2][A^*] - k_{3b}[NA]$$

Glg 5

$$\frac{d[IM]}{dt} = k_5[O_2][A^*] + k_4[NO_2][A^*] + k_{3b}[NA]$$

k_{1a} beschreibt die Reaktionsrate der Aminogruppe mit dem OH-Radikal zur Bildung eines Amino-Radikals (A^*); k_{1b} beschreibt die Bildung eines Alkyl-Radikals durch die Reaktion mit OH.

k_2 stellt die Rate der Bildung von Nitrosaminen (NS) bei Reaktion eines Amino-Radikals mit NO dar; j_{1hv} stellt die Nitrosamin-Photolyserate dar.

k_3 beschreibt die Rate der Reaktion eines Amino-Radikals und NO_2 zur Bildung von Nitraminen (NA).

k_4 stellt die Rate der Amino-Radikal und NO_2 -Reaktion zur Bildung von Iminen (IM) dar.

k_5 beschreibt die Rate des Amino-Radikals und der O_2 -Reaktion.

Anzumerken ist, da nicht direkt aus Abbildung 3 ersichtlich, dass auch Nitramine zu Iminen dissoziieren können. Diese Reaktion wurde in der Arbeit von Manzoor et al., 2014 [25] ergänzt, siehe k_{3b} in den Reaktionsgleichungen Glg 4 und Glg 5. Die Reaktionskonstante für die Reaktionsgleichung Glg 1 kann nicht direkt aus den Messungen abgeleitet werden, sondern nur eine Gesamtkonstante, die auch H-Abspaltungen am Alkylrest R^* beinhaltet. Das Verhältnis der H-Abspaltung von der Aminogruppe (zur Bildung eines Amino-Radikals) zu den Gesamt H-Abspaltungen durch die OH-Radikalreaktion wird als „branching ratio“ bezeichnet, entsprechend: k_{1a}/k_{OH} bzw. $k_{1a}/(k_{1a} + k_{1b})$. Um die relevante Reaktion zum

Aminoradikal zu beschreiben, wird bei Berechnungen die Geschwindigkeitsreaktionskonstante für den Aminabbau k_{OH} mit dem „branching ratio“ multipliziert, entsprechend $k_{1a} = br \cdot k_{OH}$. Teilweise, in Abhängigkeit des eingesetzten Amins, variieren die Reaktionsparameter beträchtlich. Die Nitrosamin-Bildung von primären Aminen wurde beim gezeigten Schema aus Gründen der Vollständigkeit inkludiert. Allerdings sind diese in der Atmosphäre nicht stabil. Primäre Nitrosamine isomerisieren und reagieren innerhalb von Sekunden mit O_2 zu entsprechenden Iminen [1]. Direkt emittierte stabile Nitrosamine können unter dem Einfluss von photolytischer Strahlung wieder ein Amino-Radikal bilden das vor allem Imine und zu einem geringeren Anteil Nitramine bildet.

Die Photooxidation von MEA wird dominiert durch die Reaktion mit OH-Radikalen. Cl-Atome stellen einen weiteren Nebenpfad in Küstenregionen dar und NO_3 -Radikale können nachts MEA abbauen. Im Vergleich zum Abbau durch OH bei Tageslicht stellt der Abbau durch NO_3 -Radikale eine Nebensenke dar, denn die Reaktionsrate ist gut 2 Größenordnungen geringer im Vergleich zu der mit dem OH-Radikal [6].

Aufgrund der stark unterschiedlichen Reaktionskonstanten stellt das Gleichungssystem (Glg 1 bis Glg 5) ein „steifes“ numerisches Gleichungssystem dar und erfordert spezielle numerische Lösungsverfahren zur Integration der Differentialgleichungen [41]. Dadurch steigen die Rechenzeiten stark an [7]. Bei einem Lagrange'schen Partikelmodell würden voraussichtlich äußerst hohe Rechenzeiten resultieren und der Vorteil der Verwendung dieses Modelltyps, welches die Repräsentation der Schadstoffgradienten quellenah und auch in größerer Entfernung zur Quelle erlaubt, wäre nicht mehr gegeben. Um der zeitlichen Entwicklung der Abbauprodukte in erster Näherung Rechnung tragen zu können, wird der erste und entscheidende Reaktionsschritt des Gleichungssystems (Glg 1 bis Glg 5) integriert.

Anwendung in Umweltbeurteilungen

Für Umweltbeurteilungen wird die Summe aus Nitrosaminen und Nitraminen als Jahresmittelwert benötigt. Die Berechnung der Bildung des Aminoradikals $R - N^{\bullet} - R'$ siehe Abbildung 3, ohne Rückreaktionen, ergibt in guter Näherung die Summe der maximal möglichen Nitramin-, Nitrosamin- und Imin-Gesamtkonzentration wieder. Im Weiteren werden diese hypothetischen Aminoradikal Konzentrationen mit einem * gekennzeichnet (A^* , MEA^* , DMA^*). Die Summe der Aminoradikalkonzentrationen (A^*) stellt ein äußerst konservatives Maß für schädliche Nitrosamin- und Nitramin-Konzentrationen dar.

Bei der Berechnung von A^* liegt die Herausforderung in einer repräsentativen Vorgabe von Umgebungsluft Hydroxyl-Radikal Konzentrationen zur Abschätzung von A^* . Die für den Standort Linth geeignete Vorgabe der Hydroxyl-Radikal Konzentrations-Jahreszeitreihe, wurde dabei basierend auf geeigneten Referenzen und der Nutzung von Globalstrahlungsmessungen erstellt, siehe Abschnitt 2.5 und 2.9. Allerdings können im Nahfeld der Rauchgasfahne, die Hydroxyl-Radikal Konzentrationen nicht adäquat repräsentiert werden, da auf der gegenständlichen (Mikro-) Skala aus Rechenzeitgründen aufwändige Differentialgleichungssysteme zur Chemie-Transportmodellierung nicht mit vernünftigem Aufwand berechnet werden können. Derzeit gibt es keine Multi-Skalen Modellkette, die photochemische Prozesse betreffend O_3 und Hydroxyl-Radikal Konzentrationen als auch Amin Chemie und Folgeprodukte auf einer räumlichen Skala von ~50 m in komplexem Gelände berechnen könnte. Dazuhin wären für solche Berechnungen ein äußerst hoher Aufwand zur Erstellung von Emissionsdaten aus verschiedenen Sektoren zu betreiben. Da sich die Hydroxyl-Radikal Konzentrationen in erster Näherung proportional zu den Ozonkonzentrationen

verhalten und diese im nahen Umfeld der Abluffahne gegen Null gehen, gehen deshalb auch die Hydroxyl-Radikal Konzentrationen gegen Null. Das bedeutet, dass beim gewählten Ansatz die A* Bildung im Nahbereich der Abluffahne stark überschätzt wird.

Das oben (in 2.1) aufgeführte Gleichungssystem wird reduziert auf die Lösung von Glg 1 und der reduzierten Lösung von Glg 2, d.h. die Abbauterme des Aminoradikals die zur Bildung von Nitrosaminen, Nitraminen und Iminen führen, werden nicht berücksichtigt. Auch die photolytische Abbaureaktion von (stabilen) Nitrosaminen (direkte NS-Emission, über DMA), die zur Bildung der Aminoradikals führt und für eine Umverteilung von Nitrosaminen zu hauptsächlich Iminen aber auch Nitraminen führt, bleibt bei den Simulationen unberücksichtigt. Somit ergeben sich die beiden unten angeführten Gleichungen (Glg 6 und Glg 7). Die Berechnung dieser hypothetischen, da „eingefrorenen“ Aminoradikal Konzentration [A*], stellt ein sehr konservatives Proxy Maß für Bildung von Nitrosaminen, Nitraminen und vorwiegend Iminen dar, siehe Abbildung 4 im Vergleich zu dem verallgemeinerten Schema in Abbildung 3. Die zeitliche Integration erfolgt mit der Berechnung der Amin (A) Ausbreitung. Dazu werden folgende Parameter vorgegeben:

1. das „branching ratio“, d.h. das Verhältnis der H-Abspaltung von der Aminogruppe (zur Bildung eines Aminoradikals) zu den Gesamt H-Abspaltungen durch die OH Radikal Reaktion und
2. die Geschwindigkeitsreaktionskonstante k_{OH} .

Somit können z.B. die Aminoradikal-Konzentration A* für MEA, also MEA* als auch sekundäre DMA Emissionen, die bei der Verwendung von MEA auftreten können, in einer weiteren Rechnung modelliert werden (A = DMA, A* = DMA*). Das System ist allgemeingültig formuliert.

Glg 6

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_{1a}[OH][A]$$

Glg 7

$$\frac{d[A^*]}{dt} = k_{1a}[OH][A]$$

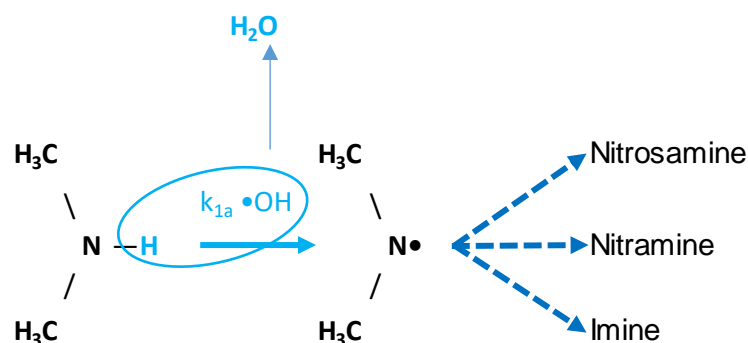


Abbildung 4: Darstellung des implementierten vereinfachten Reaktionsschemas am Beispiel von A = Dimethylamin zur Abschätzung von Nitrosaminen, Nitraminen und Imine in Summe.

Da bei Verwendung von MEA zur CO₂-Abscheidung keine stabilen Nitrosamine in der Atmosphäre gebildet werden, wird bei Verwendung der berechneten MEA* Konzentration

(ohne Abbaureaktionen), die Nitramin Bildung stark überschätzt. Die Berechnungen von Wolke et al., 2016 [7] ergaben, dass bei Verwendung dieses Berechnungsansatzes im Vergleich zu MEA* Berechnungen mit einem expliziten chemischen Mechanismus, die Nitraminbildung um Faktor 10 überschätzt wird ($\approx 10\%$ Nitramine und 90% Imine). Allerdings verwendeten Wolke et al., 2016 [7] ein „branching ratio“ von 0.08 für MEA [22]. Neuere Studien legen nahe, dass ein „branching ratio“ von 0.3 für MEA verwendet werden sollte [17]. Gemäß Nielsen und Wisthaler 2025 [17], kann die Aufteilung bzw. das „branching“ von MEA* in Nitrosamine, Nitramine und Imine als Funktion des NO_x Umgebungsluftniveaus und des $\text{NO}:\text{NO}_2$ Mischungsverhältnisses abgeschätzt werden. Bei einem NO_x Umgebungsluft Niveau von 10 ppb bewegt sich der MEA Nitramin Anteil zwischen 7 bis 14 % des MEA*. Bei einem NO_x Umgebungsluft Niveau von 20 ppb bewegt sich der MEA Nitramin Anteil zwischen 13 bis 23 % des MEA*. Zu einer Abschätzung können geeignete, repräsentative Messungen herangezogen werden, oder es werden aussagekräftige hochaufgelöste CTM Berechnungen benötigt und deren Ergebnisse herangezogen.

2.4. Deposition

Die trockene und nasse Deposition wird für das jeweilige Amin berechnet. Als Ausgabe steht in GRAL [15] nur die Summe beider Depositionsbeiträge zur Verfügung. Bisher ist hinsichtlich der Deposition von Aminen noch recht wenig bekannt. Da MEA basisch ist ($\text{pK}_a = 9.5$ [6]) ist es sinnvoll die Depositionsgeschwindigkeit für Ammoniak NH_3 zu verwenden. Die nasse Deposition wird in GRAL [15] über eine Auswaschrates und Stoffparametern gemäß VDI-3945-3 sowie VDI-3782-5 berechnet. Dazu wurden die Stoffkonstanten für den Auswaschfaktor $c_w = 0.00012$ und den Auswaschkoeffizient $\alpha_w = 0.6$ vorgegeben.

Die trockene Depositionsgeschwindigkeit für Ammoniak variiert je nach Vegetation und auch Jahreszeit. Der typische jahresdurchschnittliche Wertebereich für die trockene Depositionsgeschwindigkeit liegt im Bereich 0.01 m/s bis 0.026 m/s [43][44]. Für die trockene Deposition wird hier der folgende Wert herangezogen:

- $v_D = 0.026 \text{ m/s}$

Die Abschätzung der Deposition für A* erfolgt durch Multiplikation der berechneten Amin Deposition mit dem Konzentrationsverhältnis $[\text{A}^*]/[\text{A}]$:

$$[\text{A}^*]\text{-Deposition} = [\text{A}]\text{-Deposition} \cdot [\text{A}^*]/[\text{A}]$$

Diese Felder können zur weiteren Beurteilung von Gewässerökologen genutzt werden.

2.5. Vorgabe der OH-Radikal Konzentrationen

Eine Schlüsselrolle bei der Modellierung einer vereinfachten Amin-Chemie kommt dabei den Hydroxylradikal-Konzentrationen ($\bullet\text{OH}$) zu. Dabei werden meist Annahmen für eine lokale OH-Konzentration getroffen. Für Abschätzungen wurde häufig ein typischer Wert bis $10^6 \text{ Moleküle/cm}^3$ angesetzt (z.B. [22],[45],[46],[47]). Um den zeitlichen Verlauf abbilden zu können, wurden Bezüge zur UV-Strahlung [48] oder einfache Zusammenhänge zur Ozonkonzentration und der $j\text{NO}_2$ -Photolyse verwendet [5][27]. Generell weist die OH-Radikal Konzentration einen starken Tagesgang sowie strahlungsbedingt einen Jahresgang auf. Ebenso liegen die $\bullet\text{OH}$ -Konzentrationen in hohen Breiten niedriger als in den mittleren Breiten und den Tropen [49], [50]. Hewitt and Harrison 1984 [49] leiteten in ihrem Review Artikel einen Konzentrationsbereich von 5×10^5 bis $5 \times 10^6 \text{ Moleküle/cm}^3$ als tageszeitlichen Mittelwert basierend auf verfügbaren weltweiten troposphärischen Messungen ab, und einen

Bereich von 3×10^5 bis 5×10^6 Moleküle/cm³ basierend auf Modellstudien. Die saisonale Änderung wurde mit Faktor 3 angegeben. Für das nächtliche Minimum wurden 1×10^4 angegeben [49][51]. Heard et al., 2004 [52] ermittelten für einen industriellen Standort in Birmingham (UK) mittels Messungen und Berechnungen sommerliche •OH-Konzentrationen zwischen 2×10^5 (nachts) und 3×10^6 Moleküle/cm³ (mittags). Im Winter wurden zwischen $<1.5 \times 10^5$ (nachts) und 1.5×10^6 Moleküle/cm³ mittags gemessen. Die Detektionsgrenze betrug 1.5×10^5 Moleküle/cm³, Abschätzungen aufgrund von Berechnungen deuten auf niedrigere nächtliche Konzentrationen im Winter hin. Khan et al., 2008 [53] leiteten die nächtlichen •OH-Konzentrationen in Southampton, London Marylebone Road, Birmingham und Middlesbrough (UK) über Kohlenwasserstoffmessungen ab. Die ermittelten nächtlichen •OH-Konzentrationen lagen im Bereich 2×10^4 bis 1.5×10^5 während der Wintermonate, und 5×10^5 bis 3×10^5 während der Sommermonate.

2.6. Luftgüte Stickoxide

Um die MEA* Konversion in Abhängigkeit von den Umgebungsluft Stickoxid Konzentrationsniveaus und dem NO zu NO₂ Verhältnis beurteilen zu können [17] wurden NO_x Luftgüte Messwerte über www.ostluft.ch beschafft. Da im Bereich der KVA Linth keine NO_x Luftgüte Messzeitreihen über einen längeren Zeitraum zur Verfügung stehen, sollen hier die jahresdurchschnittlichen NO_x Luftgüte Messwerte von der nächstgelegenen Luftgütemessstation Rapperswil-Jona verwendet werden. Die gemittelten Messdaten für das Jahr 2022 sind mit einem * gekennzeichnet und fallen aus der Reihe. Generell ist eine abnehmende Tendenz in den Jahresmittelwerten (JMW) der Stickoxidkonzentrationen zu erkennen. Daher wird für den Basisfall ein Umgebungs-NO_x-Konzentrationsniveau von 10 ppb und ein NO:NO₂ Mischungsverhältnis von 0.5 angenommen. Gemäß Nielsen und Wisthaler 2025 [17] ergibt sich somit für MEA* eine Nitramin Konversion von 14 %.

Tabelle 3: Gemessene Stickoxidkonzentrationen und Verhältnisse an der Station Rapperswil-Jona

Jahr	JMW NO [ppb]	JMW NO ₂ [ppb]	JMW NO _x [ppb]	NO:NO ₂ [1]
2019	5.6	10.9	16.5	0.5
2021	4.6	9.3	14.0	0.5
2022	9.1*	11.9*	21.0*	0.77*
2023	2.9	7.6	10.5	0.4

2.7. Untersuchungsgebiet und Modell Set-Ups für primäre und sekundäre Amine, Nitramine, Nitrosamine und Aldehyde

Abbildung 5 zeigt die KVA Linth und die Einbettung der KVA in die unmittelbare Umgebung von der Zufahrt von Bilten aus, d.h. von Norden (NNW) aus. Abbildung 6 zeigt die KVA Linth sozusagen von der anderen Seite (SO) von Niederurnen aus. Auf eine äußerst rechenzeitintensive Simulation mit Berücksichtigung der Gebäudeumströmung kann verzichtet werden, da der Kamin Gebäude im Umfeld der KVA deutlich überragt. Um in dieser

Pilotstudie ein großes Rechengebiet abdecken zu können und den statistischen Fehler bei den berechneten Schadstoffkonzentrationen beim Auszählen gering zu halten, wurde eine Auszählgitter Maschenweite von 50 m x 50 m gewählt. Die verwendete Partikelanzahl zur Repräsentation der 99.5 m hohen Punktquelle wurde recht hoch mit 2000 Partikeln pro Sekunde gewählt. Das entspricht 7'200'000 integrierten Partikeltrajektorien pro berechnetem Stundenmittelwert.



Abbildung 5: KVA Linth und Umgebung, Blickrichtung von Bilten (Linth-Escherstrasse) aus gesehen.



Abbildung 6: KVA Linth und Umgebung, mit Blickrichtung von Niederurnen.

Das betrachtete Untersuchungsgebiet der KVA Linth ist in Abbildung 7 dargestellt. Der äußere Rahmen zeigt den Ausschnitt (44.85 km x 40.05 km) der gelieferten Daten der Windfeldbibliothek [8]. Der innere Rahmen (30.95 km x 35 km) zeigt die Domain der Ausbreitungsrechnungen für das Modell GRAL an. Die Gitterspezifikationen sind in Tabelle 4 aufgeführt.

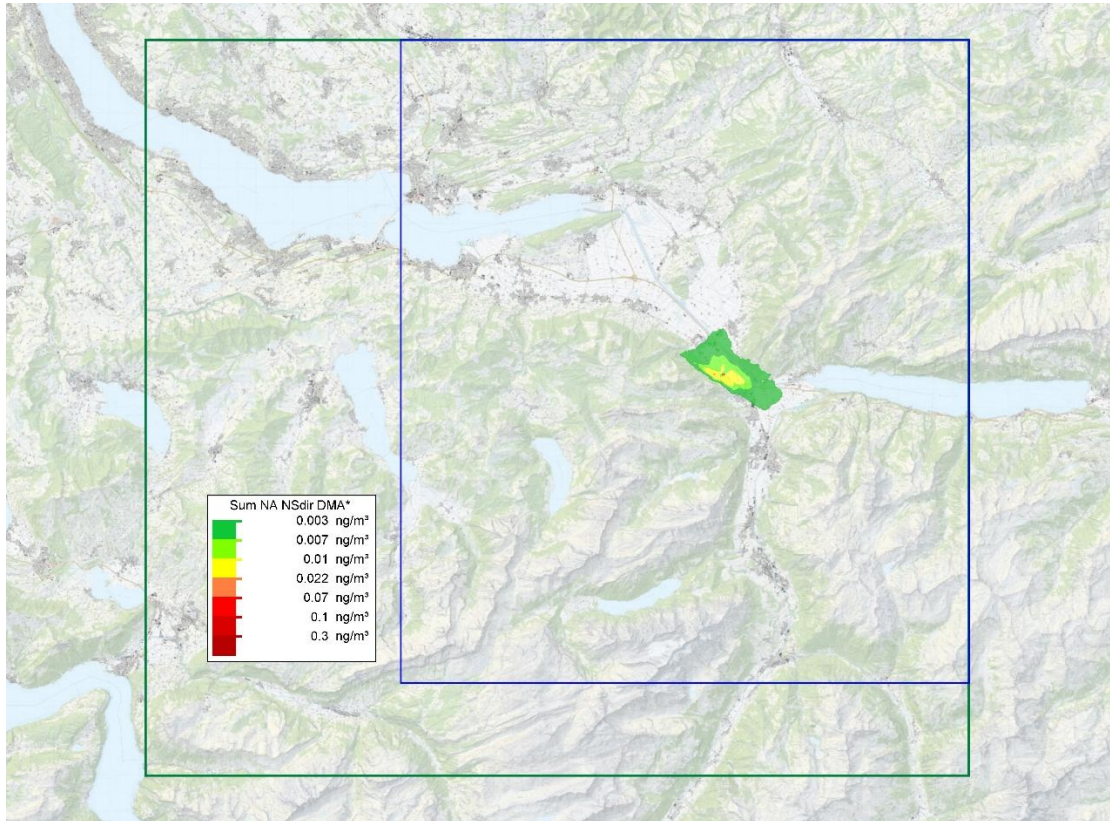


Abbildung 7: Untersuchungsgebiet, Ausschnitt überlieferte Windfeldbibliothek Daten (äußerer grüner Rahmen) und gewählte Modelldomain für Ausbreitungsrechnungen (blauer Rahmen).

Tabelle 4: Modell Domain Informationen für die GRAMM Windfeldbibliothek und GRAL Simulationen. Beim der Domain Information für die Windfeldbibliothek ist der Ausschnitt der gelieferten Daten [8] angegeben.

	EPSG 21781				Area [km ²]	horizontal resolution [m x m]
	West	East	North	South		
GRAMM Windfeld-Bib.	690000	734850	240000	199950	1796.2	150 x 150
GRAL Domain	703900	734850	240000	205000	1083.3	50 x 50

Luftgüte-Messungen zum Hintergrund von spezifizierten Amin Konzentrationen bzw. Nitramin oder Nitrosamin Konzentrationen liegen nicht vor.

In den Ausbreitungsrechnungen wird daher die Zusatzbelastung durch MEA das aufgrund seiner Volatilität bei der CO₂-Abscheidung entweicht, stündlich über ein ganzes Jahr berechnet. Gleichzeitig wird die hypothetische MEA* Belastung berechnet. Die hypothetische MEA* Belastung stellt eine (sehr konservative) obere Grenze der Nitramin Bildung dar. Eine Abschätzung des realistischeren Nitramin Anteils von 14 % erfolgt gemäß Nielsen und

Wisthaler, 2025 [17] und den von der Luftgüte Messstation Rapperswil-Jona projizierten NO_x Umgebungsbedingungen, siehe Abschnitt 2.6.

Zusätzlich wird die Ausbreitung von sekundären Amin-Emissionen simuliert. Basierend auf einem hypothetischen DMA-Radikal „DMA“-Bildung erlaubt dieses Vorgehen eine Abschätzung der möglichen Bildung von Nitraminen, Nitrosaminen und Iminen.

Bei der CO₂-Abscheidung und Amin Rückgewinnung können stabile Nitrosamine gebildet werden. Hierzu werden Ausbreitungsrechnungen für das in Tabelle 5 gelistete Szenario „NS direkt“ gerechnet.

Für Aldehyde erfolgt ein weiterer Satz von Ausbreitungsrechnungen. Dabei wird die Gesamtbelastung als Summe der separat gerechneten Verbindungen Acetaldehyd und Formaldehyd ermittelt.

Die unterschiedlichen Settings für diese Simulationen sind in Tabelle 5 gelistet.

Tabelle 5: Gewählte Einstellungen/Settings für die unterschiedlichen Läufe, siehe Text.

Parameter	MEA	DMA	NS direkt	ALD
V _D (m/s)	0.026	0.026	0.026	0.01
WetDepos c _w	0.00012	0.00012	0.00012	0
WetDepos α _w	0.6	0.6	0.6	0
k _{OH} Mo- lek/(cm ³ s)	7.61E-11	6.49E-11	0	0
branching ratio	0.3	0.38	0	0

2.8. Emissionen

Für den Standort KVA Linth wurden die notwendigen Emissionsdaten und Quellparameter zur Durchführung der Ausbreitungsrechnungen vom Auftraggeber bereitgestellt. Neben dem bestehenden Kamin wird aus verfahrenstechnischen Gründen ein zweiter, gleich hoher Kamin errichtet. Weitere benötigte emissionsbezogene Parameter wurden berechnet. In Tabelle 6 sind die für die Simulationen verwendeten emissionsbezogenen Parameter für „Linie 1“ und „Linie 2“ aufgeführt, sofern es Abweichungen in den Abgas Parametern gibt. Der erwartete jahresdurchschnittliche MEA Emissionswert liegt unter 1 mg/Nm³ Der Kurzzeit MEA Emissionswert stellt ein maximales Tagesmittel dar und beträgt 5 mg/m³.

Die Abbaureaktionen der Nitramine und Nitrosamine, siehe Glg 3 und Glg 4, werden nicht berücksichtigt. Die Messung von Nitrosamin Emissionen ist äußerst schwierig und erfordert hochsensibles Messgerät. Emissionen aus dem Betrieb von Pilotanlagen wurden häufig als „< Nachweisgrenze“ angegeben [54]. Die angegebenen direkten Nitrosamin Emissionen liegen ungefähr 2 Größenordnungen höher als die von Morken et al., 2014 [54] im Rauchgas ermittelten toxikologischen Substanzen: N-nitrosodimethylamine (NDMA), N-nitrosomethylethylamine (NMEA), N-nitrosodiethylamine (NDEA), N-nitrosodiethanolamine (NDELA), Dimethylnitramin (DMA-NO₂) und Diethylnitramin.

Tabelle 6: Quellparameter Punktquelle KVA Linth und Emissionen.

Parameter	Werte und Einheiten
Koordinaten Kamine Rechts-/Hochwert	Linie 1: 721464 m / 221794 m Linie 2: 721466 m / 221791 m
Kaminhöhe	99,5 m / 99,5 m
Durchmesser am Auslass	1.3 m / 1.5 m
Feuchter Abgasvolumenstrom	Linie 1 25'574 Nm ³ /h Linie 2 34049 Nm ³ /h
Feuchtegehalt	7.30 % (Vol) bzw. 4.75 % (Masse)
Abgastemperatur	40.7 °C
Abgasgeschwindigkeit	5.4 m/s
Trockener Abgasvolumenstrom	Linie 1: 21'222 Nm ³ /h Linie 2: 28253.8 Nm ³ /h
MEA Emission	1 mg/Nm ³ * / 5 mg/Nm ³ **
DMA Emission	0.0001 mg/Nm ³
NS Emission	0.001 mg/Nm ³
Formaldehyd	5 mg/Nm ³
Acetaldehyd	5 mg/Nm ³

*Jahresmittel

**Kurzzeit maximales Tagesmittel

2.9. Meteorologische Daten und Windfelder

Meteorologische Daten wurden verwendet, um die Wind- oder Strömungsverhältnisse sowie Turbulenzverhältnisse über Stabilitätsklassen zu charakterisieren. Weiterhin dienten meteorologische Daten zur Berechnung und Erstellung der Windfeldbibliothek und zur stündlichen Zuordnung der Windfelder und Schichtungsverhältnisse (Pasquill-Guifford-Turner Stabilitätsklassen [55],[56],[57],[58]) für die Ausbreitungsrechnung.

Dazu wurden Windmessungen von Glarus, Schmerikon, Hörnli und Säntis verwendet [59]. Die Lage dieser Stationen ist in Abbildung 8 dargestellt. Zur Bestimmung der Stabilitätsklassen wurden Globalstrahlungsmessungen von Glarus zusammen mit den dortigen Windmessungen verarbeitet. Die Wind- und Globalstrahlungsdaten wurden vom Bundesamt für Meteorologie und Klimatologie MeteoSchweiz bezogen [59]. Die Windfeldbibliothek wurde von ECOLOT [8] mit dem Modell GRAMM [11] gerechnet und unter der Nutzung der oben genannten meteorologischen Station für das in Abbildung 8 gezeigte Gebiet erstellt. Weitere Details sind im nachfolgenden Unterabschnitt „Wind“ dargestellt.

