

„Badania fizykochemiczne produktów utleniania związków terpenowych w aspekcie poszukiwania nowych markerów wtórnego aerozolu atmosferycznego”

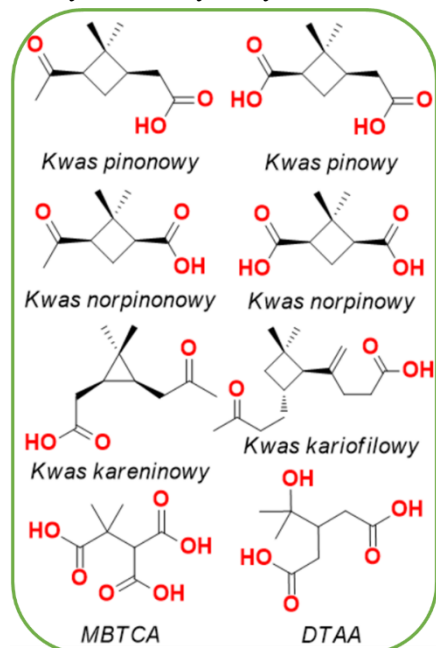
Atmosfera ziemską jest mieszaniną chemiczną o skomplikowanym składzie i złożonych właściwościach fizykochemicznych. Szacuje się, że około 2000 Tg/rok (1 Tg = 10⁹ kg) związków organicznych emitowanych jest do atmosfery jako organiczne gazy resztkowe oraz kolejne 300 Tg/rok jako pyły zawieszone (aerozole). Związki organiczne są emitowane bezpośrednio do atmosfery ze źródeł naturalnych, oraz źródeł antropogenicznych, poprzez spalanie paliw kopalnych lub biomasy (Rysunek 1). W skali globalnej potwierdzono, że cząstki aerozoli przyczyniają się do zmian klimatycznych Ziemi, wpływają na jej bilans radiacyjny oraz na zdrowie człowieka.

Wtórne aerozole atmosferyczne (SOA) tworzą się na drodze skomplikowanych reakcji chemicznych, w których substratami są lotne związki organiczne, takie jak np. terpeny (tzw. prekursorzy SOA). Od wielu lat badania głównych dróg transformacji, składu chemicznego i właściwości fizykochemicznych prekursorów SOA są intensywnie prowadzone w wielu laboratoriach na całym świecie. Jednak nawet pomimo tak intensywnych badań szacuje się, że jedynie niewielka część (ok. 10-15%) składników aerozolu została wiarygodnie zidentyfikowana.

Celem prowadzonej pracy doktorskiej jest szczegółowe poznanie właściwości fizykochemicznych i reaktywności wybranych kwasów karboksylowych (Rysunek 2), a także określenie możliwych transformacji

chemicznych zachodzących z ich udziałem w dolnych warstwach atmosfery (troposfera). Wybrane do badania związki budzą szerokie zainteresowanie w świecie chemii atmosfery, jawiąc się jako tzw. markery starzenia się aerozolu atmosferycznego, a więc jako wskaźniki procesu jego starzenia (zmian chemicznych) w atmosferze. Badania w ramach rozprawy doktorskiej w pierwszym etapie obejmują (i) syntezę wybranych do badań związków (które nie są dostępne handlowo), (ii) określenie ścieżek oraz energii rozpadu, a także reaktywności w fazie gazowej, z użyciem technik spektrometrii mas, (iii) wykonanie symulacji mechanizmów reakcji i fragmentacji z wykorzystaniem metod obliczeniowych chemii kwantowej, (iv) wyznaczenie iloczynów rozpuszczalności w wodzie, w zależności od pH roztworu.

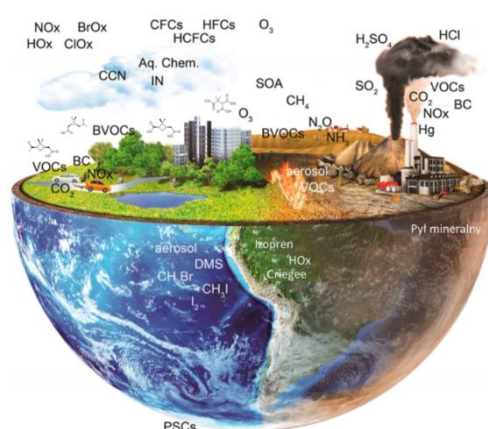
Kolejnym ważnym punktem prowadzonych badań jest przeprowadzenie eksperymentów zarówno w fazie wodnej, jak i gazowej z reagentami utleniającymi wszechobecnymi w atmosferze, takimi jak rodniki azotanowe (NO₃) oraz rodniki hydroksylowe (•OH). Takie eksperymenty prowadzi się w komorach aerozolowych, dla fazy gazowej i symulacyjnych układach doświadczalnych w fazie wodnej. Zaletą tych doświadczeń jest wytworzenie aerozolu w ściśle kontrolowanych warunkach, w obecności wytwarzanych *in situ* rodników lub ozonu. Najważniejszym aspektem powstałego w tych



Rysunek 2 Kwasy karboksylowe wybrane do badania w ramach prowadzonej rozprawy doktorskiej.

doświadczeniach, tzw. laboratoryjnie wytworzonego SOA, jest to, że ma on znacznie uproszczony skład w zestawieniu ze składem naturalnego aerozolu. Dzięki temu dużo prostsze jest ustalenie struktury powstałych produktów. Uzyskane wyniki umożliwią określenie dróg transformacji badanych związków oraz zidentyfikowanie nowych markerów starzenia się aerozolu atmosferycznego. Badania w symulowanych warunkach w komorze aerozolowej, ze względu na brak takiego instrumentu w Polsce planowane są w Grupie prof. Spyrosa Pandisa na Uniwersytecie w Patras w Grecji. Należy podkreślić, że eksperymenty te są niezbędne do pełnego opisu transformacji badanych związków w atmosferze i stanowią integralną część badań prowadzonych w ramach rozprawy doktorskiej.

Podsumowując, opisanie właściwości fizykochemicznych tych związków oraz ich możliwych ścieżek transformacji, zarówno w fazie wodnej, jak i gazowej, jest kluczem do fundamentalnego zrozumienia procesów tworzenia wtórnego organicznego aerozolu atmosferycznego oraz jego oddziaływania na zdrowie i jakość życia człowieka.



Rysunek 1 Widok atmosfery podkreślający główne biogeniczne oraz antropogeniczne źródła oraz klasy emitowanych związków.