Zur Berechnung der nassen Deposition wurden stündliche Niederschlagsdaten für das Jahr 2019 von der Station Weesen über das IDAWEB [59] bezogen. Die Jahresniederschlagssumme betrug in Summe 1697 mm/a.

Zur Abschätzung der OH-Radikal Konzentrationen wurden Globalstrahlungsdaten von der Station Glarus verwendet.

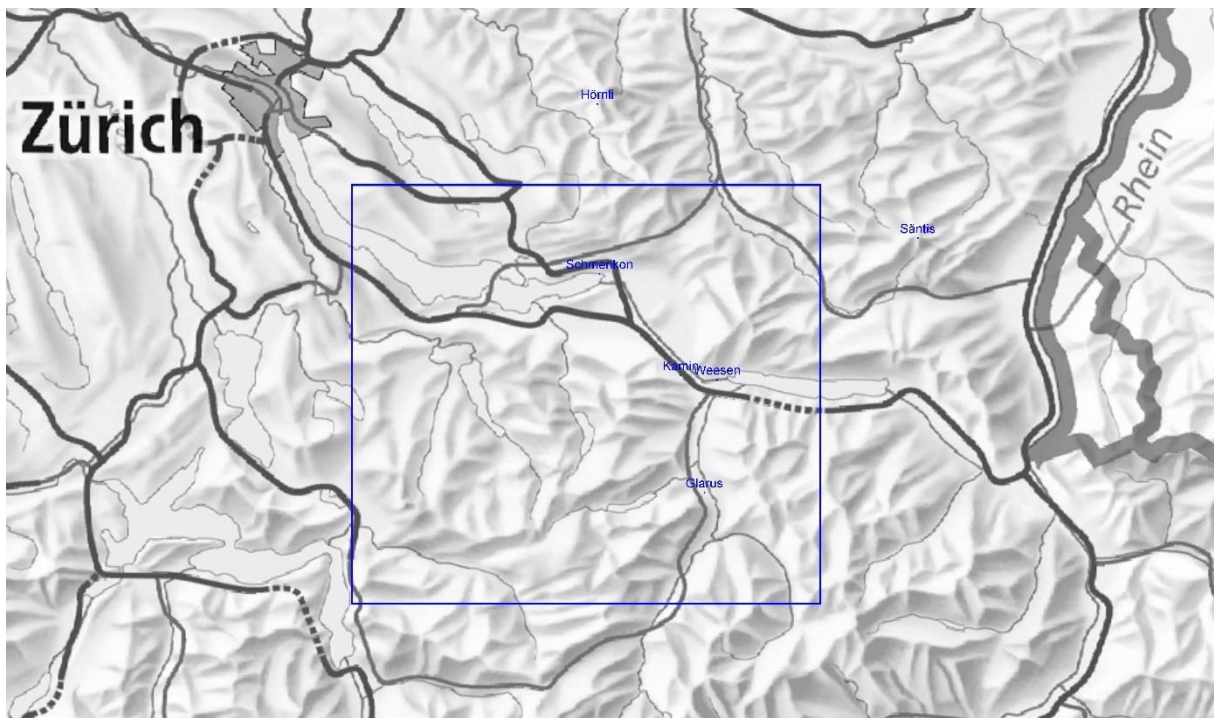


Abbildung 8: Lage der Meteorologischen Stationen, der KVA Linth und der Modelldomain der Windfeldbibliothek.

2.10. OH-Radikal

Zur Vorgabe der stündlichen $\cdot\text{OH}$ Radikal Konzentrationen über ein Jahr wurde basierend auf Literaturstudien [49],[50],[51],[52],[53] ein Maximalwert von $7 \cdot 10^6$ Moleküle/cm³ und ein Minimalwert von $1 \cdot 10^4$ Moleküle/cm³ vorgegeben. Die Modulation zwischen den täglichen Minimas und Maximas erfolgte über die Globalstrahlungsmessungen der meteorologischen Station Glarus.

Abbildung 9 zeigt exemplarisch den Verlauf für 9 Tage im Mai 2019 mit maximalen $\cdot\text{OH}$ Konzentrationen und den Verlauf mit geringen $\cdot\text{OH}$ Konzentration für 8 Tage im Ende November / Anfang Dezember in Abbildung 10.

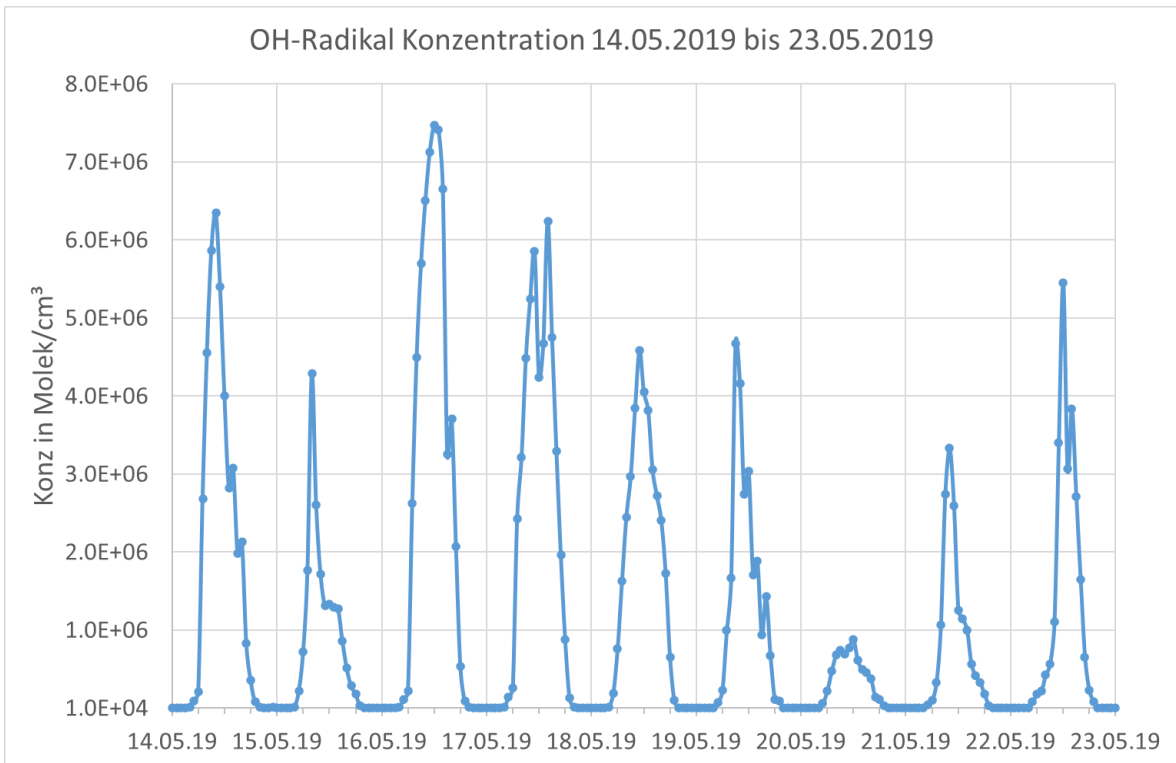


Abbildung 9: Verlauf der vorgegebenen -OH Radikal Konzentration im Zeitraum 14.05. bis 23.05.2019.

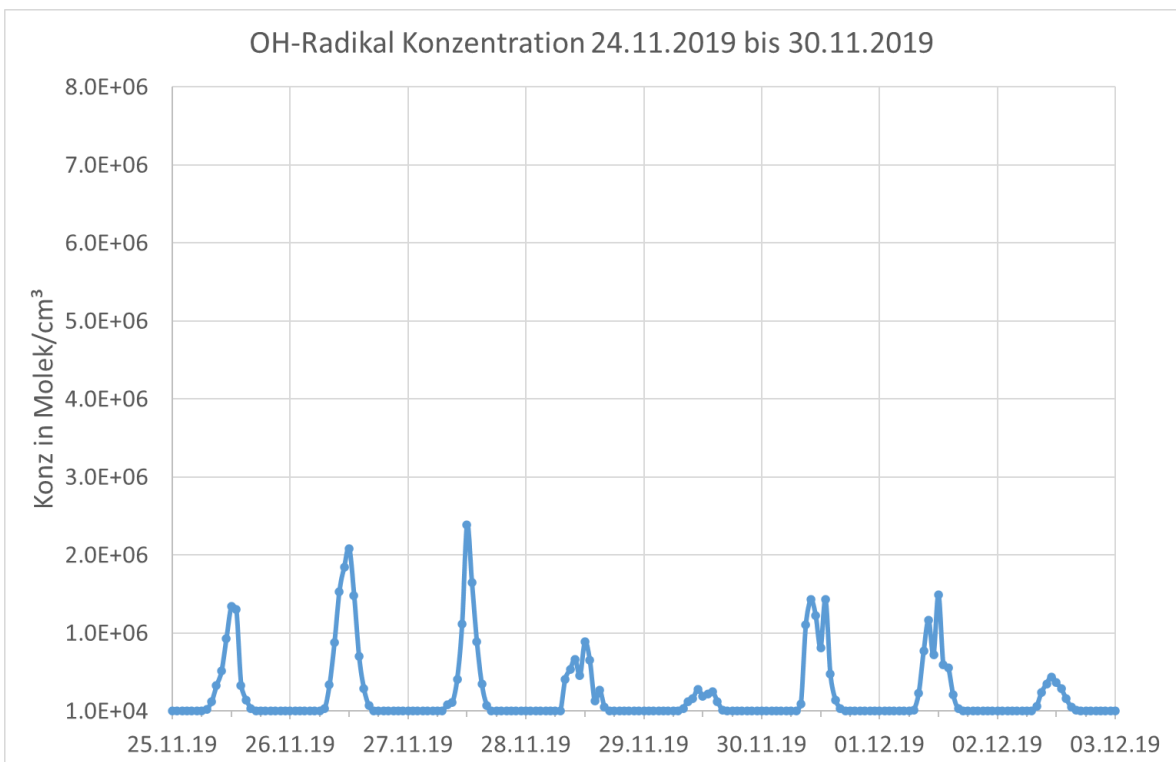


Abbildung 10: Verlauf der vorgegebenen -OH Radikal Konzentration im Zeitraum 25.11. bis 03.12.2019.

2.11. Wind

Eine Windfeldbibliothek mit einer stündlichen Abdeckung über das ganze Jahr 2019 hinweg wurde von ECOLOT [8] erstellt. Dabei wurde die im GRAL Userguide [15] beschriebene Match-to-Observation Methodik angewandt.

In Abbildung 11 und Abbildung 12 sind exemplarisch zwei typische, im Bereich der Linth-Ebene häufiger vorkommende Windfelder für stabile und konvektive Verhältnisse dargestellt.

Nachfolgend sind bodennahe Wind- Messungen und Simulationen für die im gewählten Modellgebiet gelegenen Stationen Schmerikon sowie Glarus (Abbildung 13 bis Abbildung 24) dargestellt. Die simulierten bodennahen (10 m) Verhältnisse am Standort und in 50 m Höhe über Grund (Abbildung 25 bis Abbildung 29) werden dargestellt für:

- I. Jahresmittel Windrose inklusive Häufigkeit der Windgeschwindigkeitsklassen je Windrichtungssektor gemittelt über ein Jahr
- II. Tagesgang der Windrichtung für charakteristisch auftretende Windrichtungen gemittelt über ein Jahr
- III. Häufigkeiten der Windgeschwindigkeitsklassen gemittelt über ein Jahr

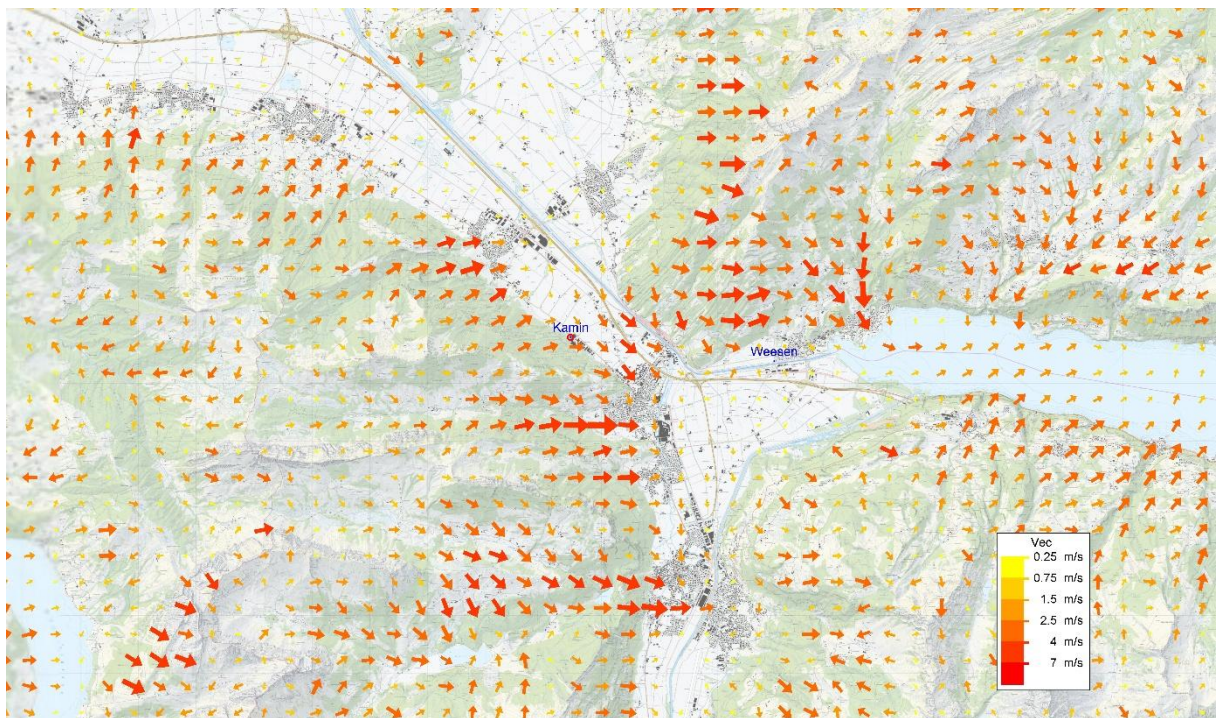


Abbildung 11: Exemplarisches Windfeld im Bereich KVA Linth für stabile Schichtungsverhältnisse.

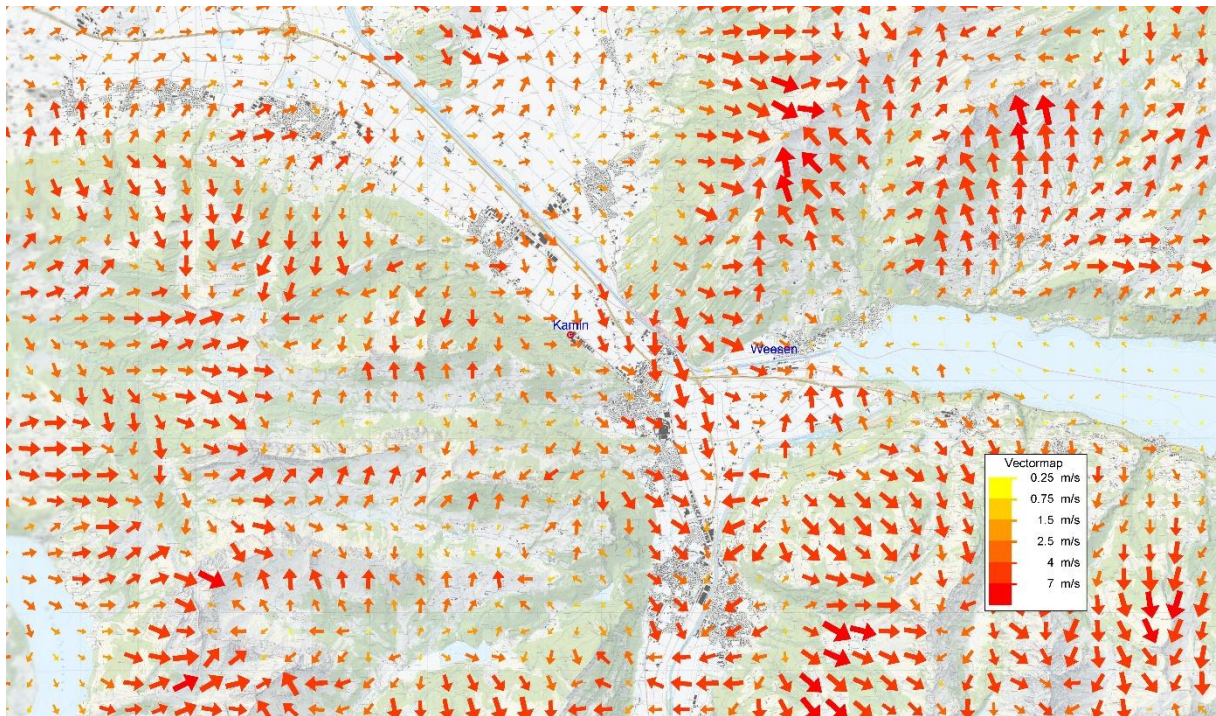


Abbildung 12: Exemplarisches Windfeld im Bereich KVA Linth für konvektive Schichtungsverhältnisse.

Wind Schmerikon

Die an der meteorologischen Messstation Schmerikon gemessene Windrose (Abbildung 13) wird hinsichtlich der Windrichtung und Häufigkeit der simulierten Windgeschwindigkeitsklassen je Windrichtungssektor gut wiedergegeben (Abbildung 14). Auch der gemessene mittlere Tagesgang der Windrichtung (Abbildung 15) für charakteristische, dominante Windrichtungen wird für die meteorologische Station Schmerikon durch die Modellsimulation (Abbildung 16) gut repräsentiert. Die nachts häufig vorkommenden (gemessenen) ONO (ENE) Winde werden im Modell durch häufiger vorkommende Ost-(E)-Winde abgebildet. Die tagsüber dominanten WSW-Winde werden vom Modell etwas überschätzend wiedergegeben, dafür werden die häufigen W-Winde vom Modell unterschätzt (siehe Abbildung 15 und Abbildung 16). Dies spiegelt sich auch Windrosen in Abbildung 13 und Abbildung 14 wieder. Die Häufigkeit der Windgeschwindigkeitsklassen wird noch gut an der Messstation Schmerikon reproduziert (siehe Abbildung 17 und Abbildung 18). Kalmen (< 0.5 m/s) werden vom Modell deutlich überschätzt, Windgeschwindigkeiten im Bereich 1 m/s bis 2 m/s werden hingegen vom Modell deutlich unterschätzt. Dadurch sind aufgrund verminderten bodennahen Austauschprozessen eher überschätzende Konzentrationen zu erwarten.

Wind Glarus

Abbildung 19 zeigt die gemessene Windrose (Häufigkeit der Windgeschwindigkeitsklasse je Windrichtungssektor) für Glarus. Abbildung 20 zeigt die simulierte Windrose. Hinsichtlich der Windrichtung ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung. Die simulierten Windgeschwindigkeitsklassen je Windrichtungssektor werden gut wiedergegeben. Die Simulation bildet die häufig gemessenen WNW und SO Winde sehr gut ab. NW-Winde und OSO-Winde werden etwas überschätzt. Insgesamt ergibt sich eine sehr gute Wiedergabe der dominanten Tagegänge der Windrichtungen, siehe Abbildung 21 und Abbildung 22. Die Häufigkeit der gemessenen Windgeschwindigkeitsklassen ist in Abbildung 23, die

Häufigkeit der simulierten Windgeschwindigkeitsklassen ist in Abbildung 24 dargestellt. Das Modell überschätzt die Kalmen (< 0.5 m/s) sowie Windgeschwindigkeiten im Bereich 1 m/s bis 6 m/s. Allerdings werden Windgeschwindigkeiten im Bereich 0.5 m/s bis 1 m/s deutlich unterschätzt.

Synopsis Wind Schmerikon – Glarus – Standort

Bei der Station Schmerikon dominieren die östlichen Windkomponenten im Vergleich zu den westlichen Windkomponenten. Die östlichen Windkomponenten sind nächtlichen Kaltluftabflüssen sowie Eindrehen des Windes aufgrund des Geländes zuzuordnen. Die westlichen Windkomponenten der übergeordneten Strömung und Kanalisierung, Talaufwinden sowie Seewinden. Die Station Glarus weist deutlich stärkere westliche Windkomponenten im Vergleich zu den östlichen und südöstlichen Windkomponenten auf. Die westlichen Windkomponenten sind der übergeordneten Strömung und Überströmungseffekten in den Tagstunden zuzuordnen. Die in den Nachtstunden dominanten Winde aus südlichen bis südöstliche Richtungen sind Talauswinden zuzuordnen. Die Station Glarus repräsentiert stärker die übergeordneten Windverhältnisse im Vergleich zur Station Schmerikon.

Die simulierte bodennahe Windrose am Standort Linth ist in Abbildung 25, der mittlere Tagesgang der dominanten Windrichtungen ist in Abbildung 26 dargestellt. Auffallend ist bei der simulierten Windrose die geringe Häufigkeit von Winden aus den Bereichen Nordost bis Ost, - bzw. die sehr hohe Häufigkeit der Winde aus W, WSW und SW. Die höheren Windgeschwindigkeiten deuten auf Überströmungseffekte aus W, WSW und SW hin. Winde aus SW, WNW sowie die niedrigeren Windgeschwindigkeiten aus W und WSW deuten auf Hangabwinde hin. Die nachts häufigeren SO Winde sind wohl Talauswinden von Glarus und Tälern oberhalb von Glarus zuzuordnen. Die simulierten bodennahen Verhältnisse liegen hinsichtlich der Windrichtung tagsüber zwischen den für Schmerikon und Glarus simulierten Verhältnissen, bei den nächtlichen Verhältnissen werden SO Winde ähnlich wie bei Glarus abgebildet. Die simulierten bodennahen Verhältnisse spiegeln die komplexen orographischen Verhältnisse, unter anderem die Lage unterhalb des darüberliegenden Berganges, wieder.

Die Auswertung für die simulierten Windverhältnisse am Standort in 50 m über Grund, siehe Abbildung 28 und Abbildung 29, ergibt deutlich höhere Anteile aus OSO, dabei dominieren Windgeschwindigkeiten über 3 m/s. Im Vergleich zur bodennahen Windrose gibt es einen Schwenk der dominierenden Windrichtung von OSO (in 10 m Höhe, Abbildung 25) zu WNW. Tagsüber dominieren Winde aus W und WSW und nachts dominieren Winde aus OSO, siehe Abbildung 29. Die Häufigkeit der nächtlichen Winde aus WSW und W nimmt im Vergleich zu den Auswertungen in 10 m über Grund deutlich ab, siehe Abbildung 26.

Aufgrund der tagsüber dominierenden Winde aus WSW und W ist das Maximum der MEA Radikal Bildung und somit die Bildung von schädlichen Nitraminen östlich der KVA Linth zu erwarten.

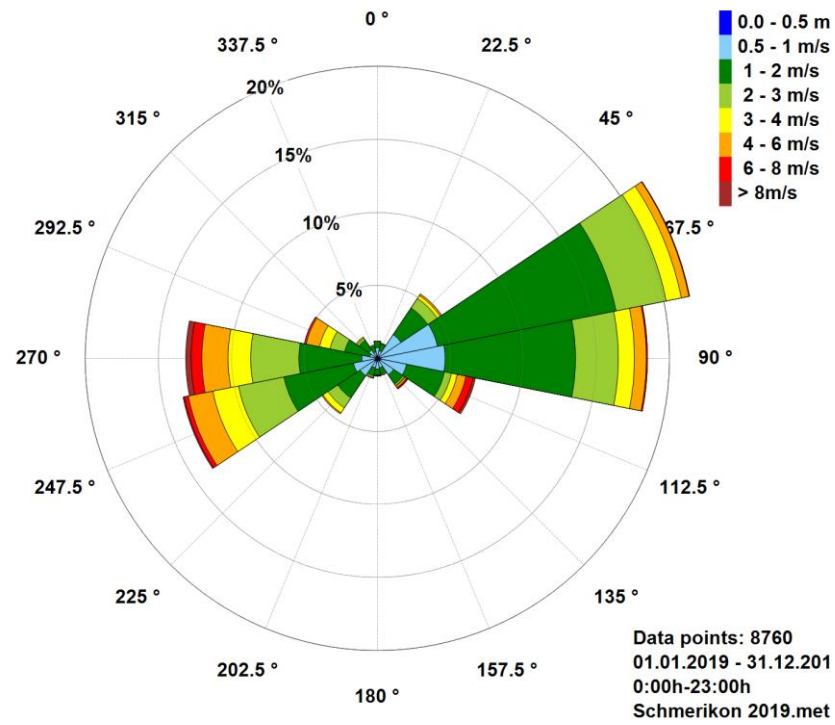


Abbildung 13: Gemessene Windrose an der meteorologischen Messstation Schmerikon.

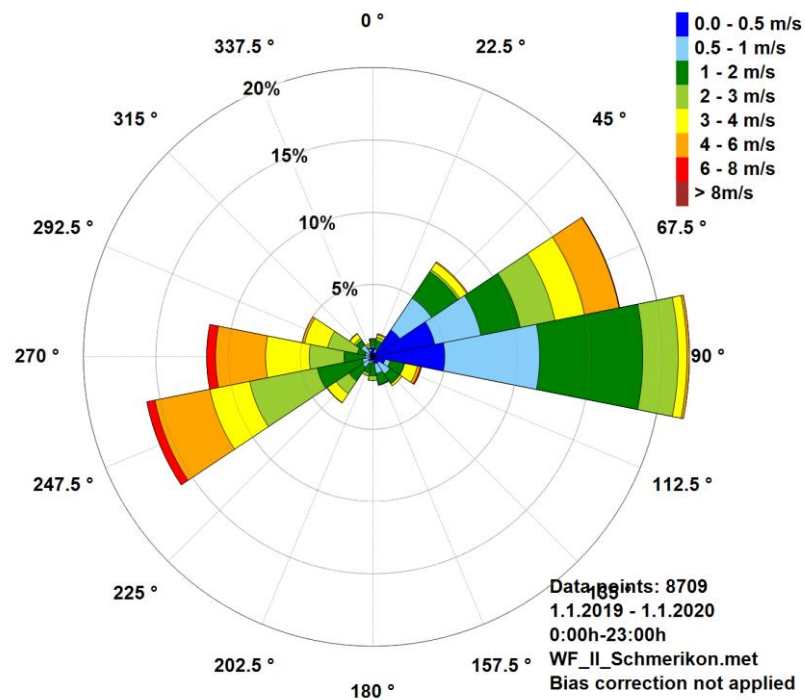


Abbildung 14: Simulierte Windrose an der meteorologischen Messstation Schmerikon.

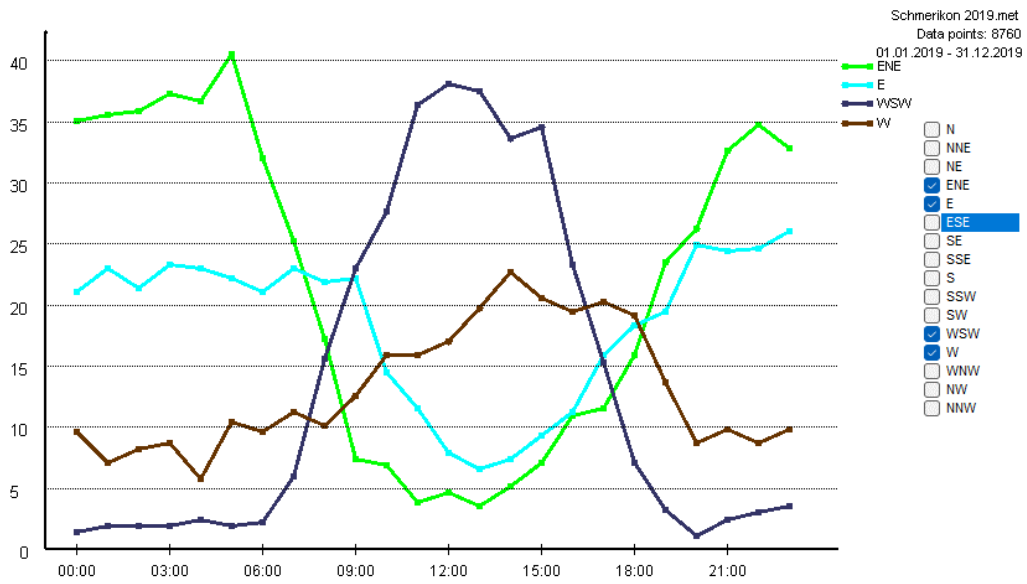


Abbildung 15: Gemessener tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen an der meteorologischen Messstation Schmerikon.

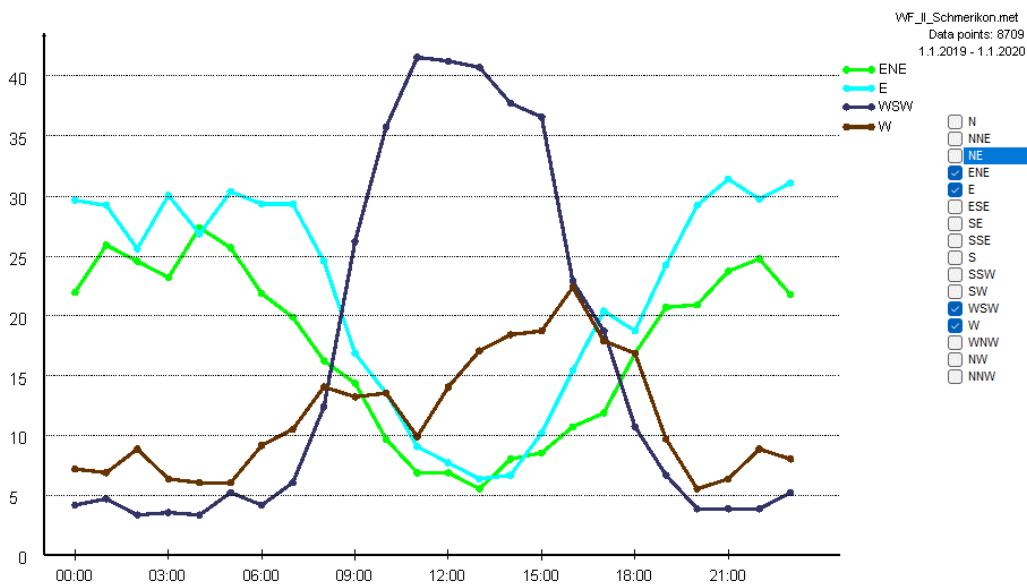


Abbildung 16: Simulierter tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen an der meteorologischen Messstation Schmerikon.

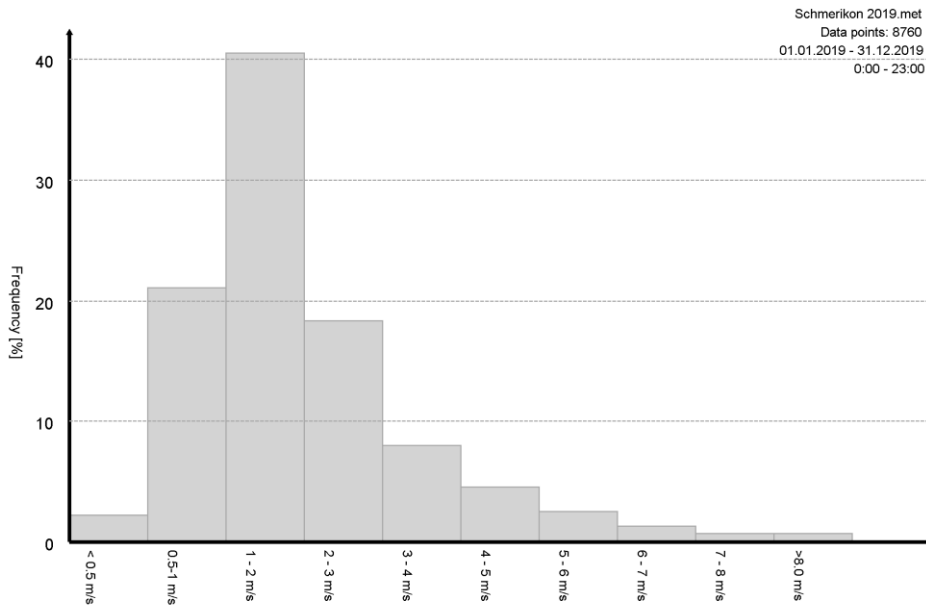


Abbildung 17: Gemessene Häufigkeit der Windgeschwindigkeit an der Station Schmerikon.

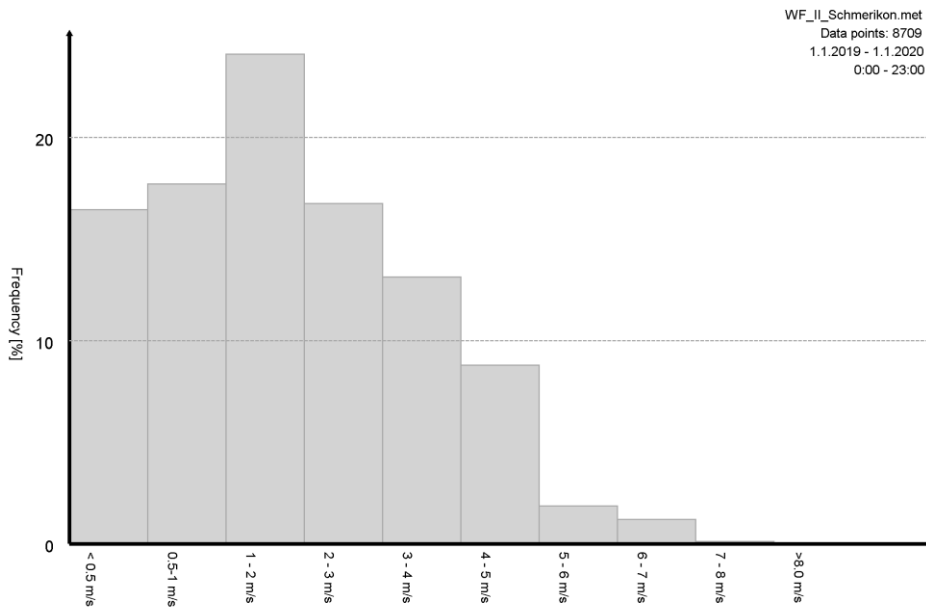


Abbildung 18: Simulierte Häufigkeit der Windgeschwindigkeit an der Station Schmerikon.

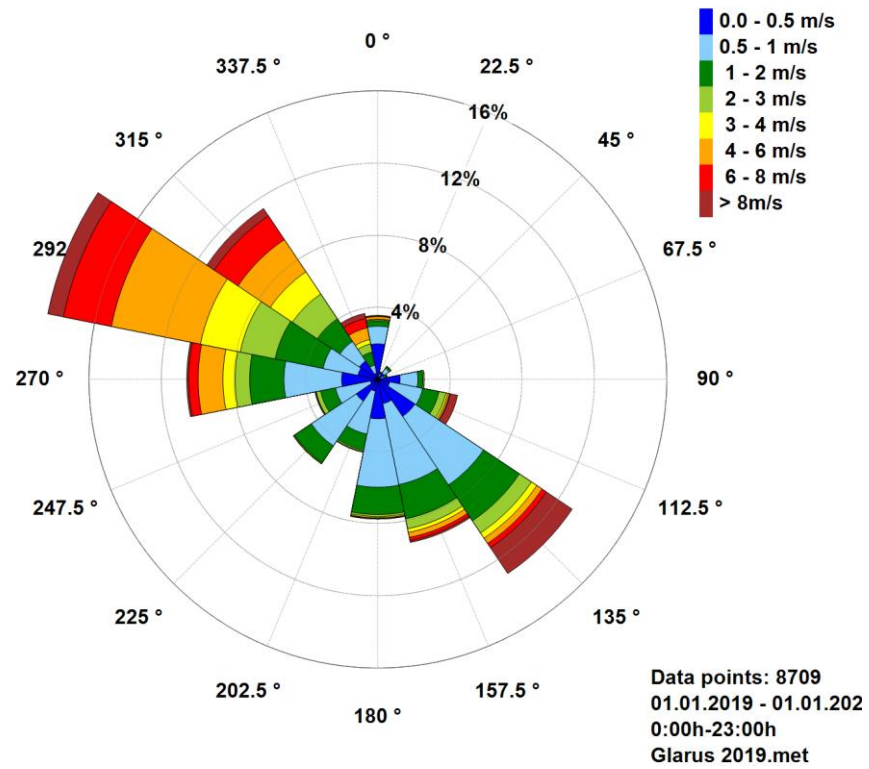


Abbildung 19: Gemessene Windrose (10 m) an der meteorologischen Station Glarus.

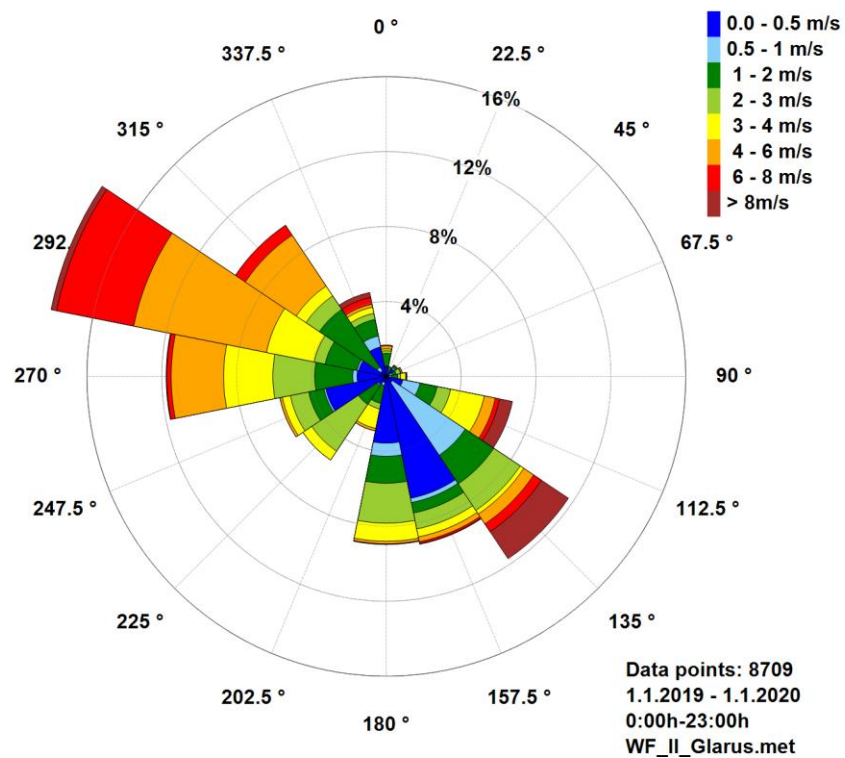


Abbildung 20: Simulierte Windrose (10 m) an der meteorologischen Station Glarus.

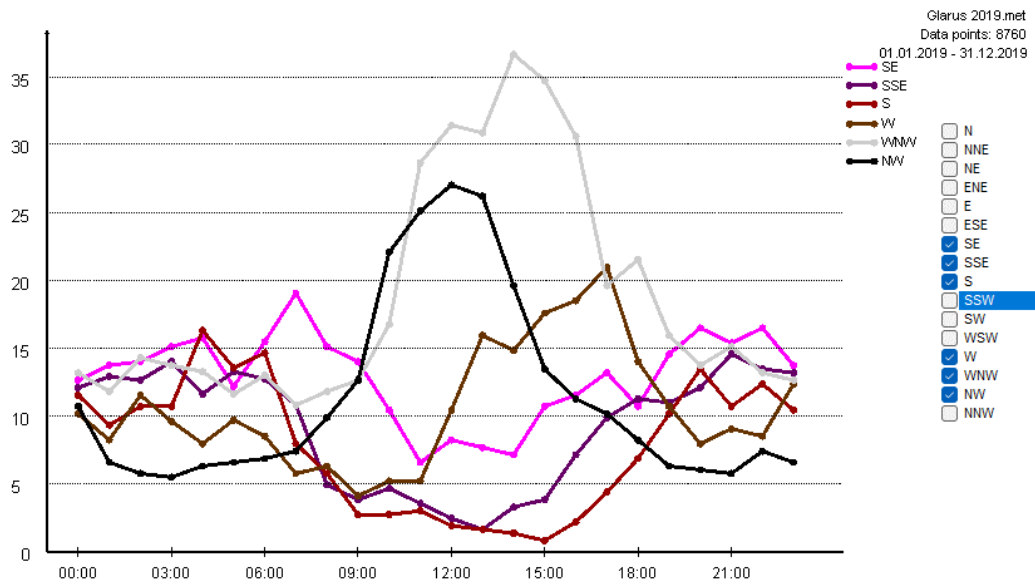


Abbildung 21: Gemessener tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen an der meteorologischen Messstation Glarus.

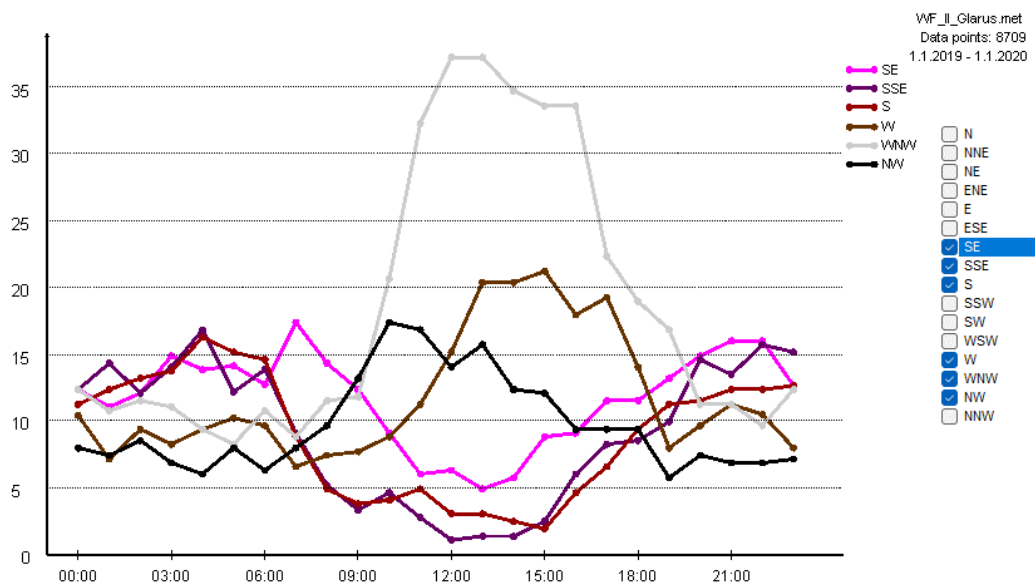


Abbildung 22: Simulierter tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen an der meteorologischen Messstation Glarus.

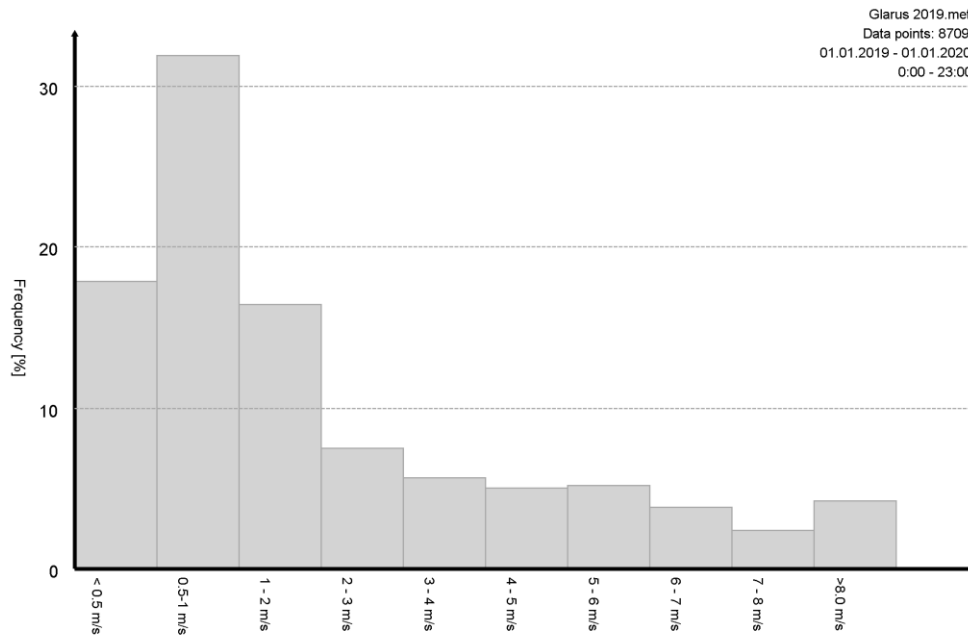


Abbildung 23: Gemessene Häufigkeit der Windgeschwindigkeit an der Messstation Glarus.

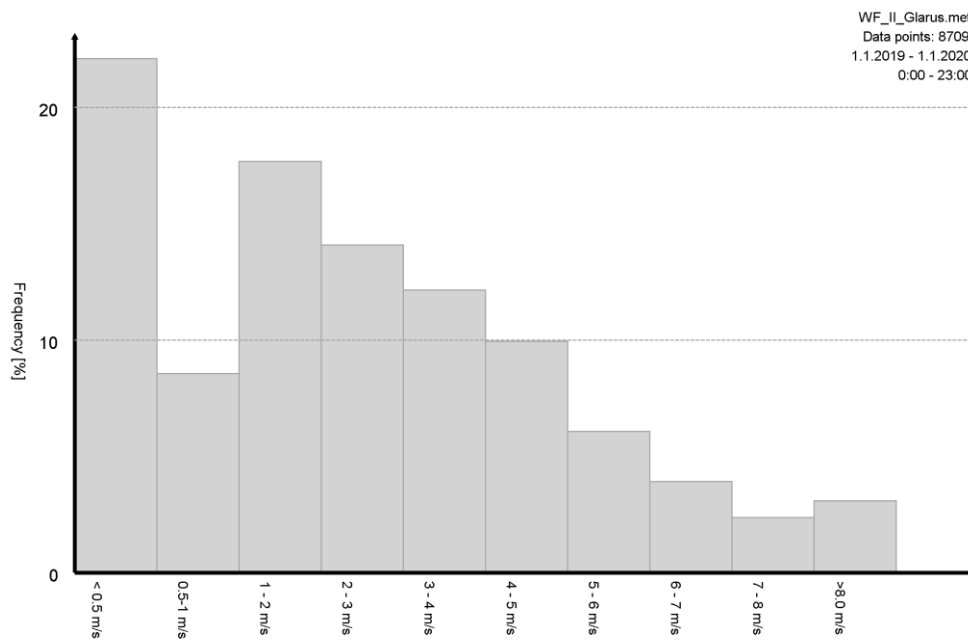


Abbildung 24: Simulierte Häufigkeit der Windgeschwindigkeit an der Messstation Glarus.

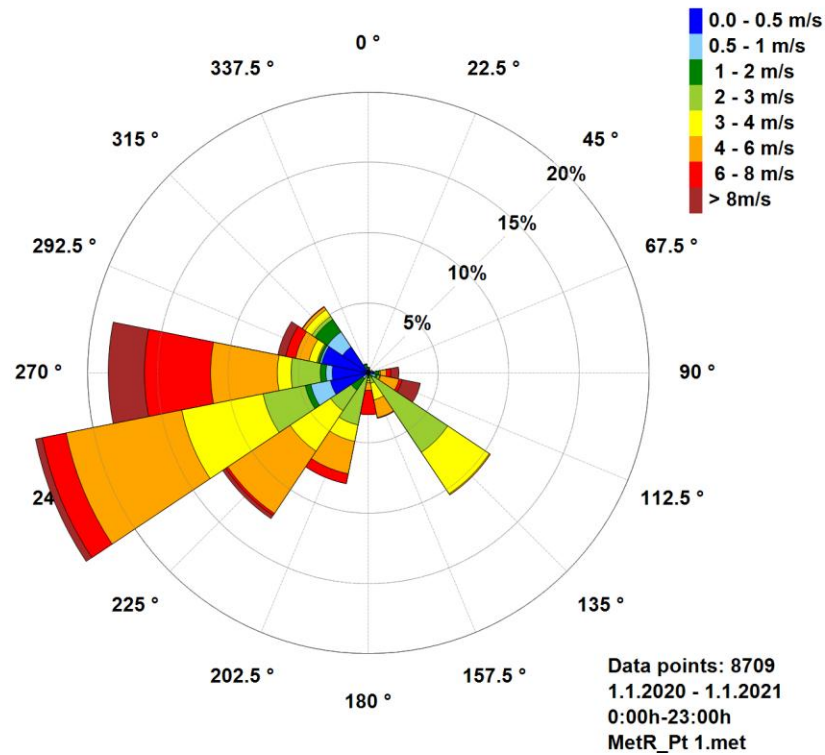


Abbildung 25: Simulierte Windrose (10 m) am Standort KVA Linth.

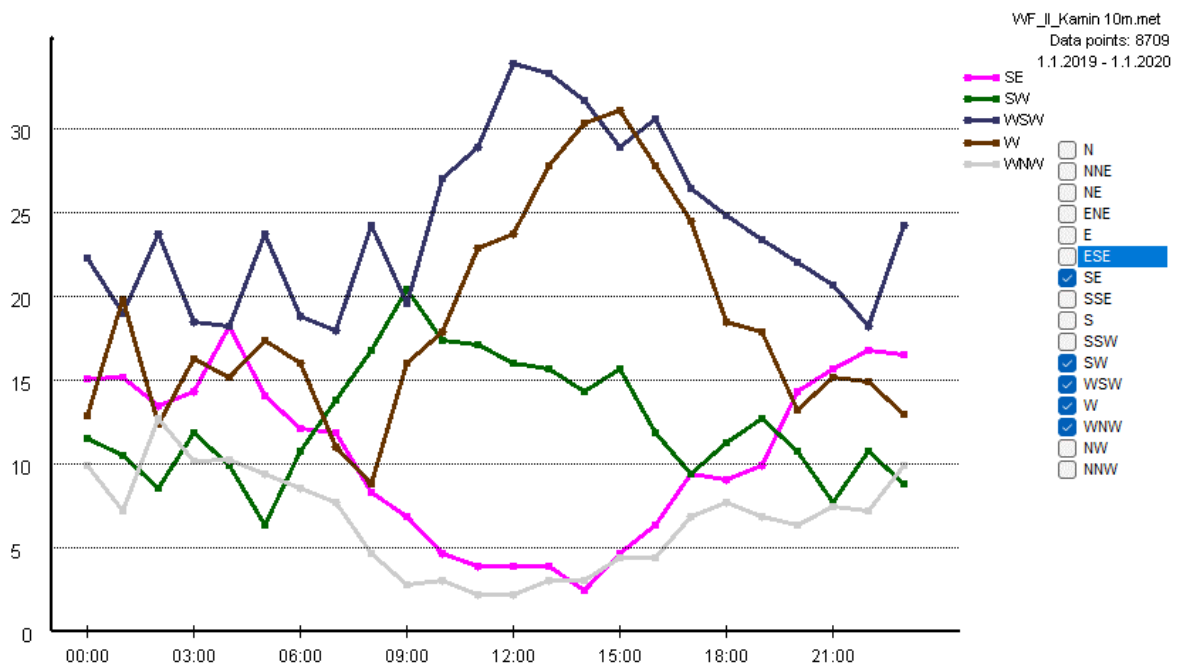


Abbildung 26: Simulierter tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen in 10 m am Standort KVA Linth.

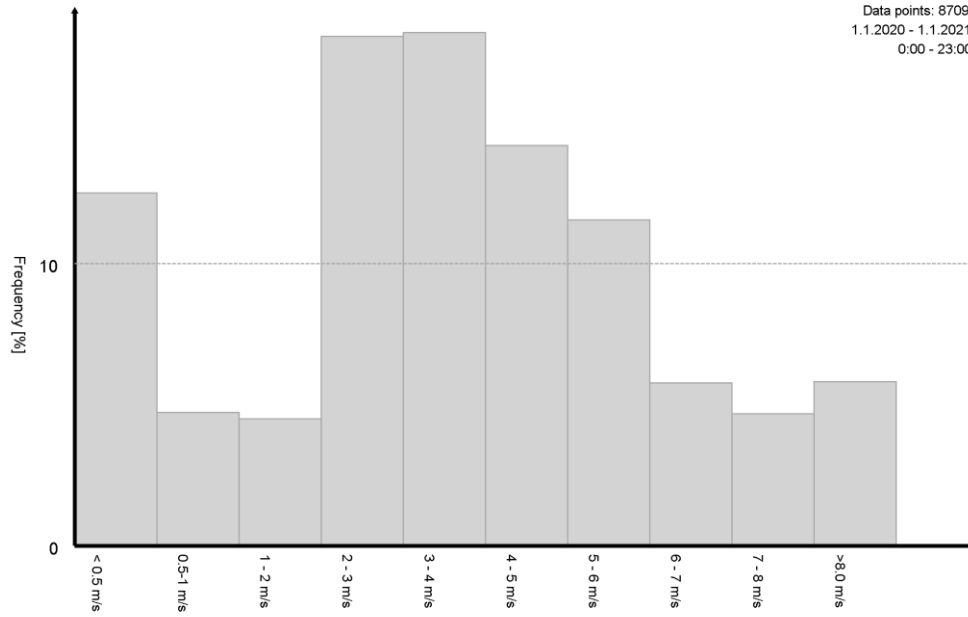


Abbildung 27: Simulierte Häufigkeit der klassifizierten Windgeschwindigkeit in 10 m am Standort KVA Linth.

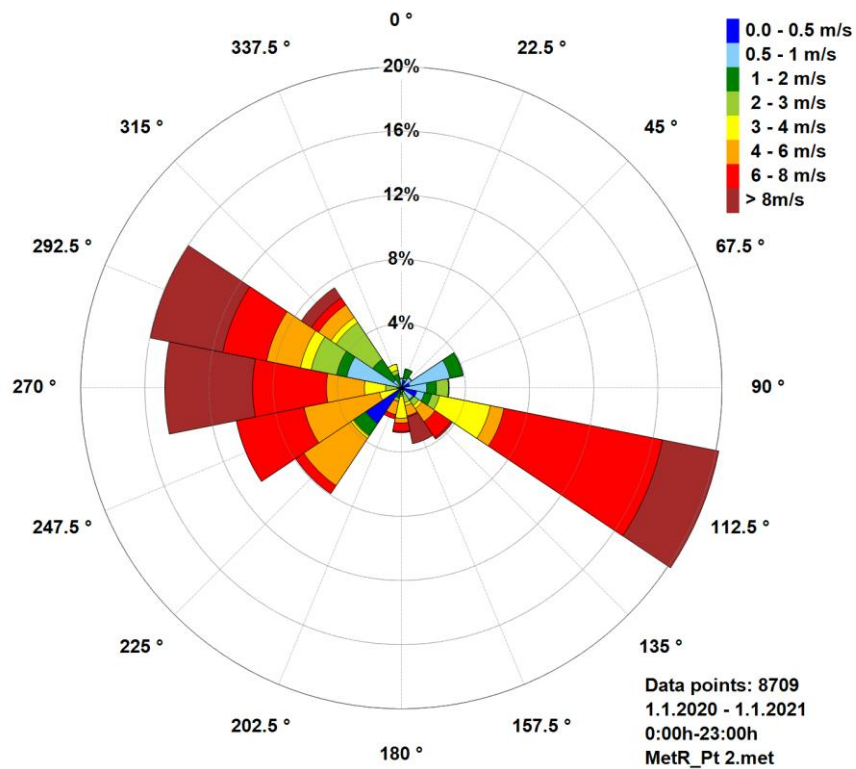


Abbildung 28: Simulierte Windrose in 50 m Höhe über Grund am Standort KVA Linth.

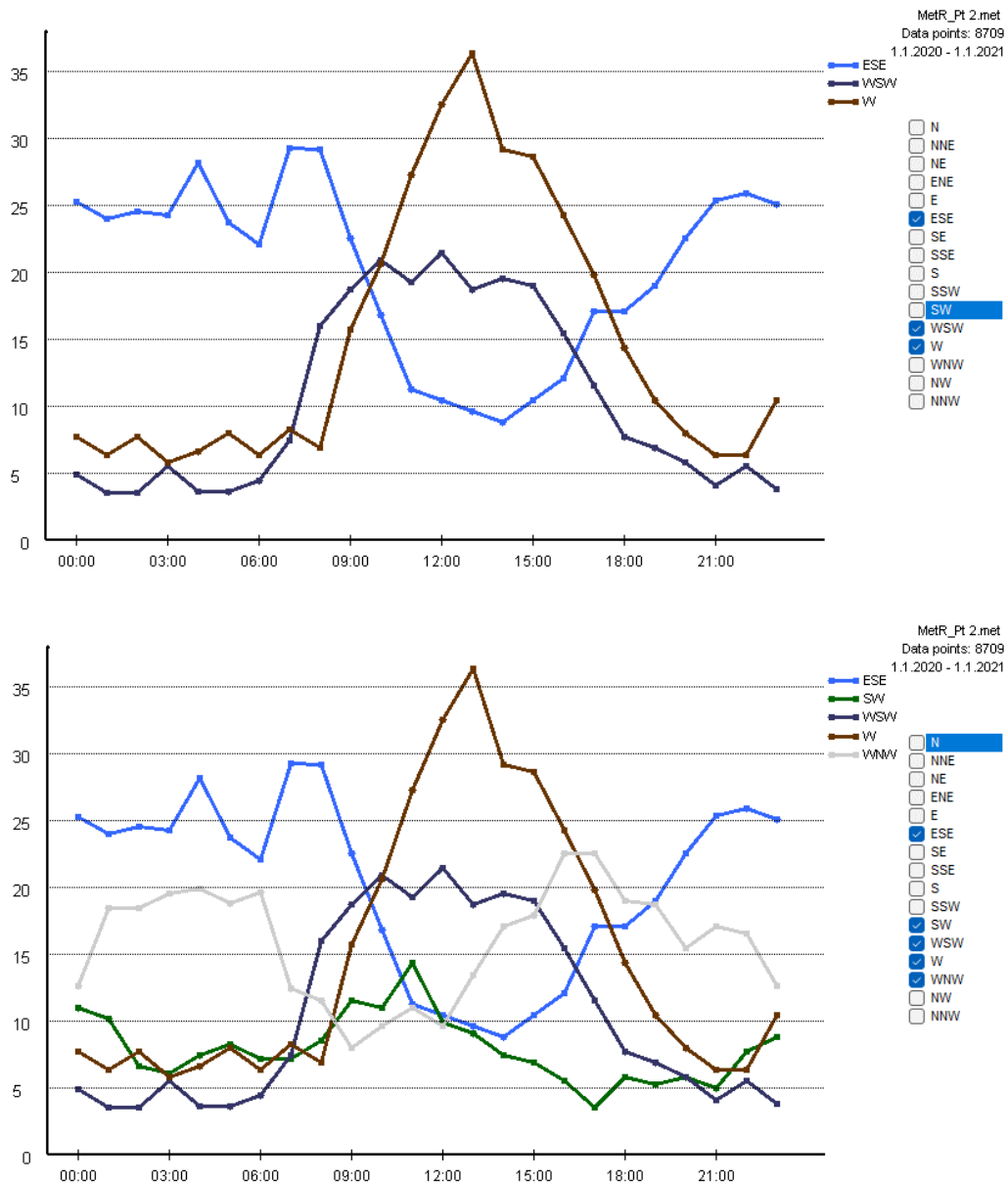


Abbildung 29: Simulierter tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen in 50 m am Standort KVA Linth.

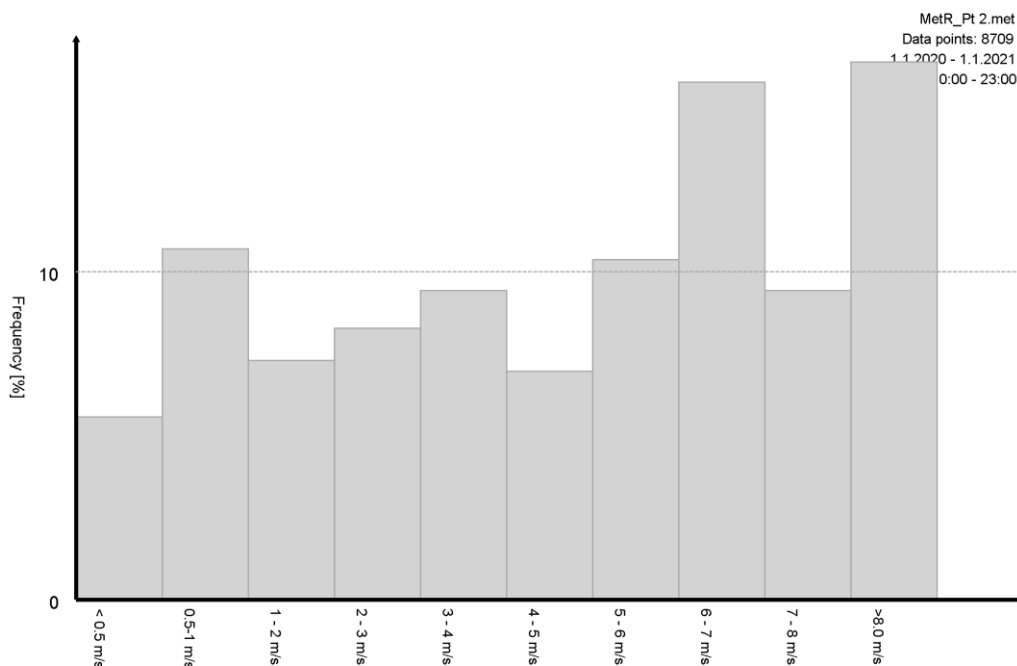


Abbildung 30: Simulierte Häufigkeit der klassifizierten Windgeschwindigkeit in 50 m am Standort KVA Linth.

3. Beurteilung Luft KVA Linth

Mit der in Abschnitt 2 angeführten Methodik und Eingangsdaten wurden mit dem Modell GRAL die Immissionen, d.h. Zusatzbelastungen von MEA und MEA* berechnet. Die MEA Zusatzbelastungen sowie trockene und nasse MEA Deposition sind in Abschnitt 3.1 dargestellt.

Basierend auf der berechneten MEA* Zusatzbelastungen erfolgt in Abschnitt 3.2 eine Abschätzung der Nitramin (NA) Konzentrationen sowie der MEA* Deposition.

In Abschnitt 3.3 werden die resultierenden Zusatzbelastungen infolge der Ausbreitung von sekundären Aminen betrachtet. Diese können in geringem Umfang bei der CO₂-Abscheidung und nachfolgenden Rückgewinnung von MEA entstehen. Hierzu wird DMA als Proxy für sekundäre Amine verwendet. Anhand der berechneten DMA-Radikal „DMA*“ Bildung ohne Betrachtung der weiteren Reaktionen des Amino-Radikals wird die mögliche Bildung von Nitraminen, Nitrosaminen und Iminen (in Summe) berechnet und betrachtet.

In Abschnitt 3.4 werden die Ergebnisse der Ausbreitung von direkten Nitrosamin (NS) Emissionen (ohne atmosphärische Abbaureaktionen) betrachtet. Diese direkten NS Emissionen können in sehr geringem Umfang im Zuge der CO₂-Abscheidung und MEA Rückgewinnung entstehen.

Die Konzentrationsfelder für abgeschätztes NA, DMA* und NS (ohne atmosphärische Abbaureaktionen) werden in Abschnitt 3.5 (graphisch) addiert und beurteilt.

In Abschnitt 3.6 werden die abgeschätzten Nitramin, DMA* und Nitrosamin Jahresmittel sowie maximale Konzentrationen für ausgewählte Orte, sogenannte Rezeptoren betrachtet.

In Abschnitt 3.7 erfolgt die Beurteilung der Ausbreitung von Acetaldehyd- und Formaldehyd-Emissionen.

Der Schwerpunkt der Darstellungen und Diskussion liegt bei den Jahresmittelwerten.

3.1. MEA-Ausbreitung Linth Ebene

Zunächst wird hier die Zusatzbelastung durch die Ausbreitung von MEA unter Berücksichtigung der nassen und trockenen Deposition über ein ganzes Jahr betrachtet. Anschließend werden die resultierenden Depositionsflüsse dargestellt.

MEA Zusatzbelastung

In Abbildung 31 und in Abbildung 32 ist das Jahresmittel der berechneten MEA-Konzentration dargestellt. Abbildung 32 zeigt die berechneten Jahresmittelwerte (JMW) im nahen Umfeld der KVA Linth (Detail). Die simulierten MEA-Konzentrationswerte sind ab $0.001 \mu\text{g}/\text{m}^3$ dargestellt, d.h. $1/10000$ des Zielwerts von $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$ aus Tabelle 2.

Im Jahresmittel liegen die gemittelten MEA Werte bis $0.0161 \mu\text{g}/\text{m}^3$ im bewaldeten Berghang 450 m bis 500 m westlich des Kamins der KVA. MEA Konzentrationen $> 0.003 \mu\text{g}/\text{m}^3$ erstrecken sich auf einen Umkreis von bis zu 1.3 km von der KVA Linth (Abbildung 32). Die berechnete MEA Verteilung ist vor allem NW – SO orientiert und zum Berghang der KVA Linth gedrängt, d.h. die stärksten Konzentrationsgradienten kommen durch den orographischen Einfluss zustande. Die berechneten MEA Zusatzbelastungen liegen weit, d.h. fast 3 Größenordnungen unter dem kritischen Wert von $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

Die MEA Konzentrationen für die Kurzzeit Emissionen sind in Abbildung 33 dargestellt. Die höchsten maximalen jahresdurchschnittlichen MEA Konzentrationen betragen $0.0805 \mu\text{g}/\text{m}^3$ und treten hangseitig im Bereich des Waldstücks ca. 450 m westlich der Kammine der KVA auf.

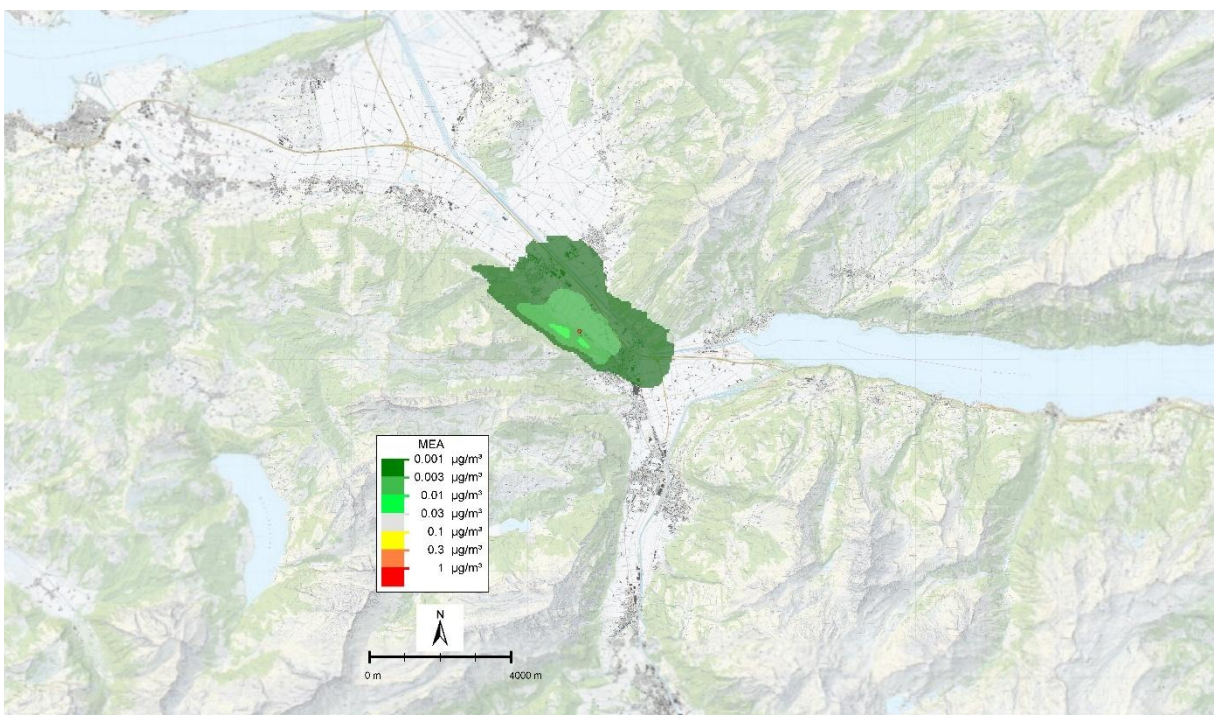


Abbildung 31: Berechneter JMW MEA in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ im Umfeld der KVA Linth.

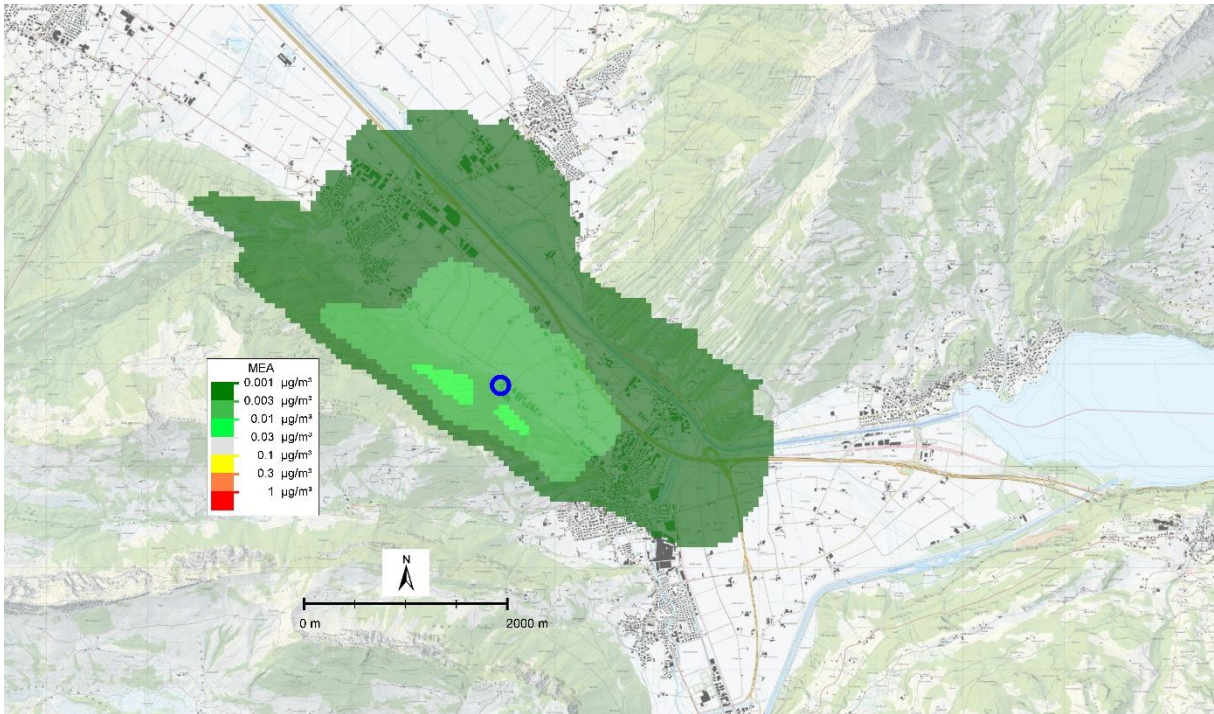


Abbildung 32: Berechneter JMW MEA in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ im nahen Umfeld der KVA Linth.

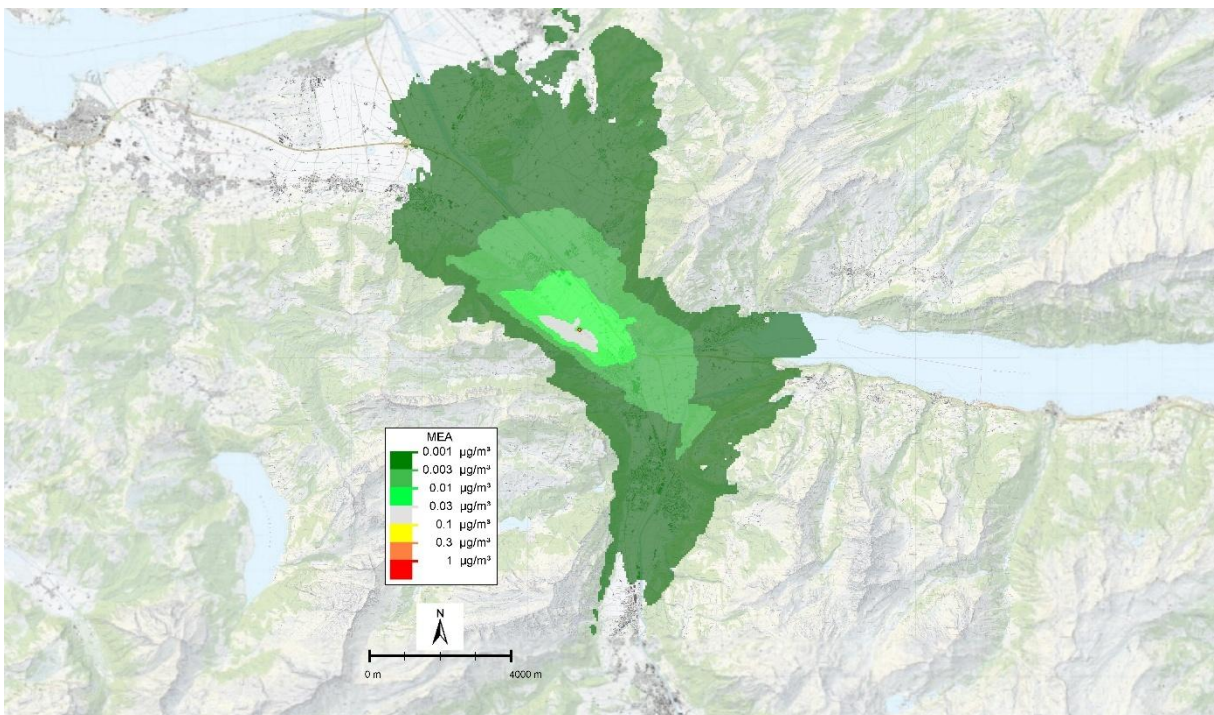


Abbildung 33: Berechneter JMW MEA in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für MEA Emissionsszenario im Umfeld der KVA Linth.

MEA Deposition

In Abbildung 34 und Abbildung 35 ist die gemittelte trockene und nasse MEA-Deposition im Jahresdurchschnitt dargestellt. Werte über $0.003 \text{ mg}/\text{m}^2\text{d}$ werden im Umkreis von bis zu 4 km berechnet. Die maximalen MEA-Depositionswerte liegen bei bis zu $0.164 \text{ mg}/(\text{m}^2\text{d})$ und treten ca. 450 m westlich im unmittelbaren Umfeld der KVA auf.

In Abbildung 36 und Abbildung 37 ist für das Emissionszenario die gemittelte trockene und nasse MEA-Deposition im Jahresdurchschnitt dargestellt. Die maximalen MEA-Depositionswerte liegen bei bis zu 0.820 mg/(m²d) und treten im unmittelbaren Umfeld der KVA auf.

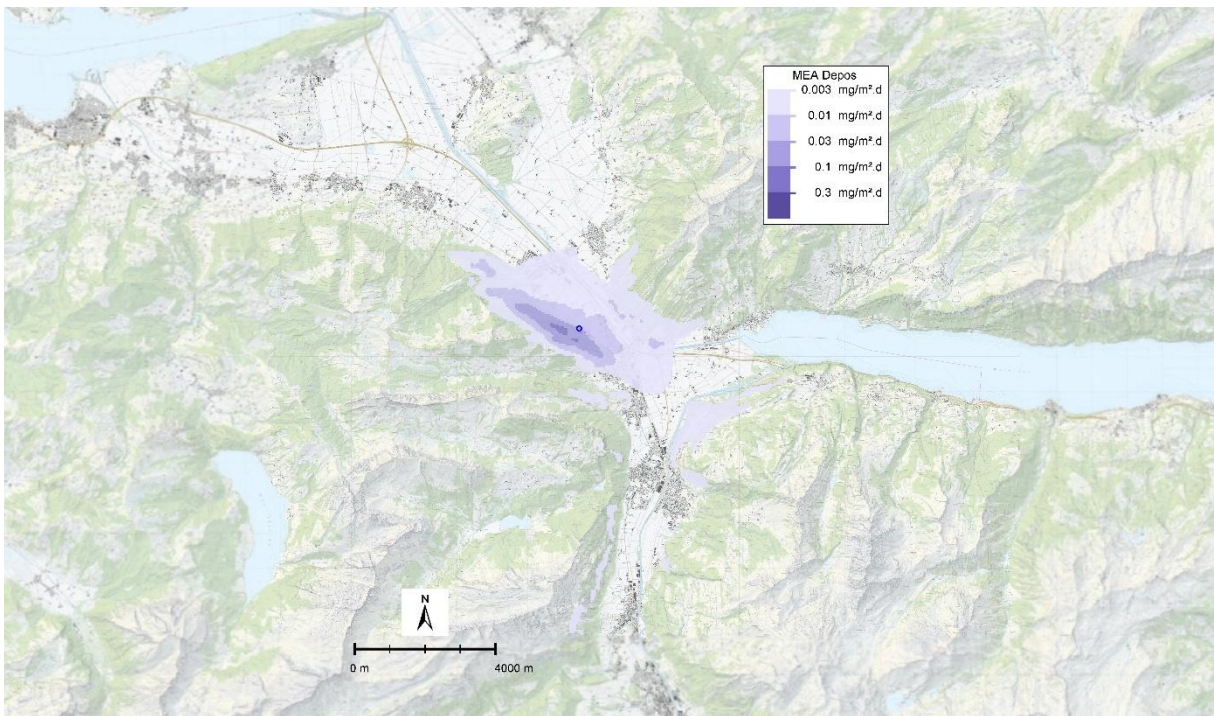


Abbildung 34: JMW MEA Deposition in mg/(m²d) im Umfeld der KVA Linth.

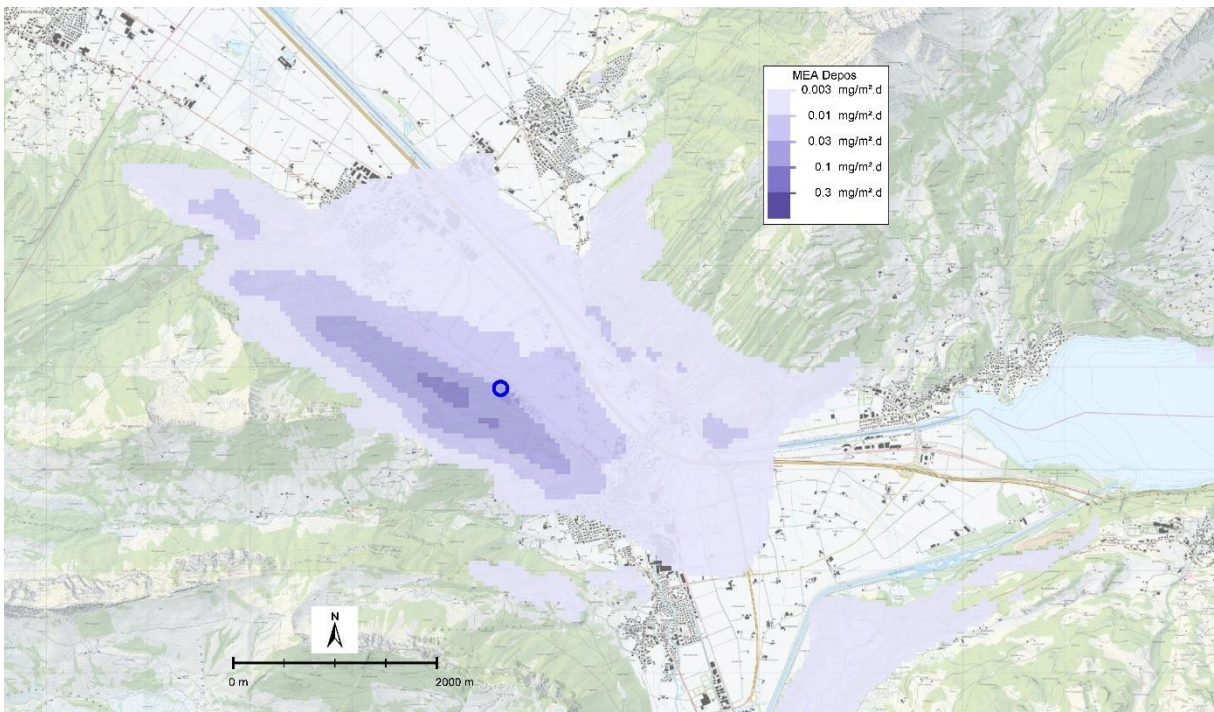


Abbildung 35: JMW MEA Deposition in mg/(m²d) im nahen Umfeld der KVA Linth.

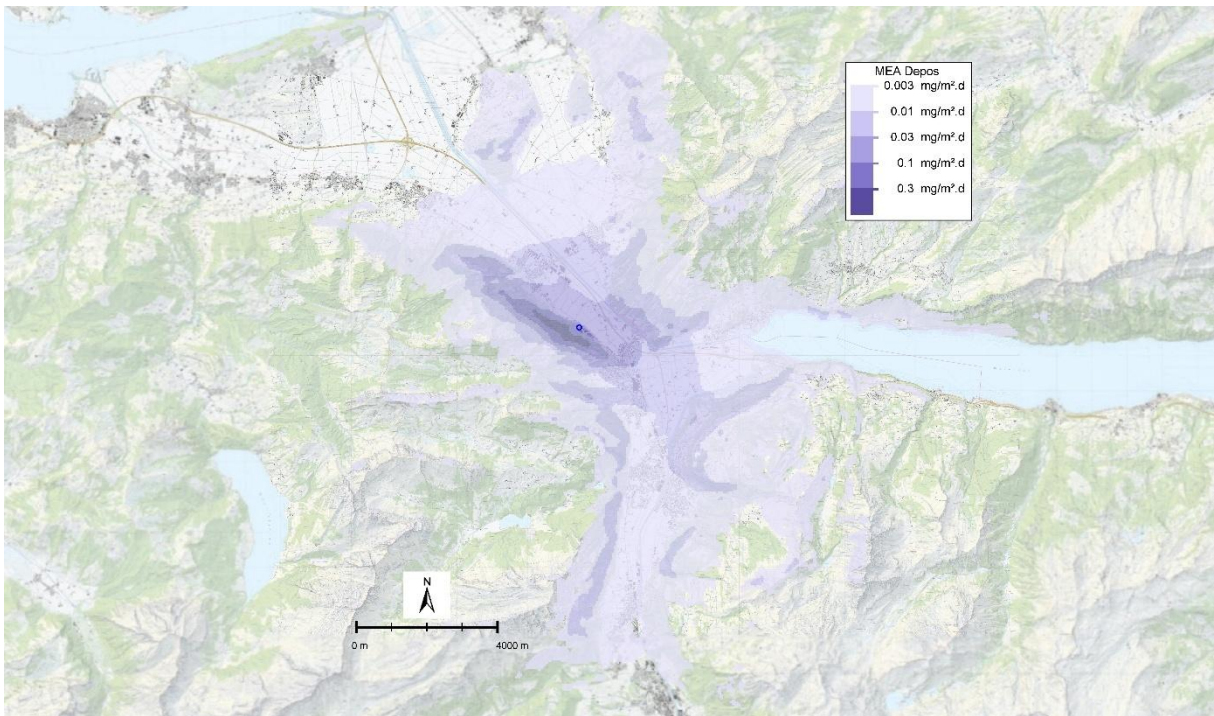


Abbildung 36: JMW MEA Deposition für Emissionsszenario im Umfeld der KVA Linth.

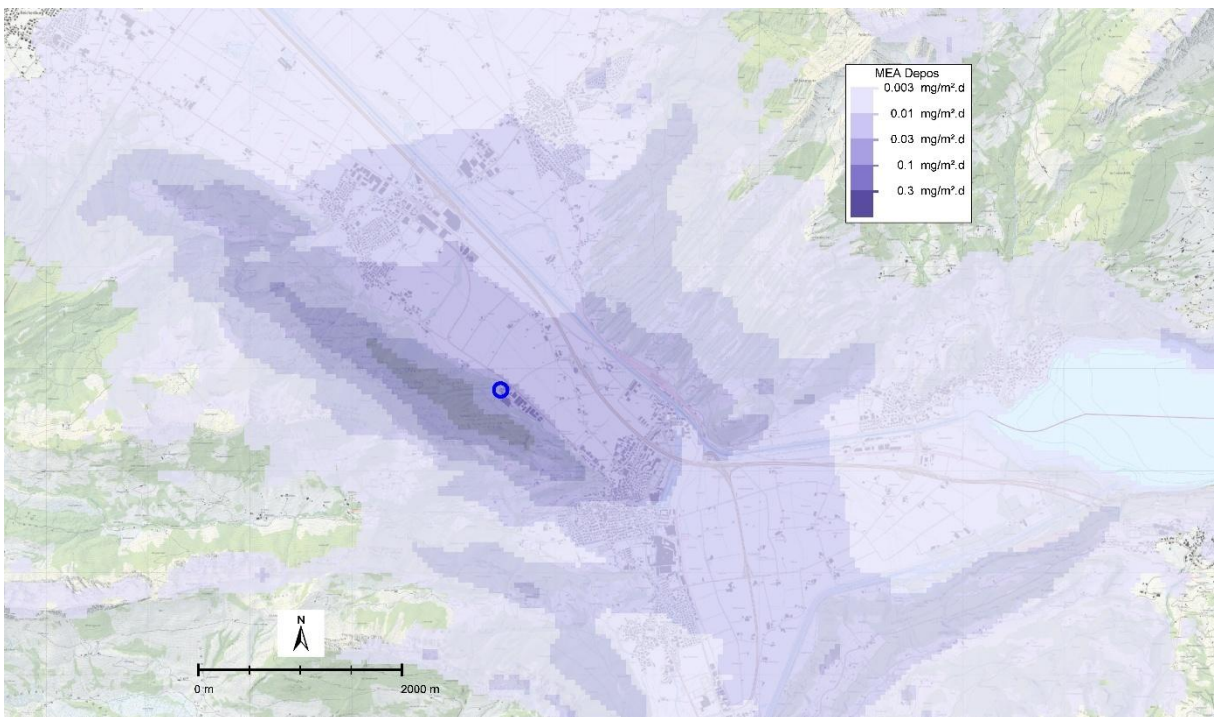


Abbildung 37: JMW MEA Deposition für Emissionsszenario im nahen Umfeld der KVA Linth.

3.2. Berechnung der Aminoradikal-Konzentration [MEA*] zur Abschätzung der Nitramin- und Imin-Reaktionsprodukte

Durch die Verwendung von MEA als Abscheidemittel entstehen in der Atmosphäre durch Abbaureaktionen Nitramine und Imin, jedoch keine stabilen Nitrosamine [23]. Durch die Berechnung der zeitlichen Veränderung von $A = \text{MEA}$ und $A^* = \text{MEA}^*$ (siehe Glg 6 und Glg

7) wird die Dynamik „Chemie versus Ausbreitung“ durch Berücksichtigung des ersten und entscheidenden Reaktionsschritts in erster Näherung erfasst. Dabei wird nur die Bildung eines MEA-Radikals – „MEA*“ betrachtet, nicht jedoch die weiteren MEA-Radikal Abbaureaktionen zur Bildung von Nitraminen bzw. Iminen. Nachfolgend wird die MEA* Zusatzbelastung als Jahresmittel dargestellt. Anhand des Expert Reviews Nielsen and Wisthaler 2025 [17] wurde die MEA* zu Nitramin Umwandlung unter Nutzung von Luftgütedaten (siehe Abschnitt 2.6) abgeschätzt. Der Konversionsfaktor zur Aminbildung wird zu 0.14 gesetzt.

MEA* Zusatzbelastung als Proxy für Nitramin und Imin Bildung

In Abbildung 38 und Abbildung 39 (Detail) ist die jahresdurchschnittliche MEA* Zusatzbelastung im Umfeld der KVA Linth dargestellt. MEA* Zusatzbelastungen $> 0.003 \text{ ng/m}^3$ erstrecken sich bis zu 2 km in östlicher Richtung und knapp 1 km in westlicher Richtung. Das Maximum beträgt 0.0583 ng/m^3 und liegt 700 m in OSO-Richtung vom Kamin der KVA entfernt. Im Vergleich zum berechneten Ausbreitungsmuster des MEA-Jahresmittelwert in Abbildung 31 und Abbildung 32 ergibt sich im berechneten MEA* Konzentrationsmuster eine Verschiebung und Erhöhung der maximalen Werte nach Osten hin. Dies steht in Zusammenhang mit photochemischen Prozessen und den am Standort tagsüber dominierenden Winden aus WSW und W, siehe Abbildung 29.

In Abbildung 40 ist die jahresdurchschnittliche MEA* Zusatzbelastung für das Emissionsszenario dargestellt. Die Zusatzbelastungen liegen in einem größeren Bereich (rund 4.5 km nach NW und rund 9.5 km nach SSO bis Glarus) über 0.3 ng/m^3 , das Maximum beträgt 0.2916 ng/m^3 im Jahresmittel und liegt rund 700 m OSO der KVA.

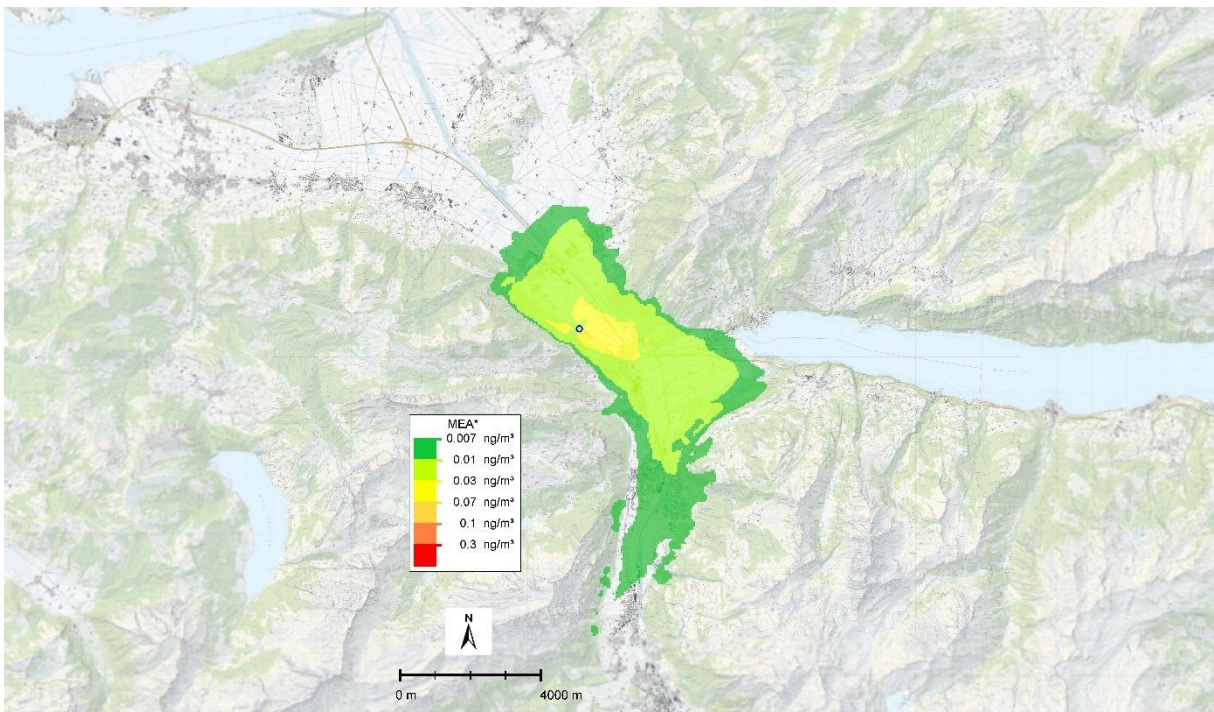


Abbildung 38: Simulierter JMW MEA* in ng/m^3 KVA Linth.

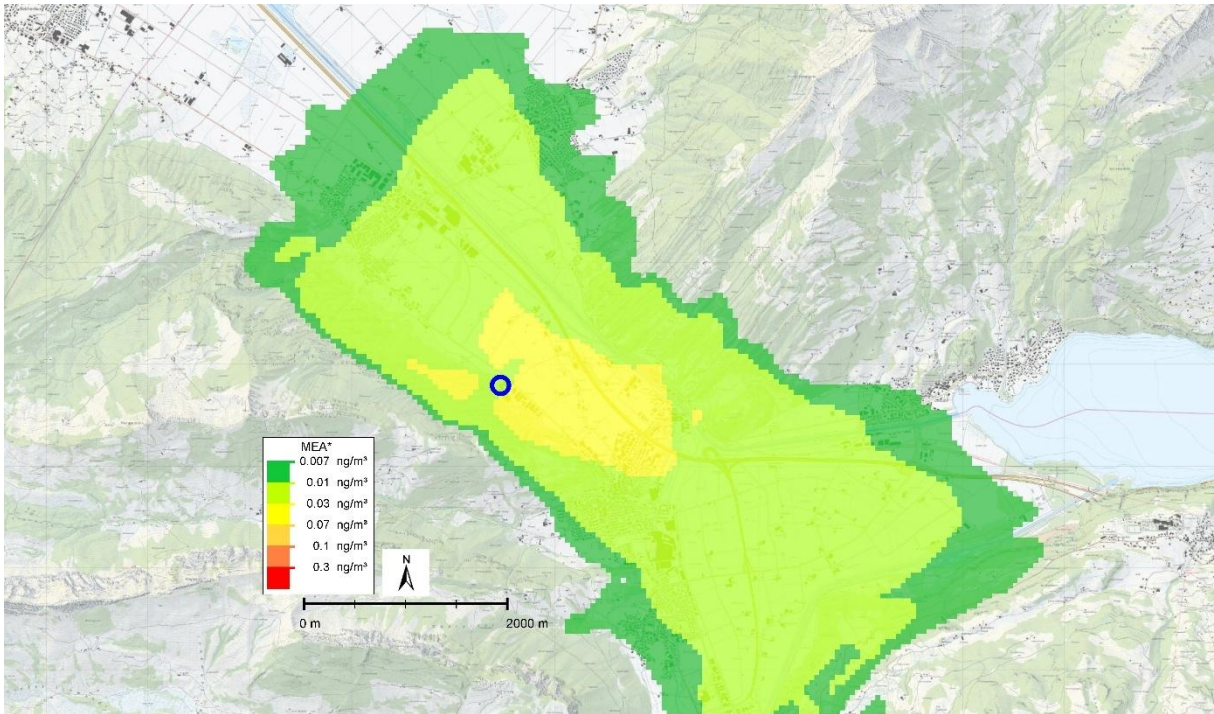


Abbildung 39: Simulierter JMW MEA* in ng/m³ im nahen Umfeld der KVA Linth.

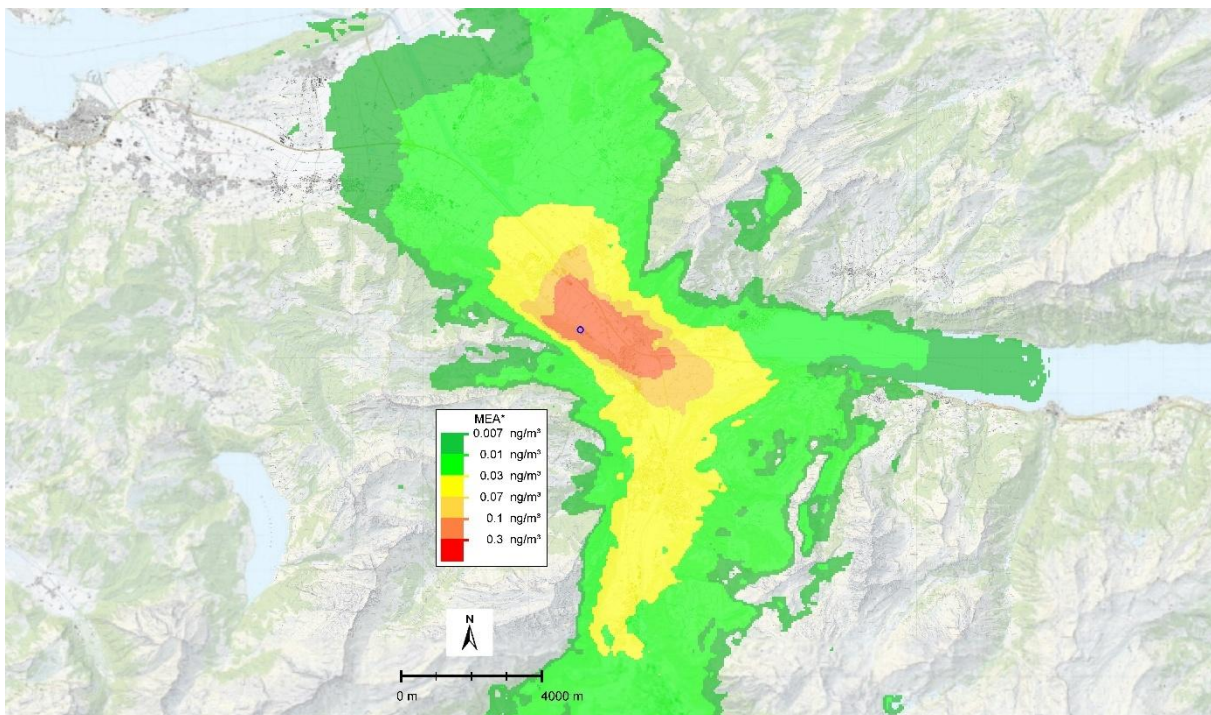


Abbildung 40: Simulierter JMW MEA* in ng/m³ für das Emissionsszenario KVA Linth.

Abgeschätzte Nitramin Zusatzbelastung

In Abbildung 41 und Abbildung 42 ist das Jahresmittel der aufgrund der Stickoxid Umgebungskonzentrationen abgeschätzten NA Konzentration dargestellt. Die höchsten Nitramin Konzentrationen betragen rund 0.0081 ng/m³ und liegen 700 m östlich (OSO) von der KVA entfernt. Das Maximum liegt auf einer Wiese zwischen der Schießanlage Fennen und

Bifang/Unteres Linth. Das jahresdurchschnittliche Maximum liegt somit deutlich unter dem Zielwert von 0.03 ng/m^3 . Ein Wert von 0.003 ng/m^3 , d.h. 10 % vom Zielwert, sind in einem Bereich im Umfeld der KVA von bis zu 3.7 km in WNW bis OSO Richtung und bis 1.5 km in SSW nach NNO überschritten.

In Abbildung 43 ist das Jahresmittel der abgeschätzten NA Konzentration für das Emissionsszenario dargestellt. In einem $1.4 \text{ km} \times 0.7 \text{ km}$ großen Bereich östlich der KVA ist der Zielwert für Nitramine und Nitrosamine in Summe von 0.03 ng/m^3 überschritten. Das Maximum beträgt 0.0408 ng/m^3 und liegt zwischen der Badstraße beim Schießstand Fennen und dem Wisengraben auf der Wiese/Feld.

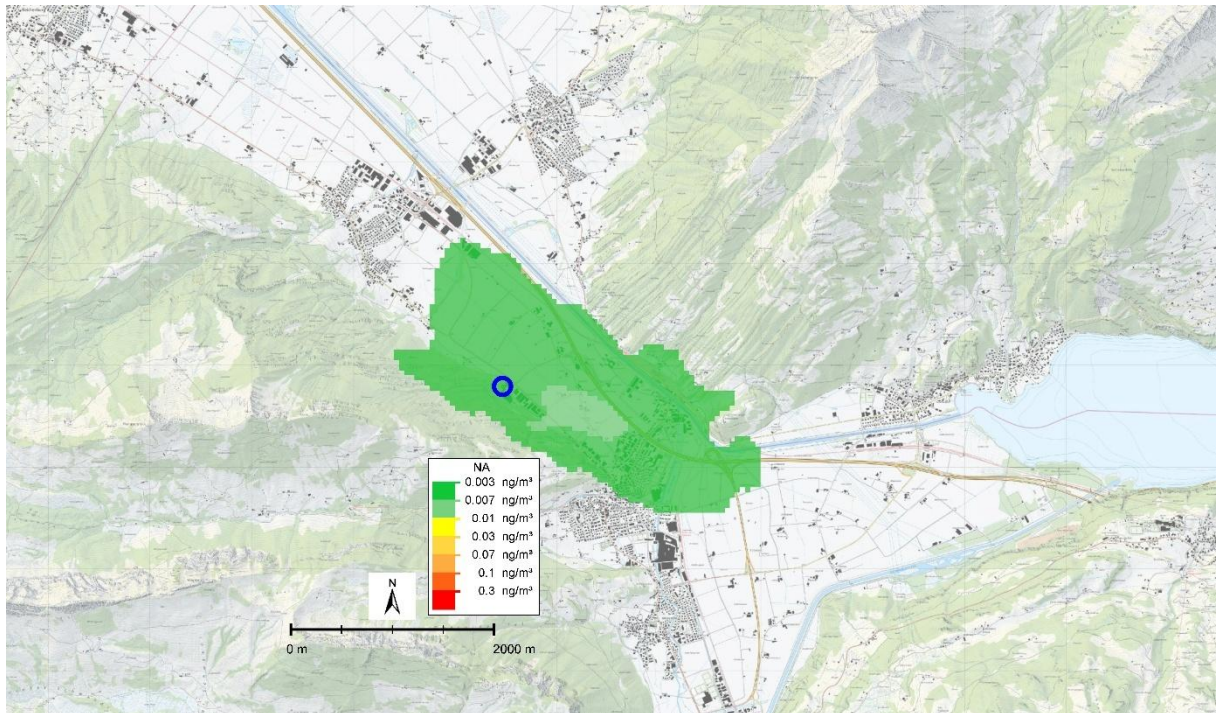


Abbildung 41: Berechneter JMW Nitramin in ng/m^3 im nahen Umfeld der KVA Linth.

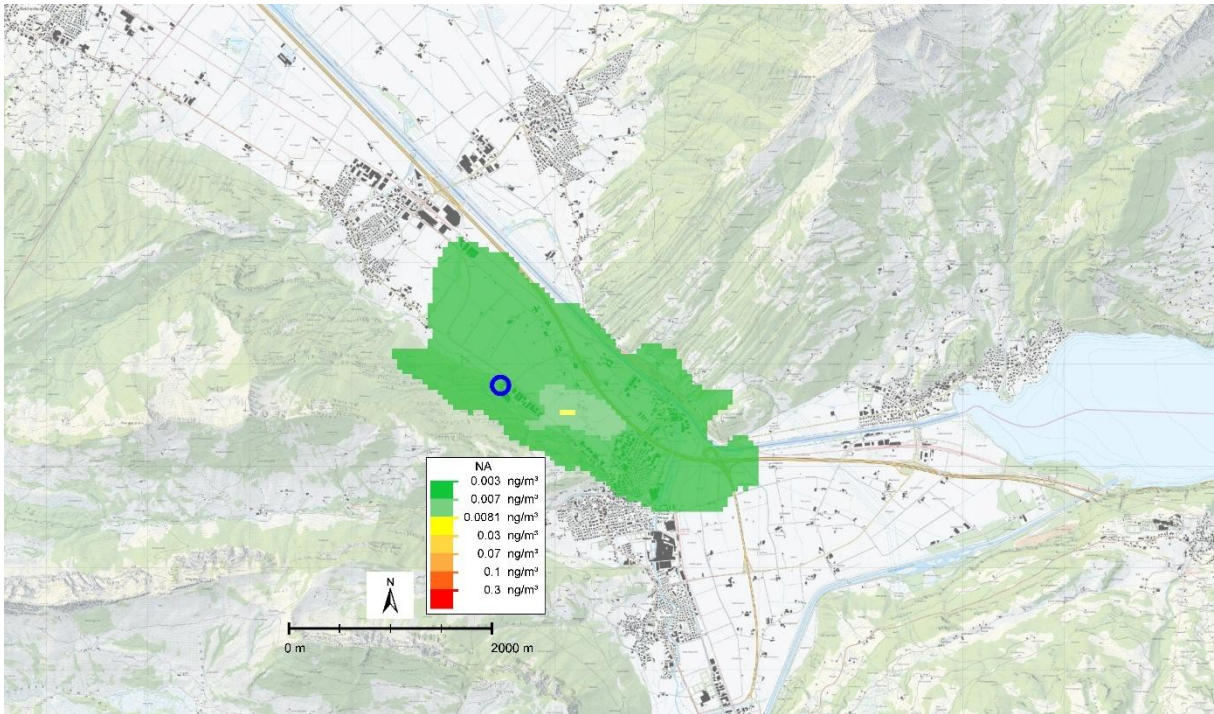


Abbildung 42: Berechneter JMW Nitramin in ng/m³ im nahen Umfeld KVA Linth. vorige Abbildung wurde die Skalierung zur des Maximums angepasst.

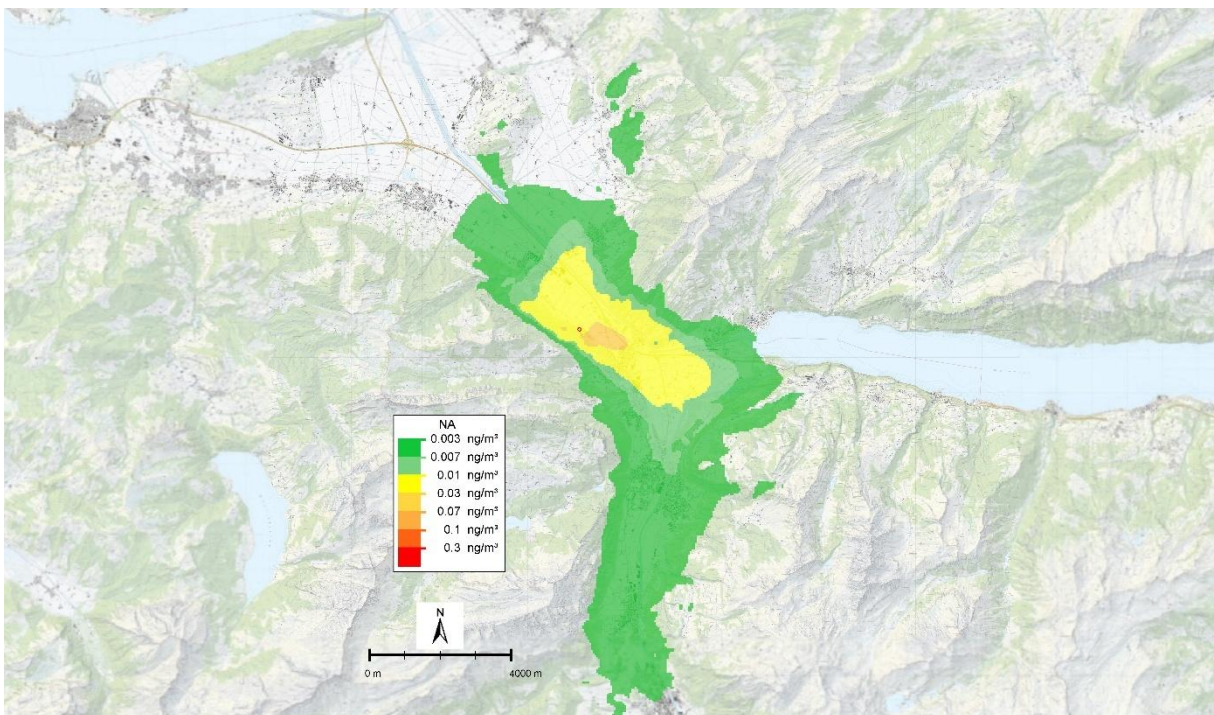


Abbildung 43: Berechneter JMW Nitramin in ng/m³ Emissionsszenario im Umfeld der KVA Linth.

Deposition Nitramine und Imine

Abbildung 44 zeigt die abgeschätzte über ein Jahr gemittelte MEA* Deposition im Untersuchungsgebiet der KVA Linth. Die Depositionsflüsse sind ab $3 \cdot 10^{-5}$ mg/(m² d) dargestellt. Die maximale Deposition beträgt 0.000433 mg/(m²d) und liegt 450 m westlich der KVA, im Waldgelände.

Abbildung 45 zeigt das Ergebnis für das Kurzzeit zenario. Die berechnete maximale jahresdurchschnittliche Deposition beträgt bis zu 0.00216 mg/(m²d). Die maximalen Depositionsflüsse liegen westlich der KVA, im geneigten Waldgelände.

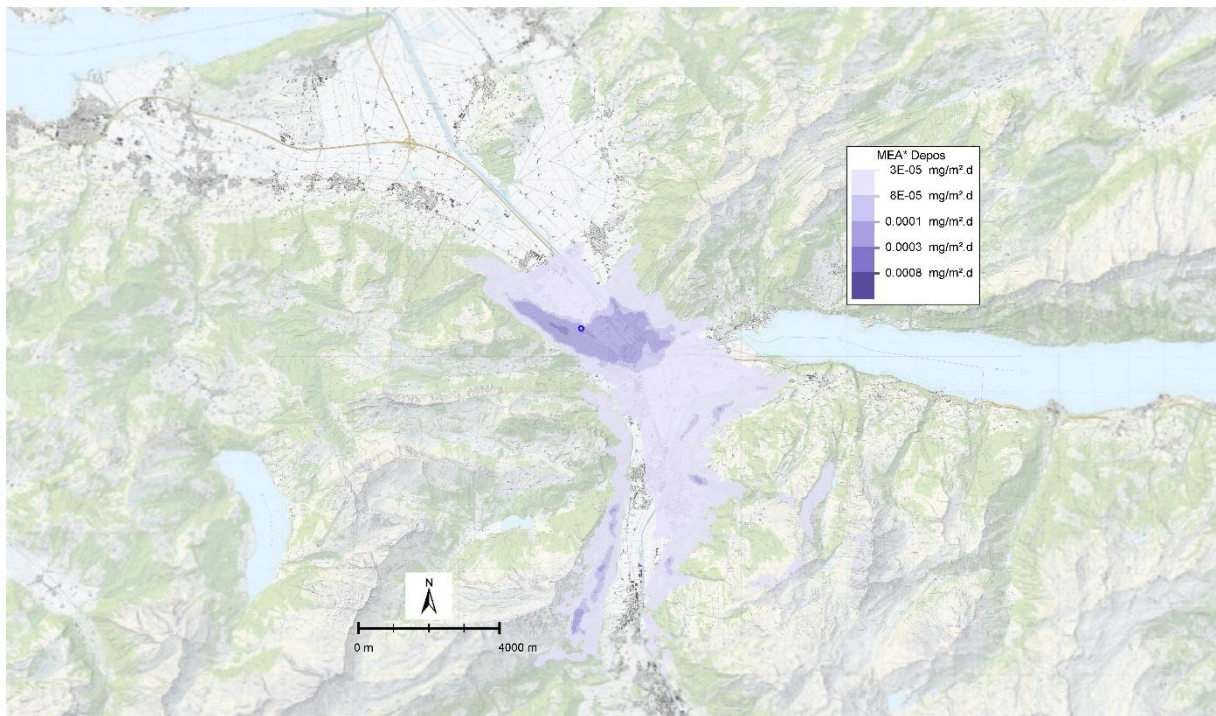


Abbildung 44: JMW Nasse und trockene MEA* Deposition im Umfeld der KVA Linth.

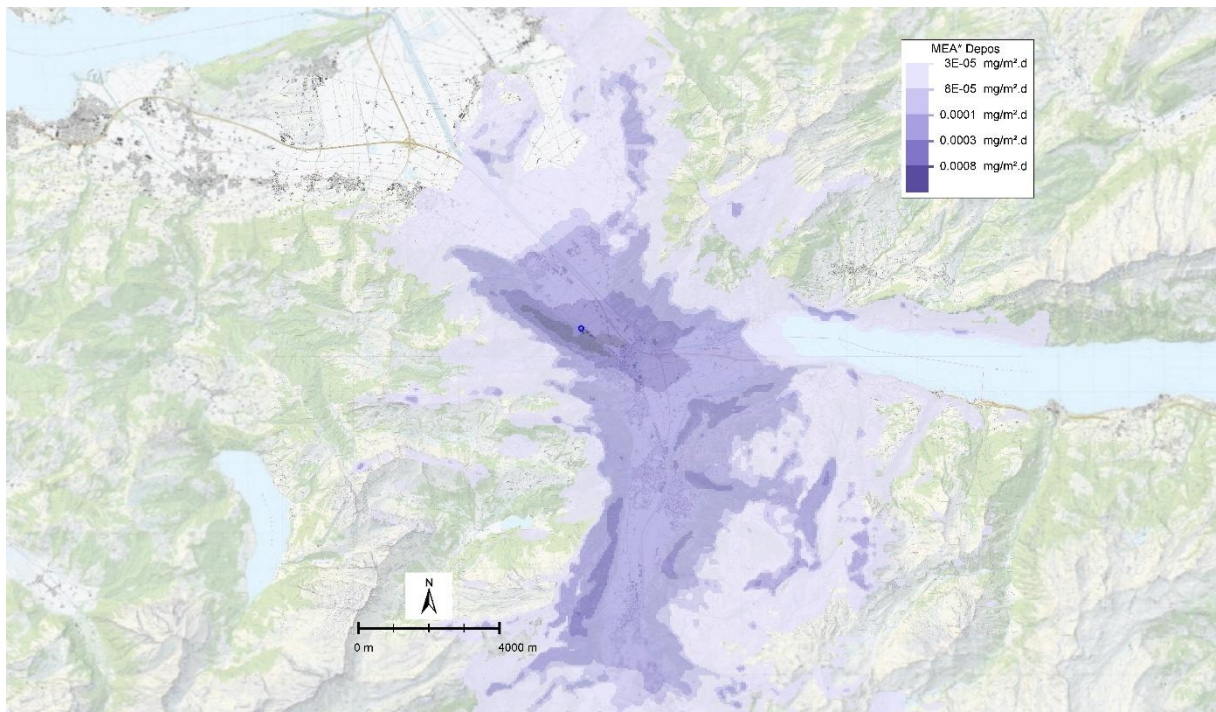


Abbildung 45: JMW Nasse und trockene MEA* Deposition für das Emissionsszenario KVA Linth.

3.3. Ausbreitung von Sekundären Aminen

Bei der CO₂ Abscheidung und Rückgewinnung von MEA können in geringem Umfang Emissionen sekundärer Amine entstehen. Bei Freisetzung von sekundären Aminen können durch atmosphärische Abbauprozesse auch karzinogene Nitrosamine neben den bisher betrachteten Nitraminen entstehen. Durch die Berechnung der zeitlichen Veränderung von $A = \text{DMA}$ und $A^* = \text{DMA}^*$ (siehe Glg 6 und Glg 7) soll der Dynamik „Chemie versus Ausbreitung“ Rechnung getragen werden. DMA wird dabei als Proxy Substanz für die Emissionen von Sekundären Aminen verwendet. Der Set-Up und die Emissionen sind in Tabelle 5 und Tabelle 6 gelistet. 0.0001 mg/Nm³ wurden als DMA Emission angenommen.

Nachfolgend werden die jahresdurchschnittlichen DMA* Immissionen (nur Bildung ohne Abbau von DMA*) dargestellt. Da mit dem vereinfachten chemischen Ansatz lediglich die Beurteilung der Summe (NA+NS+IM) möglich ist und somit die Summe auch die toxikologisch weniger relevanten Imine (IM) enthält, beginnt ab „gelb“ der kritische Bereich und ab „rot“ ist mit einer Zielwert Überschreitung für Nitrosamine und Nitramine in Summe (NA + NS) zu rechnen.

DMA* Zusatzbelastung als Proxy für Nitramin-, Nitrosamin- und Imin-Bildung

Die über ein Jahr gemittelte DMA* Proxy Konzentration ist Abbildung 46 dargestellt. Die höchsten DMA* Konzentrationen betragen rund 0.0058 pg/m³ und liegen 670 m in östlicher Richtung (OSO) vom Kamin der KVA entfernt. Das Maximum liegt zwischen der Schießanlage Fennen und Bifang/Unteres Linth. Die berechnete Zusatzbelastung liegt im Sub-Piko-Gramm Bereich und ist daher als sehr niedrig zu bezeichnen.

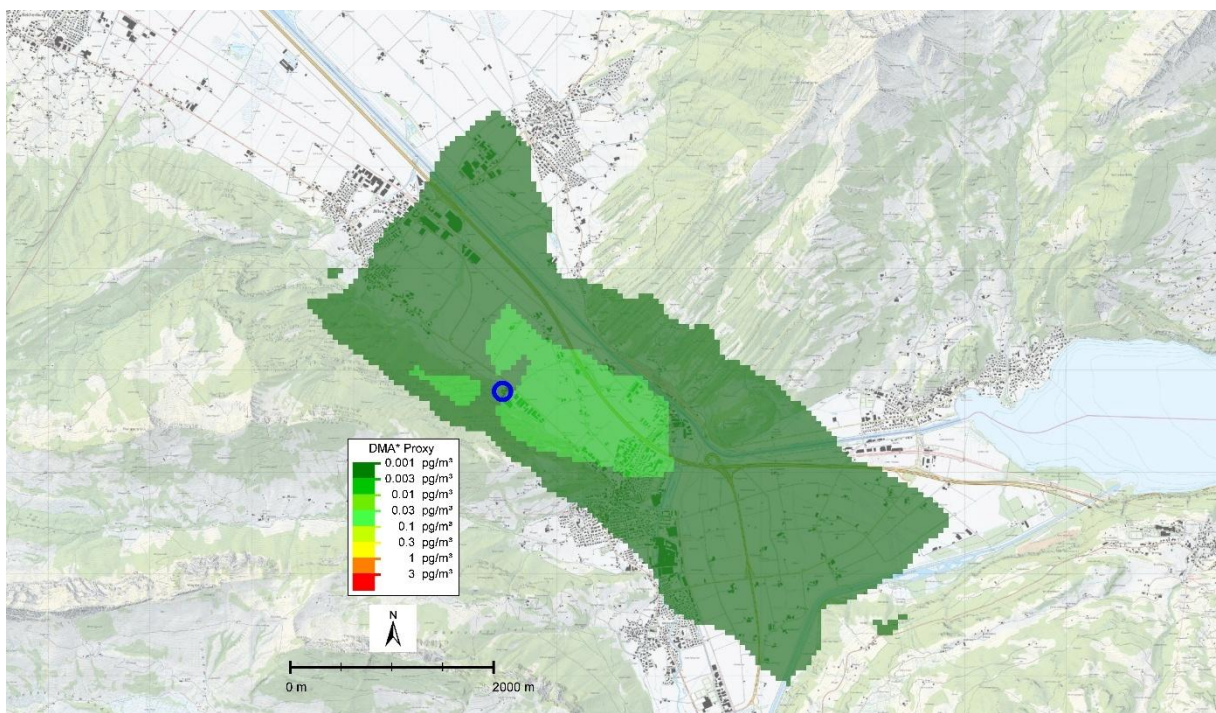


Abbildung 46: JMW DMA* Proxy Konzentration im nahen Umfeld der KVA Linth, die berechneten Konzentrationen liegen im „Sub-“Piko-Gramm Bereich.

3.4. Ausbreitung von Nitrosamin Emissionen

Bei der CO₂-Abscheidung können auch Nitramine und Nitrosamine gebildet werden, die dann mit dem Rauchgas entweichen. Dabei wurden für die Modellierung direkte Nitramin und Nitrosamin Emissionen von 0.001 mg/Nm³ Abgas angenommen. Die Ausbreitung wurde ohne Berücksichtigung der atmosphärischen Gasphasen Abbauprozesse von Nitraminen und Nitrosaminen (siehe Abbildung 3 bzw. Glg 3 und Glg 4) berechnet. Der Jahresmittelwert der ausgebreiteten stabilen direkt emittierten Nitrosamine ist in Abbildung 47 und Abbildung 48 dargestellt. Die höchsten Nitrosamin Konzentrationen betragen rund 0.0162 ng/m³. Das Maximum liegt rund 450 m westlich der KVA Linth im Wald oberhalb der KVA. Bei dieser Zusatzbelastung durch direkt emittierte Nitrosamine sind photolytische Abbauprozesse nicht berücksichtigt. Das jahresdurchschnittliche Maximum liegt somit deutlich unter dem Zielwert von 0.03 ng/m³. Ein Wert von 0.003 ng/m³, d.h. 10 % vom Zielwert, sind in einem Bereich im Umfeld der KVA von bis zu 3 km in WNW bis OSO Richtung und bis 1.4 km in SSW nach NNO überschritten.

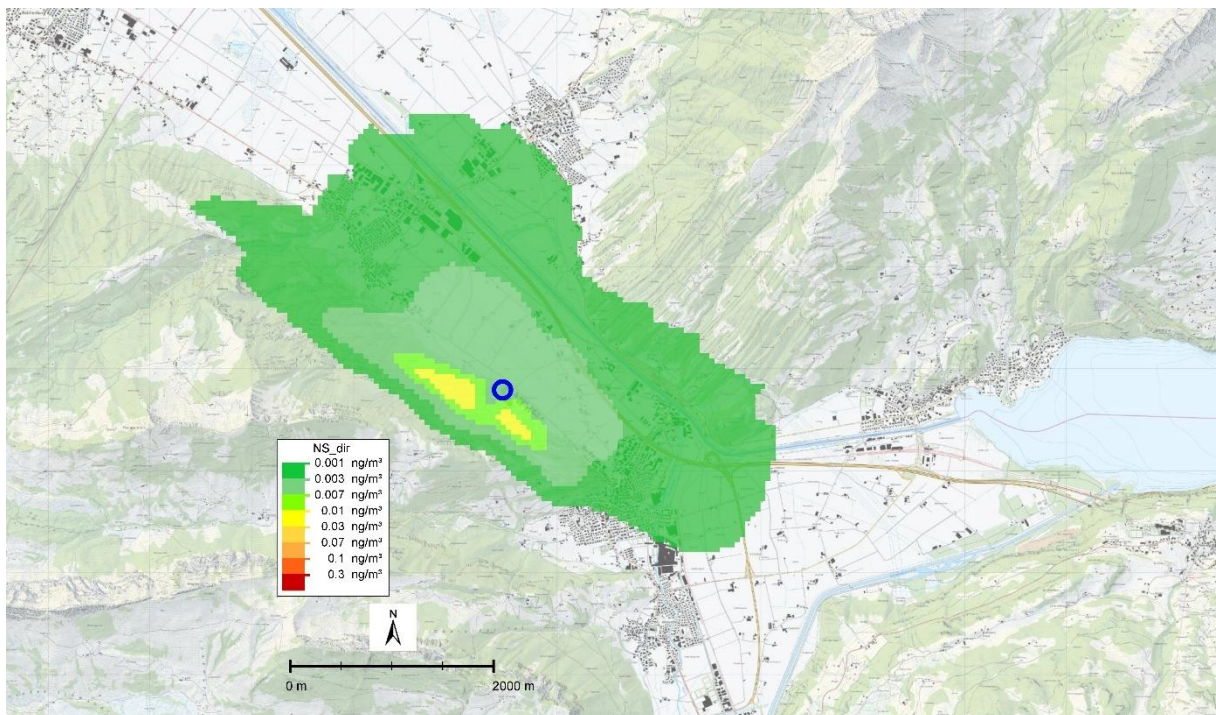


Abbildung 47: JMW NS Zusatzbelastung (aus direkten NS Emissionen) im nahen Umfeld der KVA Linth.

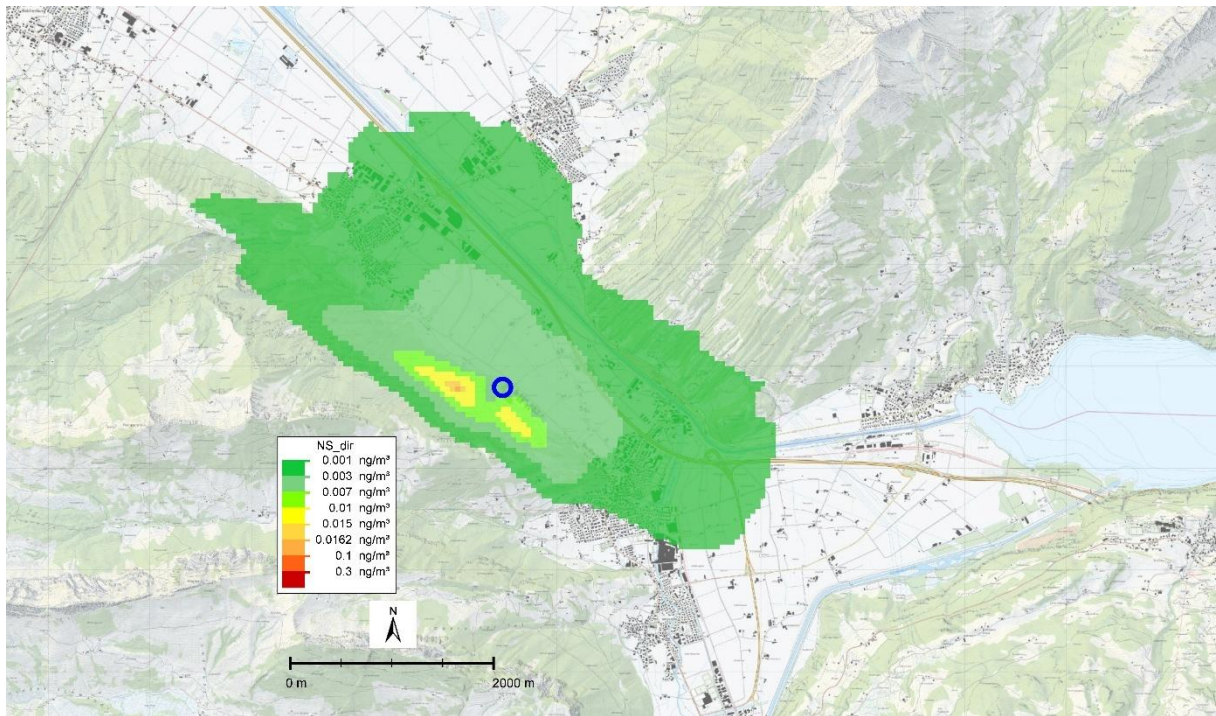


Abbildung 48: JMW NS Zusatzbelastung im nahen Umfeld der KVA Linth, im Gegensatz zur vorigen Abbildung wurde die Skalierung zur Darstellung des Maximums angepasst.

3.5. Abschätzung der maximalen Nitramin- und Nitrosamin-Zusatzbelastung

Drei Möglichkeiten zur Bildung von Nitraminen (NA) und Nitrosaminen (NS) wurden untersucht:

1. Berechnungen der MEA*-Konzentration (in Abschnitt 3.2, enthalten auch Imine und daher Abschätzung der NA) für die jahresdurchschnittliche MEA Emission von 1 mg/Nm³ und der MEA Kurzzeit Emission von 5 mg/Nm³
2. Berechnungen der DMA*-Konzentrationen als Proxy für die Emission von sekundären Aminen (Abschnitt 3.3, enthalten zum Gutteil Imine neben NA, NS)
3. Ausbreitung von emittierten („stabilen eingefrorenen“) NS (Abschnitt 3.4)

Daher soll hier über die kritischen bzw. gesundheitsrelevanten NA und NS Zusatzbelastungen aufsummiert werden. Dies erfolgt in folgender Weise:

1. Die berechneten MEA* Konzentrationen werden mit 0.14 multipliziert
2. Bei den geringfügigen DMA* Konzentrationen im Sub-Pikogramm Bereich werden keine Abschätzungen zu Nitraminen oder Nitrosaminen gemacht, die Imine werden mit aufsummiert
3. Bei der Ausbreitung von direkt emittierten Nitrosaminen werden keine Abbauprozesse berücksichtigt.

Nachfolgend wird somit die $\sum NA, NS_{krit,max} = [MEA^*] \cdot 0.14 + [DMA^*] + [NS]$ dargestellt und diskutiert. In Abbildung 49 und Abbildung 50 (Detailausschnitt KVA Linth) sind die summierten kritischen NA und NS Konzentrationen für die MEA Emissionen im Umfeld der KVA dargestellt. Ca. 420 bis 520 m westlich im Wald oberhalb der KVA werden bis zu 0.022 ng/m³ im Jahresmittel als kritische Summe für Nitramine und Nitrosamine berechnet. Die Konzentrationen liegen somit unter dem Zielwert von 0.03 ng/m³. Das Konzentrationsfeld wird dominiert durch das Ausbreitungsmuster der direkt emittierten Nitrosamine (siehe

Abbildung 48) sowie der abgeschätzten JMW NA Zusatzbelastung (siehe Abbildung 41). Beim Maximum von 0.022 ng/m^3 sind 0.0162 ng/m^3 , ca. 74 % der Bildung und Ausbreitung von Nitraminen zuzuschreiben. Das Nitramin Ausbreitungsmuster ist durch die vorherrschenden Windbedingungen am Standort (Abbildung 28, Abbildung 29) und die in den Sommermonaten dominierenden photochemische Bildungsprozesse für Amin Folgeprodukten stark beeinflusst, siehe auch 3.2.

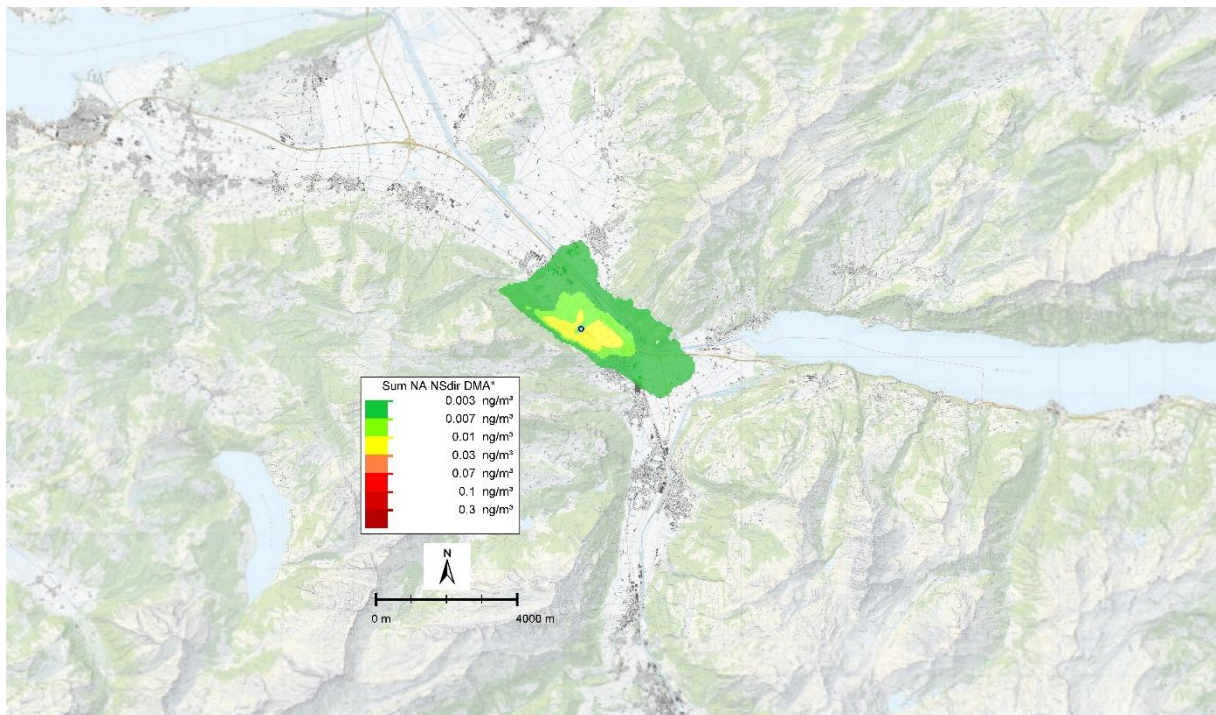


Abbildung 49: JMW $\Sigma([NA]+[DMA^*]+[NS])$ Zusatzbelastungen KVA im Umfeld der KVA Linth für jahresdurchschnittliche MEA Emissionen.

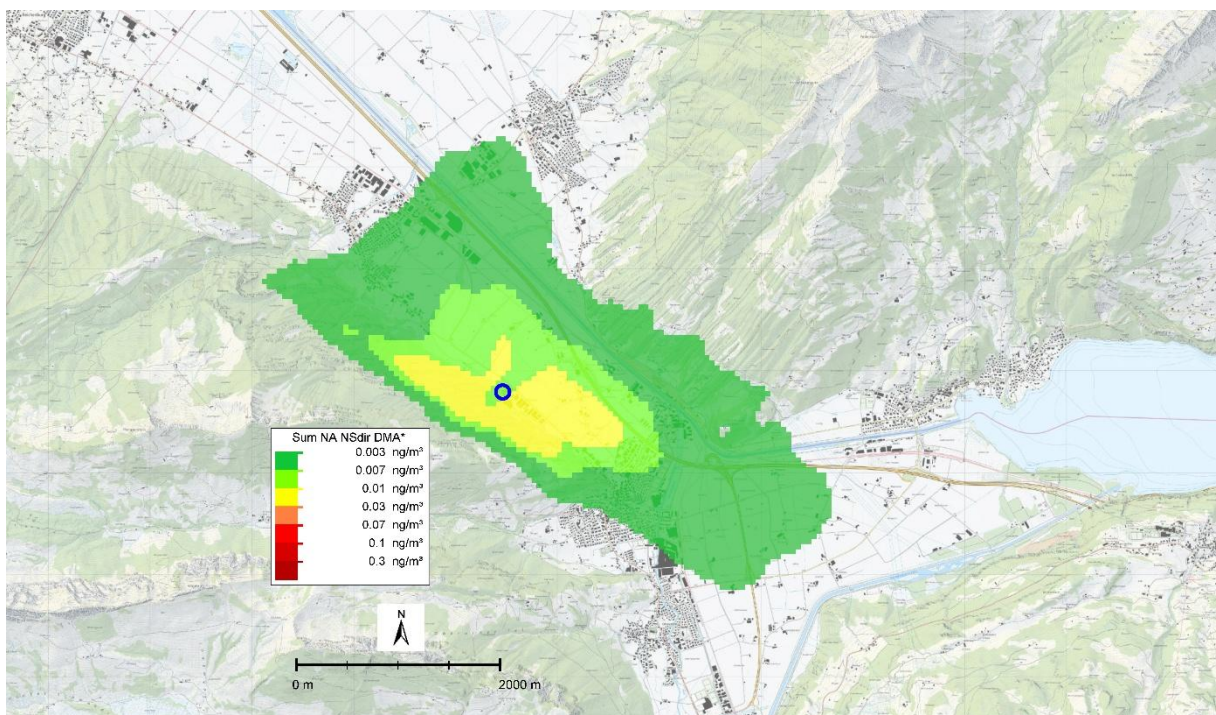


Abbildung 50: JMW $\Sigma([NA]+[DMA^*]+[NS])$ Zusatzbelastungen KVA im nahen Umfeld der KVA Linth für jahresdurchschnittliche MEA Emissionen.

In Abbildung 51 und Abbildung 52 sind die summierten kritischen NA und NS Konzentrationen, für das Emissionsszenario dargestellt. Die abgeschätzten NA Zusatzbelastungen liegen vor allem flächig östlich (rund 1.5 km in W-O und rund 1 km in N-S Richtung) sowie über kleinere Flächen im Westen sowie Norden über dem Zielwert von 0.03 ng/m³. Das Maximum beträgt 0.0479 ng/m³ und liegt rund 460 m westlich vom Kamin der KVA Linth. In der Fläche betrachtet liegen größere Gebiete > 0.03 ng/m³ östlich (SSO) der KVA. Das Ausbreitungsmuster ist dominiert von den Nitraminen, siehe Abbildung 43. Die Nitramin Zusatzbelastung müsste um mindestens Faktor 2.5 reduziert werden, so dass der Zielwert von 0.03 ng/m³ eingehalten werden kann. Dabei wurde von gleichbleibenden (konservativen) Nitrosamin Zusatzbelastungen (ohne Berücksichtigung von Abbauprozessen) sowie den äußerst geringen DMA* Zusatzbelastungen (beinhalten hauptsächlich weniger relevante Imine) ausgegangen. Das Maximum der simulierten NA Konzentrationen liegt ca. 700 m östlich (SSO) von der KVA, siehe Abbildung 43. Aufgrund der Stickoxide in der Abgasfahne ist von verminderten Ozon Konzentrationen und somit OH-Radikal Konzentrationen auszugehen. Die OH-Radikal Konzentrationen wurden jedoch als räumlich konstant je Zeitintervall angenommen. Somit ist davon auszugehen, dass die Maxima in Abbildung 51 und Abbildung 52 überschätzt sind.

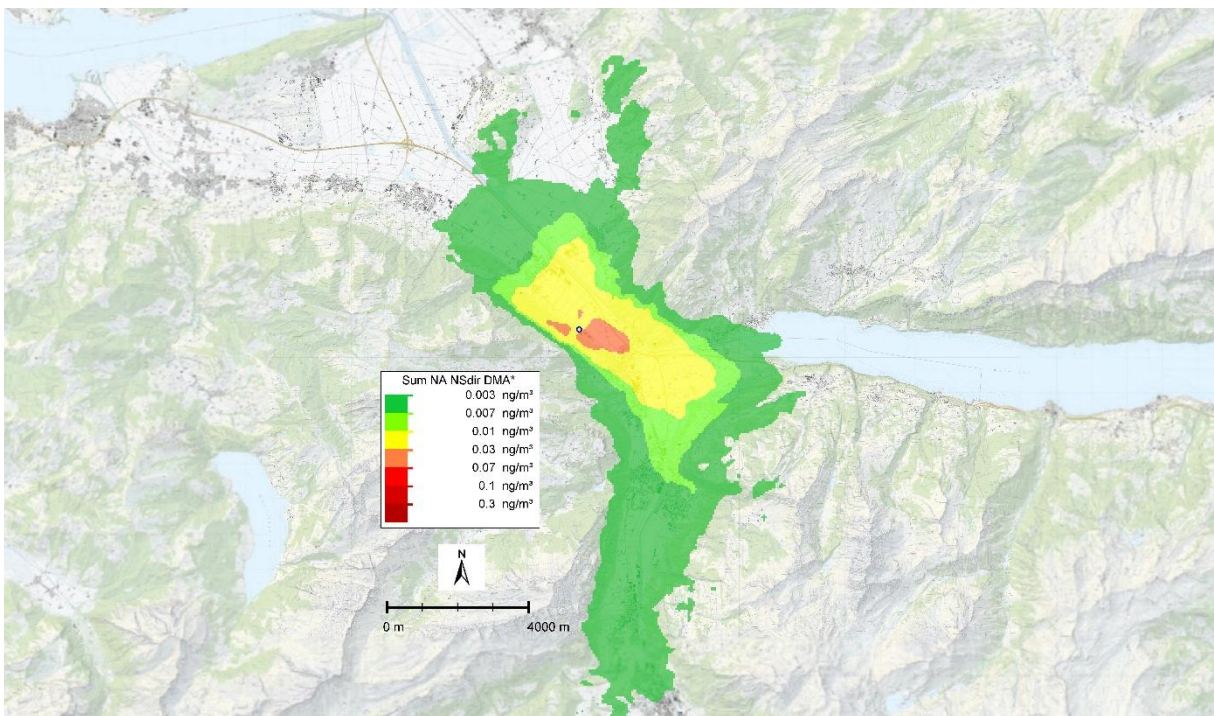


Abbildung 51: JMW $\sum([NA]+[DMA^*]+[NS])$ Zusatzbelastungen im Umfeld der KVA Linth für MEA Emissionsszenario.

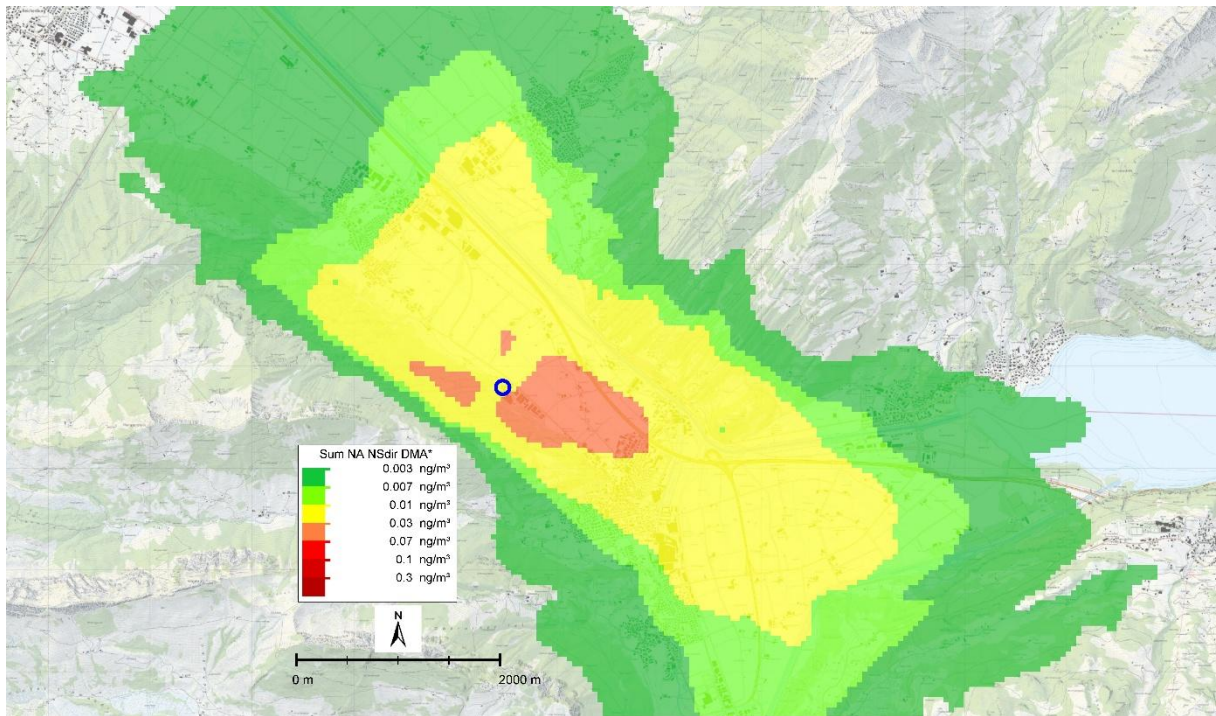


Abbildung 52: JMW Σ ([NA]+[DMA*]+[NS]) Zusatzbelastungen im nahen Umfeld der KVA Linth für MEA Emissionsszenario

3.6. Rezeptoren NA, DMA* und NS Immission

Abbildung 53 zeigt die gewählten Rezeptoren im Umfeld der KVA Linth. An den dargestellten Punkten wurden die berechneten Konzentrationswerte stündlich in 2 m Höhe herausgeschrieben. Die Ergebnisse für die berechneten Jahresmittel der abgeschätzten NA, DMA* und NS Zusatzbelastungen (siehe Abschnitt 3.2, 3.3, 3.4 und 3.5) sind in Tabelle 7 für den Erwartungswert der jahresdurchschnittlichen MEA-Emissionen dargestellt.

Bei den abgeleiteten NA Immissionen, liegen die Werte an allen Rezeptoren unter dem Zielwert von 0.03 ng/m³. Die höchsten NA Zusatzbelastungen sind beim Rezeptor Nr. 23, mit 0.0090 ng/m³, Rezeptor Nr. 15 mit 0.0077 ng/m³ und beim Rezeptor Nr. 22 mit 0.0073 ng/m³ zu verzeichnen.

Bei den DMA* Immissionen, die Nitrosamine, Nitramine und hauptsächlich Imine enthalten liegen die Werte an allen Rezeptoren um Größenordnungen unter dem Zielwert von 0.03 ng/m³.

Die Immissionswerte für Nitrosamine (NS) aus direkten NS Emissionen liegen alle deutlich unter dem Zielwert von 0.03 ng/m³ im Jahresmittel. Die höchsten Zusatzbelastungen wurden mit 0.0059 ng/m³ im Jahresmittel bei den Rezeptoren Nr. 11 und Nr. 12 im Bereich Stalden ermittelt.

Summiert über NA, DMA* und NS liegt der Rezeptorwert bei Rezeptor Nr. 23 mit 0.0131 ng/m³ am höchsten, beim Rezeptor Nr. 15 werden 0.0128 ng/m³ erreicht. Somit wird der Zielwert von 0.03 ng/m³ für die Summe der kritischen NA und NS an allen Rezeptoren eingehalten.

In Tabelle 8 sind die Ergebnisse für den Fall der MEA Emissionen mit dem (Kurzzeit) dargestellte mit dem Konversionsfaktor 0.14 abgeleiteten NA Immissionen sind deutlich gegenüber den jahresdurchschnittlichen Emissionen, siehe Tabelle 7 erhöht. An den Rezeptoren Nr. 15 mit 0.0387 ng/m³, Nr. 22 mit 0.0366 ng/m, Nr. 23 mit 0.0449 ng/m, Nr. 24 mit 0.0362 ng/m³ und Nr. 25 mit 0.0324 ng/m wird der Zielwert von 0.03 ng/m³ überschritten.

Die Summe der kritischen Substanzen überschreitet an den Rezeptoren Nr. 1 mit 0.0308, Nr. 15 mit 0.0438 ng/m³, Nr. 22 mit 0.0407 ng/m³, Nr. 23 mit 0.0491 ng/m³, Nr. 24 mit 0.0398 ng/m³ und Nr. 25 mit 0.0353 ng/m³ den Zielwert von 0.03 ng/m³.

In Tabelle 9 sind die maximalen stündlichen Immissionswerte für die abgeschätzten NA, DMA* und NS an den Rezeptoren dargestellt. Dabei wurde einerseits von der Emissionssituation für MEA ausgegangen und andererseits die ungünstigsten Ausbreitungsbedingungen je Gitterpunkt ebenso berücksichtigt. In Summe ergeben sich die niedrigsten stündlichen Maximalkonzentrationen mit 0.28 ng/m³ am Rezeptor Nr. 9 und die höchsten stündlichen Maximalkonzentrationen mit 7.63 ng/m³ am Rezeptor Nr. 20.

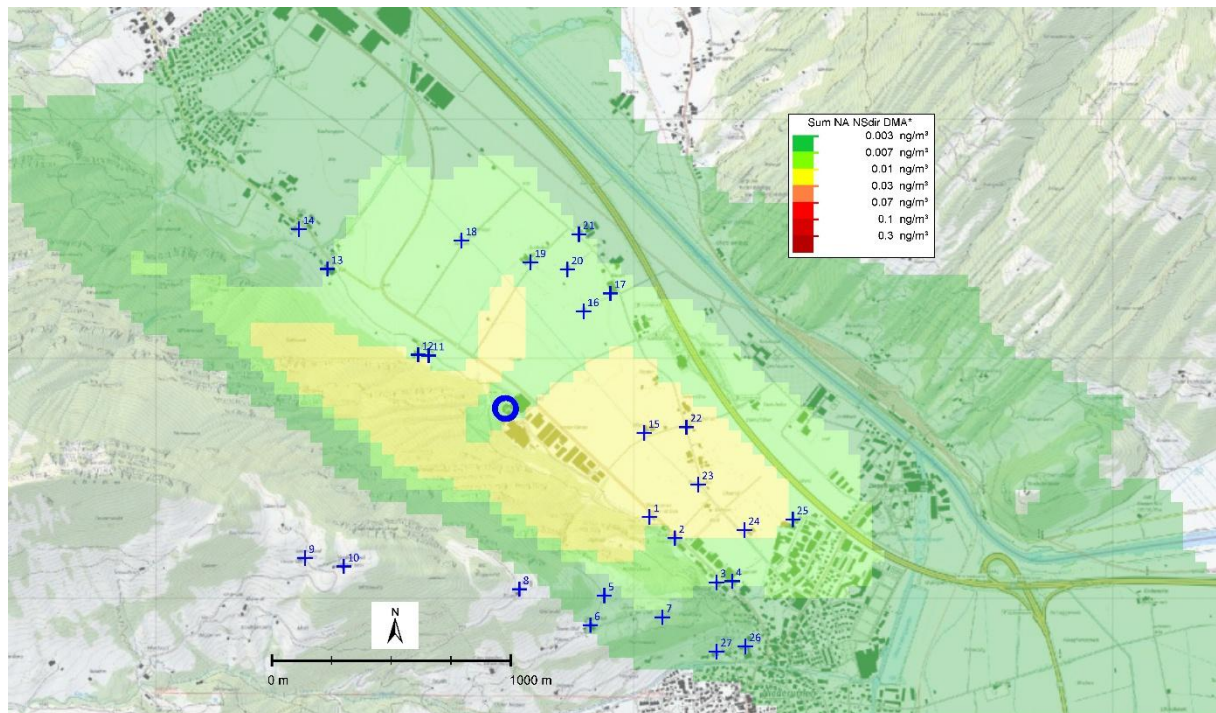


Abbildung 53: Lage der Rezeptoren im nahen Umfeld der KVA Linth.

Tabelle 7: Berechnete Jahresmittel Immission NA, DMA*, NS und Summe dieser kritischen Zusatzbelastungen an Rezeptoren für jahresdurchschnittliche MEA Emissionen.

Nr & Lage Rezeptor	Rechts-/Hochwert	NA ng/m ³	DMA* ng/m ³	NS ng/m ³	Summe ng/m ³
1 Badstr 61	722068/221338	0.0053	3.77E-06	0.0043	0.0096
2 Badstr 55	722174/221249	0.0038	2.65E-06	0.0034	0.0073
3 Badstr 45	722348/221065	0.0048	3.27E-06	0.0031	0.0079
4 Badstr 18A	722414/221070	0.0044	2.99E-06	0.0031	0.0074
5 Ober Gfell N	721879/221010	0.0019	1.20E-06	0.0035	0.0054
6 Ober Gfell S	721821/220886	0.0014	7.89E-07	0.0012	0.0026
7 Unter Gfell	722122/220919	0.0028	1.88E-06	0.0039	0.0067
8 Stogg	721524/221036	0.0011	6.27E-07	0.0009	0.0021
9 Unterer Sool	720627/221167	0.0002	7.42E-08	0.0002	0.0004
10 Vorderer Sool	720789/221131	0.0002	9.52E-08	0.0002	0.0005

11 Stalden 7	721144/222013	0.0037	2.51E-06	0.0059	0.0096
12 Stalden 2/3	721100/222016	0.0037	2.51E-06	0.0059	0.0096
13 Hauptstr 106	720721/222375	0.0028	1.84E-06	0.0041	0.0069
14 Hauptstr 88	720602/222541	0.0024	1.50E-06	0.0035	0.0059
15 Bifang 2b	722046/221690	0.0077	5.48E-06	0.0051	0.0128
16 Wiesenstr. 12.1	721792/222198	0.0044	3.01E-06	0.0037	0.0080
17 Wiesenstr 12	721904/222273	0.0045	3.08E-06	0.0032	0.0077
18 Rotwis	721282/222494	0.0041	2.75E-06	0.0040	0.0081
19 Schönhof 2	721570/222402	0.0048	3.32E-06	0.0044	0.0092
20 Schönhof 8	721725/222372	0.0045	3.10E-06	0.0035	0.0080
21 Wiesenstr 11	721773/222520	0.0041	2.79E-06	0.0029	0.0070
22 Unteres Lihn 2	722222/221713	0.0073	5.15E-06	0.0040	0.0114
23 Wiesenstr 2	722271/221474	0.0090	6.34E-06	0.0041	0.0131
24 Wiesenstr 1	722465/221283	0.0072	5.09E-06	0.0037	0.0109
25 Windeggstr 9	722668/221328	0.0065	4.50E-06	0.0029	0.0094
26 Schulhaus Büel	722470/220797	0.0023	1.44E-06	0.0018	0.0041
27 Kindergarten Rüti	722349/220775	0.0021	1.32E-06	0.0019	0.0041

Tabelle 8: Berechnete Jahresmittel Immission NA, DMA*, NS und Summe der kritischen Zusatzbelastungen an Rezeptoren für MEA Emissionen.

Nr & Lage Rezeptor	Rechts-/Hochwert	NA ng/m ³	DMA* ng/m ³	NS ng/m ³	Summe ng/m ³
1 Badstr 61	722068/221338	0.0265	3.77E-06	0.0043	0.0308
2 Badstr 55	722174/221249	0.0192	2.65E-06	0.0034	0.0226
3 Badstr 45	722348/221065	0.0238	3.27E-06	0.0031	0.0269
4 Badstr 18A	722414/221070	0.0218	2.99E-06	0.0031	0.0248
5 Ober Gfell N	721879/221010	0.0097	1.20E-06	0.0035	0.0132
6 Ober Gfell S	721821/220886	0.0068	7.89E-07	0.0012	0.0080
7 Unter Gfell	722122/220919	0.0142	1.88E-06	0.0039	0.0181
8 Stogg	721524/221036	0.0056	6.27E-07	0.0009	0.0065
9 Unterer Sool	720627/221167	0.0009	7.42E-08	0.0002	0.0010
10 Vorderer Sool	720789/221131	0.0011	9.52E-08	0.0002	0.0014
11 Stalden 7	721144/222013	0.0183	2.51E-06	0.0059	0.0243
12 Stalden 2/3	721100/222016	0.0183	2.51E-06	0.0059	0.0243
13 Hauptstr 106	720721/222375	0.0140	1.84E-06	0.0041	0.0181
14 Hauptstr 88	720602/222541	0.0118	1.50E-06	0.0035	0.0153
15 Bifang 2b	722046/221690	0.0387	5.48E-06	0.0051	0.0438
16 Wiesenstr. 12.1	721792/222198	0.0218	3.01E-06	0.0037	0.0254
17 Wiesenstr 12	721904/222273	0.0223	3.08E-06	0.0032	0.0255
18 Rotwis	721282/222494	0.0206	2.75E-06	0.0040	0.0246
19 Schönhof 2	721570/222402	0.0240	3.32E-06	0.0044	0.0285

20 Schönhof 8	721725/222372	0.0225	3.10E-06	0.0035	0.0260
21 Wiesenstr 11	721773/222520	0.0204	2.79E-06	0.0029	0.0233
22 Unteres Lihn 2	722222/221713	0.0366	5.15E-06	0.0040	0.0407
23 Wiesenstr 2	722271/221474	0.0449	6.34E-06	0.0041	0.0491
24 Wiesenstr 1	722465/221283	0.0362	5.09E-06	0.0037	0.0398
25 Windeggstr 9	722668/221328	0.0324	4.50E-06	0.0029	0.0353
26 Schulhaus Büel	722470/220797	0.0113	1.44E-06	0.0018	0.0131
27 Kindergarten Rüti	722349/220775	0.0107	1.32E-06	0.0019	0.0127

Tabelle 9: Berechnete Maximale Immission NA, DMA* und NS an Rezeptoren.

Lage Rezeptor	Rechts- /Hochwert	NA ng/m ³	DMA* ng/m ³	NS ng/m ³	Summe ng/m ³
1 Badstr 61	722068/221338	1.942	2.67E-04	0.071	2.01
2 Badstr 55	722174/221249	1.640	1.41E-04	0.097	1.74
3 Badstr 45	722348/221065	1.176	1.72E-04	0.044	1.22
4 Badstr 18A	722414/221070	1.122	1.71E-04	0.036	1.16
5 Ober Gfell N	721879/221010	1.247	1.12E-04	0.214	1.46
6 Ober Gfell S	721821/220886	1.301	1.39E-04	0.100	1.40
7 Unter Gfell	722122/220919	1.035	1.79E-04	0.129	1.16
8 Stogg	721524/221036	2.364	1.11E-04	0.078	2.44
9 Unterer Sool	720627/221167	0.239	2.28E-05	0.044	0.28
10 Vorderer Sool	720789/221131	0.315	2.16E-05	0.031	0.35
11 Stalden 7	721144/222013	2.115	3.16E-04	0.184	2.30
12 Stalden 2/3	721100/222016	2.115	3.16E-04	0.184	2.30
13 Rueti	720721/222375	0.956	1.41E-04	0.090	1.05
14 Hauptstr 88	720602/222541	0.905	1.36E-04	0.146	1.05
15 Bifang 2b	722046/221690	5.119	7.64E-04	0.119	5.24
16 Wiesenstr. 12.1	721792/222198	4.497	6.79E-04	0.113	4.61
17 Wiesenstr 12	721904/222273	4.180	6.25E-04	0.109	4.29
18 Rotwis	721282/222494	2.206	3.33E-04	0.167	2.37
19 Schönhof 2	721570/222402	6.504	9.67E-04	0.153	6.66
20 Schönhof 8	721725/222372	7.507	1.10E-03	0.120	7.63
21 Wiesenstr 11	721773/222520	5.059	7.38E-04	0.119	5.18
22 Unteres Lihn 2	722222/221713	6.670	9.97E-04	0.132	6.80
23 Wiesenstr 2	722271/221474	3.271	4.85E-04	0.113	3.38
24 Wiesenstr 1	722465/221283	2.538	3.49E-04	0.053	2.59
25 Windeggstr 9	722668/221328	3.363	5.09E-04	0.045	3.41
26 Schulhaus Büel	722470/220797	0.705	1.04E-04	0.049	0.75
27 Kindergarten Rüti	722349/220775	0.729	6.74E-05	0.060	0.79

3.7. Ausbreitung von Aldehyden

Zunächst wird hier die Zusatzbelastung durch die Ausbreitung von Formaldehyd und Acetaldehyd unter Berücksichtigung der trockenen Deposition im Jahresmittel (JMW) betrachtet. Anschließend werden die resultierenden Depositionsflüsse diskutiert.

Aldehyd-Zusatzbelastung

In Abbildung 54 ist der JMW für Formaldehyd und Acetaldehyd dargestellt. Das JMW Maximum liegt mit $0.203 \mu\text{g}/\text{m}^3$ Zusatzbelastung im Bereich des bewaldeten Berghanges, 450 m westlich des bestehenden Kamins.

Einen Immissionsgrenzwert für Formaldehyde oder Aldehyde gibt es in der Schweiz bzw. Europa oder auch den USA nicht. Die in der Modellierung ermittelten Zusatzbelastungen für Formaldehyd und Acetaldehyd liegen weit (über 4 Größenordnungen) unter der maximalen Arbeitsplatzkonzentration [31],[38] für Formaldehyd von 0.75 ppm, entsprechend $937.5 \mu\text{g}/\text{m}^3$.

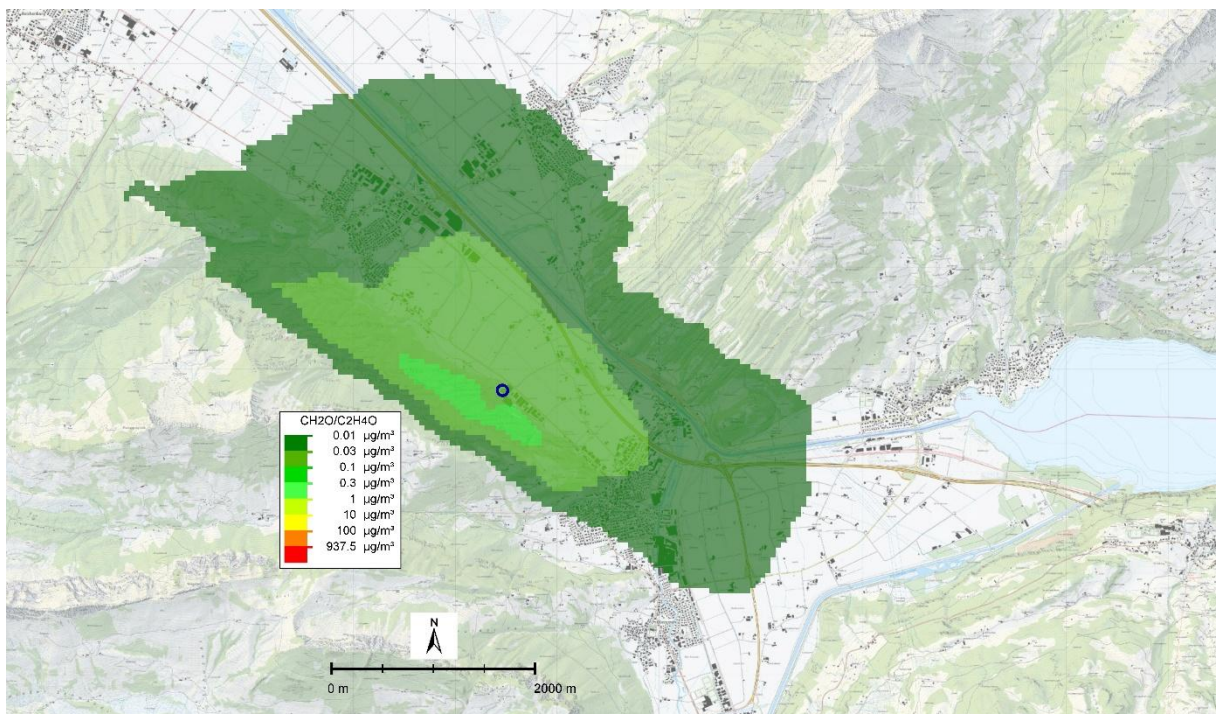


Abbildung 54: JMW Formaldehyd/Acetaldehyd Konzentration im nahen Umfeld der KVA Linth.

Aldehyd Deposition

In Abbildung 55 sind die über ein Jahr gemittelten Formaldehyd- und Acetaldehyd-Depositionsflüsse dargestellt. Die Depositionsflüsse erreichen maximal $0.892 \text{ mg}/(\text{m}^2 \text{ d})$ im Bereich des bewaldeten Berghanges, 450 m westlich des bestehenden Kamins.

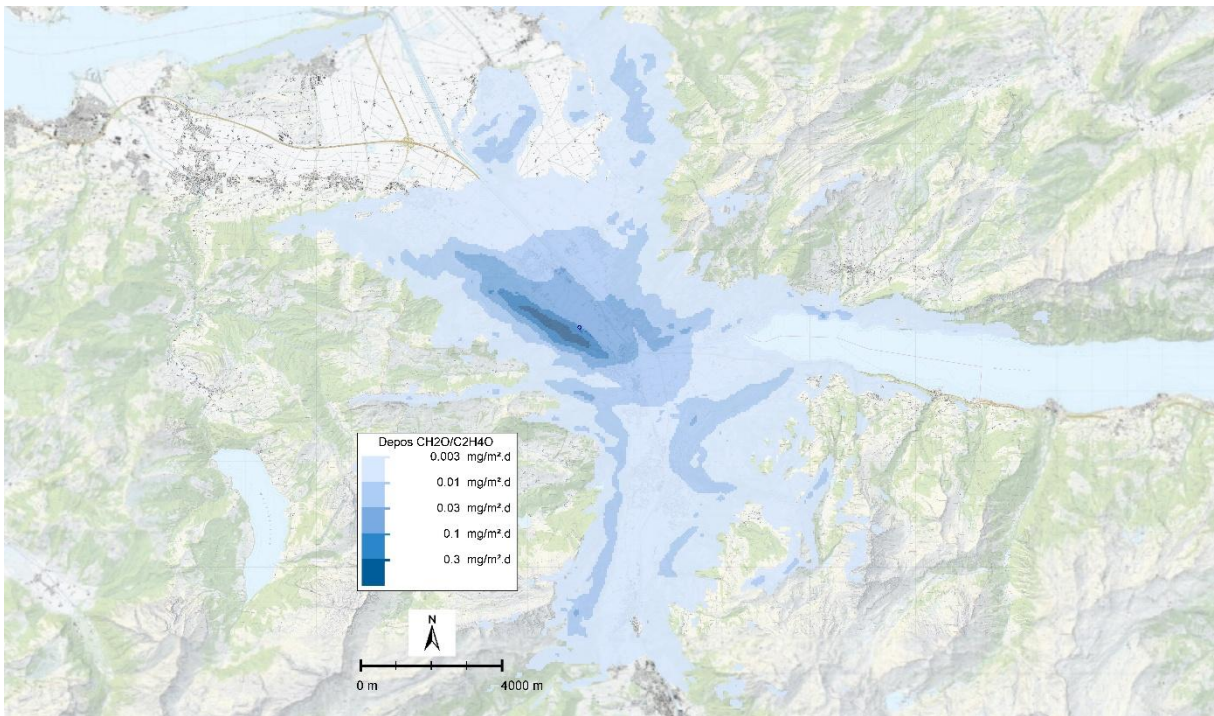


Abbildung 55: JMW Form-/Acetaldehyd Deposition im Umfeld der KVA Linth.

4. Zusammenfassung

Am Standort der KVA Linth ist eine CO₂-Abscheidung (CC) geplant. Dabei soll Monoethanolamin (MEA) für den Abscheideprozess verwendet werden. Aufgrund der Volatilität von Aminen und Aerosolbildung entweichen Amine mit dem Rauchgas bei der CO₂-Abscheidung. Auch Aldehyd-Verbindungen, bei MEA hauptsächlich als Formaldehyd und Acetaldehyd, werden mit dem Rauchgas emittiert. In der Atmosphäre werden die emittierten Amine turbulent verdünnt und photochemisch abgebaut. Dabei können neben toxikologisch weniger relevanten Iminen auch gefährliche karzinogene Abbauprodukte wie Nitramine (NA) und Nitrosamine (NS) entstehen. In äußerst geringem Umfang können Nitramine und Nitrosamine auch im Zuge der CO₂-Abscheidung und MEA Rückgewinnung gebildet und mit dem Rauchgas freigesetzt werden. Amine, Nitrosamine, Nitramine, Formaldehyd und Acetaldehyd können durch trockene und nasse Deposition in die Vegetation, Böden und Gewässer eingetragen werden und dort möglicherweise schädigend wirken.

Für Immissionen und Depositionen dieser Substanzen sind bislang keine Grenzwerte definiert. Für MEA sind als Monatsmittelwert 10 µg/m³ [29] und für Nitrosamine und Nitramine in Summe 0.3 ng/m³ als Jahresmittelwert (JMW) seitens der norwegischen Umweltbehörden als Zielwert [3][29] zur Genehmigung von Carbon-Capture Anlagen festgelegt. Seitens der schweizerischen Behörden wird ein strengerer Immissions-Risikowert von 0.03 ng/m³ als Summenwert eingefordert.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Beurteilung von möglichen schädlichen Umweltauswirkungen der CO₂-Abscheidung mittels Monoethanolamin (MEA) über den Luftpfad im Umfeld der KVA Linth. Für Umweltbeurteilungen werden die Zusatzbelastungen für Amine sowie die Summe aus Nitrosaminen und Nitraminen als Jahresmittelwert benötigt. Des Weiteren die Einträge durch nasse und trockene Deposition.

Mit dem weiterentwickelten Ausbreitungsmodell GRAL [16] wurden folgende Berechnungen in komplexem Gelände mit hoher räumlicher Auflösung über den Zeitraum eines Jahres durchgeführt:

- i. Berechnung der MEA Ausbreitung und Deposition unter Berücksichtigung atmosphärischer MEA Abbauprozesse
- ii. Berechnung der Bildungsprozesse eines MEA-Radikals MEA* ohne Weiterreaktionen als Proxy Maß für schädliche Nitramine und toxikologisch weniger Iminen, Abschätzung der MEA* Deposition. Abschätzung des Nitraminanteils unter Nutzung von Luftgütemessdaten.
- iii. Berechnung der Bildungsprozesse eines DMA-Radikals DMA* ohne Weiterreaktionen als Proxy Maß für schädliche Nitrosamine, Nitramine und toxikologisch weniger relevanten kettenförmigen Iminen
- iv. Berechnung der Ausbreitung von „direkten“ Nitrosamin Emissionen
- v. Berechnung der Formaldehyd und Acetaldehyd Ausbreitung und Deposition

Die angewandte Methodik ist aufgrund der Vorgabe von räumlich homogenen OH-Radikal Konzentrationen sowie der Nicht-Berücksichtigung von schnellen photolytischen Nitrosamin Zerfallsreaktionen als konservativ zu bezeichnen. Infolge der NO Rauchgas Konzentrationen wird Ozon titriert und somit resultieren niedrigere OH-Radikal Konzentrationen im Bereich der Abgasfahne. Die Annahme von mit der Globalstrahlung modulierten räumlich homogenen OH-Radikalkonzentration führt somit zu einer Überschätzung der Maxima der MEA* und DMA* Konzentrationen, und vor allem der Nitramin und Nitrosamin Konzentrationen.

Im Vergleich zu den berechneten Ausbreitungsmustern der Jahresmittelwerte von MEA, den Aldehyden und der direkt emittierten Nitrosamine ergibt sich mit den berechneten MEA* und NA Konzentrationsmuster eine Verschiebung und Erhöhung der maximalen Werte in Richtung OSO bezogen auf den Kamin der KVA Linth. Dies steht in Zusammenhang mit photochemischer Bildung der Zersetzungsprodukte und den am Standort tagsüber dominierenden Winde aus WSW und W.

Zusammenfassend wurden folgende Ergebnisse erzielt, siehe auch Tabelle 10:

- I. Im Jahresmittel wurden Zusatzbelastungen bis 16.1 ng/m^3 für MEA Emissionen von 1 mg/Nm^3 berechnet. Das Maximum liegt im bewaldeten Berghang 450 m bis 500 m westlich des Kamins der KVA Linth. Die berechneten MEA Zusatzbelastungen (JMW) liegen weit, d.h. nahezu 3 Größenordnungen unter dem kritischen Wert von $10 \text{ } \mu\text{g/m}^3$. Die maximalen MEA Depositionswerte liegen bei bis zu $0.164 \text{ mg/m}^2\text{d}$ und treten ca. 450 m westlich im unmittelbaren Umfeld der KVA auf. Beim Emissionsszenario mit dem Kurzzeit wurden MEA Zusatzbelastungen von bis zu 80.5 ng/m^3 berechnet. Der maximale Depositionseintrag beträgt 0.820 mg/m .
- II. Die berechneten Zusatzbelastungen für den JMW MEA* liegen über dem Zielwert für NA und NS von 0.03 ng/m^3 . Der Bereich über 0.03 ng/m^3 erstreckt sich vor allem westlich der KVA Linth in W-O Richtung auf rund 2.5 km und in N-S Richtung auf bis rund 1.0 km. Das JMW Maximum beträgt 0.0583 ng/m^3 und liegt 700 m in östlicher Richtung (OSO) vom derzeitigen Kamin. Zu beachten ist, dass die MEA* Konzentrationen hauptsächlich auch die gesundheitlich weniger relevanten Imine enthält. Die höchsten JMW MEA* Depositionsflüsse betragen bis zu $0.000433 \text{ mg/(m}^2\text{d)}$ im Jahresmittel und liegen im Bergwald oberhalb der KVA. Beim MEA Emissionsszenario mit dem Kurzzeitwert von 5 mg/Nm^3 liegen die

- Zusatzbelastungen in einem größeren Bereich (rund 4 km nach NW und rund 9.5 km nach SSO) über 0.3 ng/m^3 , das Maximum beträgt 0.2916 ng/m^3 im Jahresmittel und liegt rund 700 m östlich (OSO) der KVA. Die höchsten JMW MEA* Depositionsflüsse betragen $0.00216 \text{ mg/(m}^2\text{d)}$ im Jahresmittel.
- III. Durch Abschätzung des MEA* Nitramin (NA) Anteils anhand von Umgebungs-Stickoxid Luftgütemessungen wurden die gesundheitlich relevanten NA Konzentrationen ermittelt. Die maximalen NA Zusatzbelastungen betragen rund 0.0081 ng/m^3 und liegen rund 700 m in östlicher (OSO) Richtung vom Kamin. Die Nitramin Konzentrationen liegen damit deutlich unter dem Zielwert für NA + NS von 0.03 ng/m^3 . Beim MEA Emissionsszenario mit dem Kurzzeit wert liegen die abgeschätzten NA Zusatzbelastungen über dem Zielwert von 0.03 ng/m^3 . Das Maximum beträgt 0.0408 ng/m^3 und liegt 700 m östlich (OSO) vom Kamin der KVA Linth.
 - IV. Die berechneten JMW Zusatzbelastungen für die Ausbreitung Amininen unter Verwendung von DMA als Proxy Substanz liegen im Sub-Pikogramm Bereich. Die maximalen jahresdurchschnittlichen DMA* Konzentrationen betragen rund 0.0058 pg/m^3 und liegen 670 m östlich vom derzeitigen Kamin der KVA. Die DMA* Zusatzbelastungen liegen somit um Größenordnungen unter dem Zielwert von 0.03 ng/m^3 .
 - V. Die JMW Zusatzbelastungen aus „direkten“ Nitrosamin Emissionen liegen deutlich unter dem Zielwert von 0.03 ng/m^3 . Die maximalen Konzentrationen betragen rund 0.0162 ng/m^3 und liegen rund 450 m westlich der KVA Linth im Bereich des bewaldeten Berghanges, oberhalb der KVA.
 - VI. Im Jahresmittel liegen die berechneten Zusatzbelastungen für Formaldehyd und Acetaldehyd bei bis zu $0.203 \text{ } \mu\text{g/m}^3$. Das Maximum liegt im Bereich des bewaldeten Berghanges, 450 m westlich der KVA. Die JMW Zusatzbelastungen liegen 3Größenordnungen unter dem (8-Stunden) MAK Wert. Die jahresgemittelten Depositionsflüsse erreichen maximal $0.892 \text{ mg/(m}^2 \text{ d)}$.

Die Ergebnisse aus den Simulationen unter den Punkten III bis V müssen hinsichtlich ihrer möglichen schädlichen Gesundheits- und Umweltauswirkungen durch Nitramine und Nitrosamine in Summe betrachtet werden. Werden die jahresgemittelten Zusatzbelastungen aus III bis V summiert (für jahresdurchschnittliche MEA Emissionen von 1 mg/Nm^3), wird der Zielwert von 0.03 ng/m^3 im Untersuchungsgebiet eingehalten. Das Maximum der Zusatzbelastung beträgt 0.022 liegt ca. 420 m bis 520 m westlich im Wald oberhalb der KVA. Das berechnete jahresdurchschnittliche Maximum wird durch die direkten Nitrosamin Emissionen dominiert. Photolytische Abbaureaktionen der Nitrosamine wurden dabei nicht berücksichtigt.

Beim Emissionsszenario mit dem Kurzzeit wert werden bis zu 0.0479 ng/m^3 im Jahresmittel als kritische Summe für Nitrosamine und Nitramine berechnet. Bei diesem MEA Emissionsszenario wird das Ausbreitungsmuster durch die Nitramine in der Fläche dominiert, vor allem östlich der KVA. Die MEA Emissionen mit dem Kurzzeitwert sind um rund Faktor 2.5 zu hoch um den JMW Zielwert von 0.03 ng/m^3 durch Nitramine und Nitrosamine einhalten zu können.

Generell neigt der gewählte Ansatz zur Überschätzung der maximalen Nitramin Zusatzbelastungen da photochemische Prozesse auf der betrachteten äußerst fein aufgelösten lokalen Skala nicht berücksichtigt werden können. Auch die simulierten direkt emittierten Nitrosamine werden tendenziell im der maximalen sommerlichen Konzentrationen stark überschätzt, da schnelle photolytische Abbaureaktionen nicht berücksichtigt wurden.

Tabelle 10: Zusammenstellung der maximalen jahresdurchschnittlichen MEA, MEA*, NA, NS_{dir} und DMA* Konzentrationen.

Szenario	Maximale JMW Konzentration mit JMW Emission 1 mg/Nm³ [ng/m ³]	Maximale JMW Konzentration mit max Kurzzeit Emission 5 mg/Nm³ [ng/m ³]
MEA	16.1	80.5
MEA*	0.0583	0.2916
NA	0.0081	0.0408
NS _{dir}	0.0162	0.0162
DMA*	5.8E-06	5.8E-06
NA+NS_{dir}+DMA*	0.022	0.0479

5. Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Vereinfachtes Schema zur Darstellung der Entstehung schädlicher Amin Abbauprodukte und deren Zerfall in der Amin- und Stickoxid Abgasfahne, aus [2].	7
Abbildung 2: Beurteilungsschema für die Ausbreitungsmodellierung.	9
Abbildung 3: Verallgemeinertes Schema für vereinfachte atmosphärische Photo-Oxidation von Aminen, nach Nielsen et al., 2012 [1].	12
Abbildung 4: Darstellung des implementierten vereinfachten Reaktionsschemas am Beispiel von A = Dimethylamin zur Abschätzung von Nitrosaminen, Nitraminen und Imine in Summe.	15
Abbildung 5: KVA Linth und Umgebung, Blickrichtung von Bilten (Linth-Escherstrasse) aus gesehen.	18
Abbildung 6: KVA Linth und Umgebung, mit Blickrichtung von Niederurnen.	18
Abbildung 7: Untersuchungsgebiet, Ausschnitt überlieferte Windfeldbibliothek Daten (äußerer grüner Rahmen) und gewählte Modelldomain für Ausbreitungsrechnungen (blauer Rahmen).	19
Abbildung 8: Lage der Meteorologischen Stationen, der KVA Linth und der Modelldomain der Windfeldbibliothek.	22
Abbildung 9: Verlauf der vorgegebenen $\cdot\text{OH}$ Radikal Konzentration im Zeitraum 14.05. bis 23.05.2019.	23
Abbildung 10: Verlauf der vorgegebenen $\cdot\text{OH}$ Radikal Konzentration im Zeitraum 25.11. bis 03.12.2019.	23
Abbildung 11: Exemplarisches Windfeld im Bereich KVA Linth für stabile Schichtungsverhältnisse.	24
Abbildung 12: Exemplarisches Windfeld im Bereich KVA Linth für konvektive Schichtungsverhältnisse.	25
Abbildung 13: Gemessene Windrose an der an der meteorologischen Messstation Schmerikon.	27
Abbildung 14: Simulierte Windrose an der meteorologischen Messstation Schmerikon.	27
Abbildung 15: Gemessener tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen an der meteorologischen Messstation Schmerikon.	28
Abbildung 16: Simulierter tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen an der meteorologischen Messstation Schmerikon.	28
Abbildung 17: Gemessene Häufigkeit der Windgeschwindigkeit an der Station Schmerikon.	29
Abbildung 18: Simulierte Häufigkeit der Windgeschwindigkeit an der Station Schmerikon.	29
Abbildung 19: Gemessene Windrose (10 m) an der meteorologischen Station Glarus.	30
Abbildung 20: Simulierte Windrose (10 m) an der meteorologischen Station Glarus.	30
Abbildung 21: Gemessener tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen an der meteorologischen Messstation Glarus.	31
Abbildung 22: Simulierter tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen an der meteorologischen Messstation Glarus.	31

Abbildung 23: Gemessene Häufigkeit der Windgeschwindigkeit an der Messstation Glarus.	32
Abbildung 24: Simulierte Häufigkeit der Windgeschwindigkeit an der Messstation Glarus.	32
Abbildung 25: Simulierte Windrose (10 m) am Standort KVA Linth.	33
Abbildung 26: Simulierter tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen in 10 m am Standort KVA Linth.	33
Abbildung 27: Simulierte Häufigkeit der klassifizierten Windgeschwindigkeit in 10 m am Standort KVA Linth.	34
Abbildung 28: Simulierte Windrose in 50 m Höhe über Grund am Standort KVA Linth.....	34
Abbildung 29: Simulierter tageszeitlicher Häufigkeitsverlauf der dominanten Windrichtungen in 50 m am Standort KVA Linth.	35
Abbildung 30: Simulierte Häufigkeit der klassifizierten Windgeschwindigkeit in 50 m am Standort KVA Linth.	36
Abbildung 31: Berechneter JMW MEA in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ im Umfeld der KVA Linth.....	37
Abbildung 32: Berechneter JMW MEA in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ im nahen Umfeld der KVA Linth.....	38
Abbildung 33: Berechneter JMW MEA in $\mu\text{g}/\text{m}^3$ für MEA Emissionsszenario im Umfeld der KVA Linth.....	38
Abbildung 34: JMW MEA Deposition in $\text{mg}/(\text{m}^2\text{d})$ im Umfeld der KVA Linth.....	39
Abbildung 35: JMW MEA Deposition in $\text{mg}/(\text{m}^2\text{d})$ im nahen Umfeld der KVA Linth.	39
Abbildung 36: JMW MEA Deposition für Emissionsszenario im Umfeld der KVA Linth. ...	40
Abbildung 37: JMW MEA Deposition für Emissionsszenario im nahen Umfeld der KVA Linth.	40
Abbildung 38: Simulierter JMW MEA* in ng/m^3 KVA Linth.	41
Abbildung 39: Simulierter JMW MEA* in ng/m^3 im nahen Umfeld der KVA Linth.....	42
Abbildung 40: Simulierter JMW MEA* in ng/m^3 für das Emissionsszenario KVA Linth.	42
Abbildung 41: Berechneter JMW Nitramin in ng/m^3 im nahen Umfeld der KVA Linth.	43
Abbildung 42: Berechneter JMW Nitramin in ng/m^3 im nahen Umfeld KVA Linth. vorige Abbildung wurde die Skalierung zur des Maximums angepasst.....	44
Abbildung 43: Berechneter JMW Nitramin in ng/m^3 Emissionsszenario im Umfeld der KVA Linth.....	44
Abbildung 44: JMW Nasse und trockene MEA* Deposition im Umfeld der KVA Linth.	45
Abbildung 45: JMW Nasse und trockene MEA* Deposition für das Emissionsszenario KVA Linth.....	45
Abbildung 46: JMW DMA* Proxy Konzentration im nahen Umfeld der KVA Linth, die berechneten Konzentrationen liegen im „Sub-“Piko-Gramm Bereich.	46
Abbildung 47: JMW NS Zusatzbelastung (aus direkten NS Emissionen) im nahen Umfeld der KVA Linth.....	47
Abbildung 48: JMW NS Zusatzbelastung im nahen Umfeld der KVA Linth, im Gegensatz zur vorigen Abbildung wurde die Skalierung zur Darstellung des Maximums angepasst.	48
Abbildung 49: JMW $\sum([\text{NA}]+[\text{DMA}^*]+[\text{NS}])$ Zusatzbelastungen KVA im Umfeld der KVA Linth für jahresdurchschnittliche MEA Emissionen.....	49

Abbildung 50: JMW $\sum([NA]+[DMA^*]+[NS])$ Zusatzbelastungen KVA im nahen Umfeld der KVA Linth für jahresdurchschnittliche MEA Emissionen.49

Abbildung 51: JMW $\sum([NA]+[DMA^*]+[NS])$ Zusatzbelastungen im Umfeld der KVA Linth für Emissionsszenario.50

Abbildung 52: JMW $\sum([NA]+[DMA^*]+[NS])$ Zusatzbelastungen im nahen Umfeld der KVA Linth für Emissionsszenario51

Abbildung 53: Lage der Rezeptoren im nahen Umfeld der KVA Linth.52

Abbildung 54: JMW Formaldehyd/Acetaldehyd Konzentration im nahen Umfeld der KVA Linth.....55

Abbildung 55: JMW Form-/Acetaldehyd Deposition im Umfeld der KVA Linth.....56

6. Literaturverzeichnis

- [1] Nielsen C.J., Herrmann H. and Weller C.: Atmospheric chemistry and environmental impact of the use of amines in carbon capture and storage (CCS), Chem. Soc. Rev. (2012a), 41, 6684-6704.
- [2] Borgnes, D., Price, C.: Amine dispersion modelling Carbon Capture Filborna EfW plant. Norsk Energy report, 26p, 2023.
- [3] Låg M., Lindeman B., Instanes C., Brunborg G., Schwarze P.: Health effects of amines and derivatives associated with CO₂ capture NIPH, ISBN 978-82-8082-462-2, 2011.
- [4] Abstimmungsgespräch Videokonferenz 10.09.2024 AWEL/TU-Graz/ZAR Ausbreitungsmodellierung
- [5] Price, C., Carruthers, D., Jinks, D.: Improving Post-Combustion Carbon Capture Air Quality Risk Assessment Techniques, Final report, Cambridge Environment Research Consultants, FM1384/R6/24, 145 p, 2024.
- [6] Karl M., Castell N., Simpson D., Solberg S., Starrfelt J., Svendby T., Walker S.E., Wright R.F.: Uncertainties in assessing the environmental impact of amine emissions from a CO₂ capture plant, Atmos. Chem. Phys. (2014), 14, 8533–8557, 2014.
- [7] Wolke, R., Tilgner, A., Schrödner, R., Nielsen, C., Herrmann, H.: Regional scale dispersion modelling of amines from industrial CCS processes with COSMO-MUSCAT, In: Steyn, D., Chaumerliac, N. (eds) Air Pollution Modeling and its Application XXIV. Springer Proceedings in Complexity. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-319-24478-5_42, 2016.
- [8] Bergamin, L. GRAMM Windfeldbibliothek für Horgen und Umgebung bereitgestellt von ECOLOT GmbH Bern 27.01.24, persönliche Kommunikation L. Bergamin.
- [9] Almbauer, R.A.: A new finite volume discretisation for solving the Navier-Stokes equations. Numer. Methods Laminar Turbul. Flow (1995), Bd. 9, S. 286–295.
- [10] Uhrner, U., Forkel, R., Werhahn, J., Reifeltshammer, R.J.: Development and Application of a Multi-scale Flow Field Analysis System for Complex Terrain, 19th international conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling - Bruges, Belgium, 2019.
- [11] Öttl, D.: Documentation of the prognostic mesoscale model GRAMM (Graz Mesoscale Model) Version 20.01. Amt der Stmk. LR, FA 15, GRAMM Documentation, Jan. 2020.
- [12] Öttl, D., Kukkonen, J., Almbauer, R.A., Sturm, P.J., Pohjola M., Härkönen, J.: Evaluation of a Gaussian and a Lagrangian model against a roadside dataset, with focus on low wind speed conditions. Atmos. Environ. (2001) 35, 2123-2132.
- [13] U. Uhrner, B.C. Lackner, R. Reifeltshammer, M. Steiner, R. Forkel, P.J. Sturm: Inter-Regional Air Quality Assessment, - Bridging the Gap between Regional and Kerbside PM Pollution, Results of the PMinter Project. VKM-THD Mitteilungen, Volume 98, Verlag der Technischen Universität Graz, ISBN: 978-3-85125-364-1, 2014.
- [14] Öttl, D.: Evaluation of the revised Lagrangian particle model GRAL against wind-tunnel and field experiments in the presence of obstacles. Boundary Layer Meteorology (2015) 155, 271-287.
- [15] Öttl, D., Kuntner, M., Öttl, D.: Documentation of the Lagrangian Particle Model GRAL (Graz Lagrangian Model) V23.11, 240p, 2023. <https://gral.tugraz.at/>

- [16] Uhrner, U.: Entwicklung eines Modells zur Dispersionsmodellierung von Aminen und deren Zersetzungsprodukten aus der CO₂-Abscheidung in Gelände mit komplexer Topografie, Erstellt im Auftrag des ZAR CO₂-Kompetenzzentrums, Bericht Nr. I-26/24/UUh V&U Inst_23/019/639 vom 29.01.2025.
- [17] Expert Review by Prof. Emeritus Claus J. Nielsen and Prof. Dr. Armin Wisthaler, in-depth evaluation of the study titled “Entwicklung eines Modells zur Dispersionsmodellierung von Aminen und deren Zersetzungsprodukten aus der CO₂-Abscheidung in Gelände mit komplexer Topografie” (Bericht Nr. I-26/24/UUh V&U Inst_23/019/639 vom 29.01.2025), Oslo, 31.03.2025.
- [18] SEPA, 2015: Review of amine emissions from carbon capture systems, version 2.01, August 2015.
- [19] de Koeijer, G., Enge, Y.O., Thebault, C., Berg, S., Lindland, J., Overå, S.J.: European CO₂ Test Centre Mongstad – testing, verification and demonstration of postcombustion technologies. *Energy Procedia* (2009) 1, 1321–1326.
- [20] de Koeijer, G., Enge, Y., Sanden, K., Graff, O.F., Falk-Pedersen, O., Amundsen, T., Overå, S.: CO₂ Technology Centre Mongstad – design, functionality and emissions of the amine plant. *Energy Procedia* (2011) 4, 1207–1213.
- [21] TCM Technology Centre Mongstad <https://tcmda.com/>
- [22] Nielsen, C., J., D’Anna, B., Karl, M., Aursnes, M., Boreave, A., Bossi, R., Bunkan, A., J., C., Glasius, M., Hansen, A., M., K., Hallquist, M., Kristensen, K., Mikoviny, T., Maguta, M., M., Müller, M., Nguyen, Q., Westerlund, J., Salo, K., Skov, H., Stenstrøm, Y., Wisthaler, A.: Summary Report: Photooxidation of Methylamine, Dimethylamine and Trimethylamine. Climit project no. 201604, NILU OR 2/2011.
- [23] Nielsen, C. J., D’Anna, B., Bossi, R., Bunkan, A. J. C., Dithmer, L., Glasius, M., Hallquist, M., Hansen, A. M. K., Lutz, A., Salo, K., Maguta, M. M., Nguyen, Q., Mikoviny, T., Müller, M., Skov, H., Sarrasin, E., Stenstrøm, Y., Tang, Y., Westerlund, J., and Wisthaler, A.: Atmospheric Degradation of Amines (ADA): summary report from atmospheric chemistry studies of amines, nitrosamines, nitramines and amides. University of Oslo, Oslo, 2012b.
- [24] Borduas N., Abbatt J.P.D. and Murphy J.G.: Gas Phase Oxidation of Monoethanolamine (MEA) with OH Radical and Ozone: Kinetics, Products, and Particles, *Environ. Sci. Technol.* (2013), 47, 12, 6377–6383.
- [25] Manzoor, S., Korre, A., Durucan, S., Simperler, A.: Atmospheric chemistry modelling of amine emissions from post combustion CO₂ capture technology. *Energy Procedia* (2014), 63, 822–829.
- [26] Knudsen, S., Cassiani, M., Karl, M., Slørdal, L.H., Tarrasón, L.: CO₂ Capture Mongstad Project/H&ETQPAmine2, Modelling atmospheric dispersion for components from post combustion amine based CO₂ capture, NILU OR ./2009, 2009.
- [27] Karl M., Wright R.F., Berglen T.F., Denby, B.: Worst case scenario study to assess the environmental impact of amine emissions from a CO₂ capture plant. *Int. J. Greenh. Gas Con.* (2011), 5, 439–447.
- [28] Price, C., Borgnes, D.: Dispersion and deposition modelling NO₂, nitrosamines and nitramines. Klemetsrud Carbon capture plant, 34p, 2020.

- [29] Låg, M., Andreassen, Å., Instanes, C., Lindemann, B.: Health effects of different amines and possible degradation products relevant for CO₂ capture. Oslo, Norway (FHI Report 2009:3) 2019. Available at: <http://www.fhi.no/dav/de810a615a.pdf>
- [30] Brooks, S., Wright, R. F.: The toxicity of selected primary amines and secondary products to aquatic organisms: A review. NIVA Report 5698-2008, Oslo, Norway, 2008.
- [31] OSHA, 2010. U.S. Occupational Safety and Health Administration. General Industry Air Contaminants Standard (29 CFR 1910.1000), Washington, DC: U.S. Government Printing Office, Office of the Federal Register. <https://www.osha.gov/laws-regs/regulations/standardnumber/1910/1910.1000TABLEZ1>
- [32] Calamari, D., Da Gasso, R., Galassi, S., Provini, A., Vighi, M., 1980. Biodegradation and toxicity of selected amines on aquatic organisms. *Chemosphere* 9 (12), 753–762.
- [33] Technische Regeln für Gefahrstoffe, *Krebserzeugende N-Nitrosamine der Kat 1A und 1B TRGS 552*, (2018).
- [34] US Environmental Protection Agency, IRIS database: <http://www.epa.gov/IRIS/subst/0042.htm>
- [35] Richardson, S.D., Plewa, M.J., Wagner, E.D., Schoeny, R., Demarini, D.M.: Occurrence, genotoxicity, and carcinogenicity of emerging disinfection by-products in drinking water: a review and roadmap for research. *Mutat. Res.* (2007) 636 (1–3), 178–242.
- [36] Wollin, K.-M., Dieter, H.H.: Toxicological guidelines for monocyclic nitro-, amino and aminonitroaromatics, nitramines, and nitrate esters in drinking water. *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* (2005) 49 (1), 18–26, doi:10.1007/s00244-004-0112-2.
- [37] California Environmental Protection Agency: Air Toxics Hot Spots Program Risk Assessment Guidelines: Part II. Technical Support Document for Describing Available Cancer Potency Factors. Office of Environmental Health Hazard Assessment, Berkeley, CA, 1999.
- [38] Siegel D.M., Frankos V.H., Schneiderman M.A. Formaldehyde risk assessment for occupationally exposed workers. *RTP* (1983) 3(4):355–371 [PubMed: 6658031].
- [39] Uhrner, U., Toenges-Schuller, N., Stadlhofer, W., Reifeltshammer, R.J., Hausberger, S.: Specification of Zero-Impact Vehicle Emissions and Demonstration of Zero Impact, 6p, 25th Int. Transport and Air Pollution and 3rd Shipping and Environment Conference, Gothenburg 25-28 September 2023.
- [40] VDI 3945-3 (2000): Environmental Meteorology. Atmospheric dispersion models. Particle Model. Deutschland, Düsseldorf, 60 pp.
- [41] Seinfeld, J.H. and Pandis, S.N.: *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*, John Wiley & Sons, New York, 1997.
- [42] Abstimmungsgespräch mit A. Wisthaler. Diskussion im Rahmen von [16],[17]
- [43] Asman, W.A.H., Sutton, M.A., Schjorring, J.K., *Ammonia: emission, atmospheric transport and deposition*, *New Phytol.* (1998), 139, 27-48.
- [44] Schrader, F., Brümmer, D., *Genfer Luftreinhaltkonvention der UNECE: Literaturstudie zu Messungen der Ammoniak-Depositionsgeschwindigkeit*, Umweltbundesamt, Texte 67/2014, ISSN 1862-4804, <http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/genfer-luftreinhaltkonvention-der-unece>
- [45] DNV DET NORSKE VERITAS: Report for Modelling for atmospheric Dispersion of Components from post-combustion amine-based CO₂ capture, 2010.

- [46] de Koeijer, G., Talstad, V.R., Nepstad, S., Tønnessen, D., Falk-Pedersen, O., Maree, Y., Nielsen, C.: International Journal of Greenhouse Gas Control 18 (2013), 200–207.
- [47] <https://nilu.brage.unit.no/nilu-xmlui/bitstream/handle/11250/3049082/NILU-rapport-11-2018.pdf>
- [48] Rohrer, F., Berresheim, H.: Strong correlation between levels of tropospheric hydroxyl radicals and solar ultraviolet radiation. Nature (2006), 442, 184-187.
- [49] Hewitt, C.N., Harrison, R.M.: Tropospheric Concentrations of the Hydroxyl Radical – A review, Atmospheric Environment (1985), Vol. 19, No. 4, 545-554.
- [50] Lelieveld, J., Gromov, S. Pozzer, A., Taraborrelli, D.: Global tropospheric hydroxyl distribution, budget and reactivity, Atmos. Chem. Phys. (2016), 16, 12477–12493.
- [51] Graedel, T.E., Farrow L.A. and Weber T.A.: Kinetic Studies of the photochemistry of the urban troposphere, Atmospheric Environment (1976), 10, 1095-1116.
- [52] Heard, D.E., Carpenter, L.J., Creasey, D.J., Hopkins, J.R., Lee, J.D., Lewis, A.C., Pilling M.J., Seakins, P.W., Carslaw, N., Emmerson, K.M.: High levels of the hydroxyl radical in the winter urban troposphere, GRL (2004), Vol. 31, L18112, doi:10.1029/2004GL020544.
- [53] Khan, M.A.H., Ashfold, M.J., Nickless, G., Martin, D., Watson, L.A., Hamer, P.D., Wayne, R.P., Canosa-Mas, C.E., Shallcross, D.E.: Night-time NO₃ and OH radical concentrations in the United Kingdom inferred from hydrocarbon measurements, Atmos. Sci. Lett., 9 (2008), pp. 140-146.
- [54] Morken A.K., Nenseter B., Pedersen S., Chhaganlal M., Feste J.K., Tyborgnes R.B., Ullestad Ø., Ulvatn H., Zhu L., Mikoviny T., Wisthaler A., Cents T., Bade O.M., Knudsen J., De Koeijer G., Falk-Pedersen O., Hamborg E.S.: Emission results of amine plant operations from MEA testing at the CO₂ Technology Centre Mongstad, Energy Procedia 63 (2014) 6023–603
- [55] Pasquill F.: „The estimation of the dispersion of windborne material”. Meteorol. Mag., 1961, Vol. 90, p. 33-49.
- [56] Turner D.B.: „A diffusion model for an urban area”. J. Appl. Meteor., 1964, Vol. 3, p. 83-91.
- [57] Venkatram A.: „An examination of the Pasquill-Gifford-Turner dispersion scheme”. Atm. Env., 1996, 8, p. 1283-1290.
- [58] US-EPA: „Meteorological Monitoring Guidance for Regulatory Modeling Applications”, EPA-454/R-99-005. Office of Air and Radiation. Office of Air Quality Planning and Standards. Research Triangle Park, NC 27711, p 171, 2000.
- [59] IDAweb Datenportal für Lehre und Forschung, Bundesamt für Meteorologie und Klimatologie MeteoSchweiz; <https://www.meteoschweiz.admin.ch/service-und-publikationen/service/wetter-und-klimaprodukte/datenportal-fuer-lehre-und-forschung.html>.
- [60] U. Uhrner: The impact of new sub-grid scale orography fields on the ECMWF model, Reading, UK, ECMWF, Research Department, Technical Memorandum No.329, 49p, 2001.
- [61] B.C. Lackner, U. Uhrner, R. Reifeltshammer, R. Forkel, P.J. Sturm: Integral Air Quality Assessment to resolve the PM Background: The Role of Traffic Emissions and Ammonia in Secondary Aerosol Formation, Transport and Air Pollution, p. 1 – 13, 2014.

- [62] Peuch, V.-H., and Coauthors, 2016: Monitoring Atmospheric Composition and Climate 3 (MACC-III): Final report. European Commission Rep., 148 pp., https://atmosphere.copernicus.eu/sites/default/files/repository/MACCIII_FinalReport.pdf, 2016.
- [63] Wolke, R., Schroder, W., Schrodner, R., Renner, E.: Influence of grid resolution and meteorological forcing on simulated European air quality: A sensitivity study with the modeling system COSMO-MUSCAT (2012). *Atmos Environ* 53: 110-130.
- [64] Öttl, D. and Uhrner, U.: Development and evaluation of GRAL-C dispersion model, a hybrid Eulerian-Lagrangian approach capturing NO-NO₂-O₃ chemistry, *Atmos. Environ.* 45, 2011.
- [65] ADMS 5 User guide, Amine Chemistry Supplement. Cambridge Environment Research Consultants, 2016.
- [66] Hurley, P.J., Physick, W.L., Luhar, A.K.: TAPM: a practical approach to prognostic meteorological and air pollution modelling. *Environmental Modelling & Software* (2005) 20, 737–752.
- [67] Tønnesen, D.: Update and Improvement of Dispersion Calculations for Emissions to Air from TCM's Amine Plant, Part II-Likely case Nitrosamines, Nitramines and Formaldehyde, Scientific report, NILU OR 52/2011, 60p, 2011.
- [68] Karl, M., Svendby T., Walker S.E., Velken A.S., Castell N., Solberg S.: Modelling atmospheric oxidation of 2-aminoethanol (MEA) emitted from post-combustion capture using WRF–Chem, *Sci. Total Environ.* (2015), 527–528, pp. 185-202.
- [69] Price, C., Strickland, S., Carruthers, D.: Atmospheric Chemistry Modelling, Executive Summary, prepared for CO₂ Capture Mongstad Project, Cambridge Environment Research Consultants, 2012.
- [70] Hertel, O. and Berkowics, R. (1989) 'Modelling NO₂ concentrations in a street canyon', *Ed. National Environmental Institute, DMU Luft A-131, Denmark.*
- [71] Denby, B.R. (2011) 'Guide on modelling Nitrogen Dioxide (NO₂) for air quality assessment and planning relevant to the European Air Quality Directive', FAIRMODE, ETC/ACM Technical Paper 2011/15, pp.1-89.