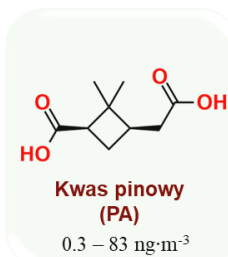
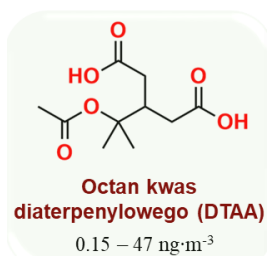
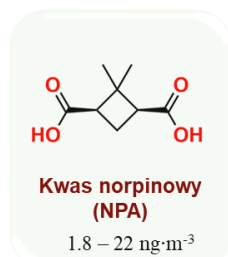
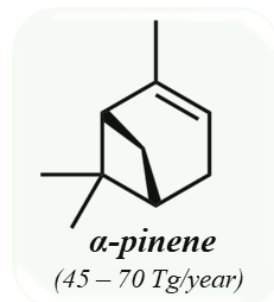


Reakcje rodnikowe w fazie wodnej produktów starzenia α - pinenu - kinetyka, mechanizm i badanie produktów reakcji

Atmosfera ziemiska jest mieszaniną chemiczną o skomplikowanym składzie i złożonych właściwościach fizykochemicznych. Szacuje się, że około 2000 TG*/rok związków organicznych jest emitowanych do atmosfery jako gazy, a kolejne 300 Tg/rok jako zawieszane cząstki (aerozole). Od wielu lat badania dróg tworzenia aerozolu atmosferycznego cieszą się intensywnym zainteresowaniem naukowców na całym świecie. Jednym z powodów jest rosnąca świadomość wpływu aerozoli na zmiany klimatyczne Ziemi, a także na zdrowie człowieka. Znaczna część aerozoli jest reprezentowana przez tzw. wtórny aerozol organiczny (SOA).¹

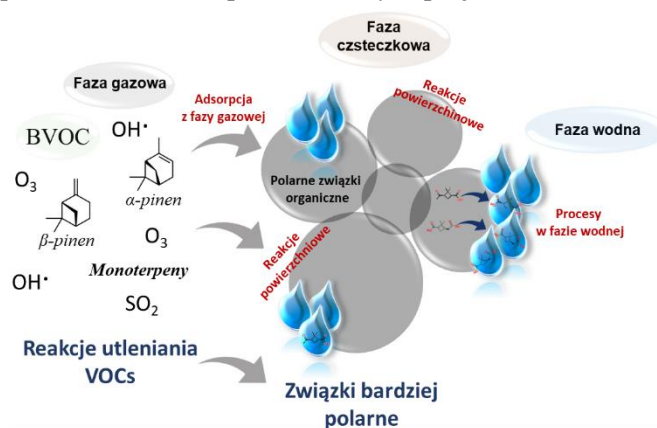


α -pinen (C₁₀H₁₆) jest jednym z ważniejszych globalnych źródeł SOA, ponieważ jego szacowana roczna emisja wynosi ~ 70 Tg – stawia go to na drugim miejscu w rankingu prekursorów SOA. W reakcji α -pinenu z różnymi czynnikami utleniającymi występującymi w atmosferze, takimi jak: ozon (O₃) czy rodniki nieorganiczne (głównie: HO·, NO₃) powstają związki bardziej hydrofilowe i polarne, które zdolne są do kondensacji na istniejących w atmosferze cząstkach. Bogactwo wody, rozproszony w atmosferze w różnej postaci, w tym mgły, deszczu, chmur i wilgotnego aerozolu, sprawia, że stanowi ona ważne medium, w którym związki ulegają różnym transformacjom (Schemat 1). Jednakże, reakcje tworzenia wtórnego aerozolu organicznego w fazie wodnej (aqSOA) są bardzo słabo poznane. Jednym z powodów jest brak czystych wzorców (nieдоступnych handlowo), których syntezy niejednokrotnie są skomplikowane i składają się z kilku, a nawet kilkunastu etapów. Dlatego śledzenie przemian aqSOA staje się trudnym, aczkolwiek interesującym tematem w dziedzinie chemii atmosferycznej.

Celem prezentowanego projektu jest szczegółowe poznanie mechanizmów tworzenia aqSOA w reakcji trzech ważnych produktów utleniania α -pinenu (**kwasu cis-pinowego (PA)**, **octanu kwasu diaterpenylowego (DTAA)** oraz **kwasu cis-norpinowego (NPA)**) z rodnikiem OH. Wybrane do badania związki budzą szerokie zainteresowanie w świecie chemii atmosfery, jawiąc się jako tzw. markery starzenia się aerozolu α -pinenowego, a więc jako wskaźniki procesu jego starzenia (zmian chemicznych) w atmosferze. Dodatkowo jako wysoce utlenione związki wykazują bardzo dobrą rozpuszczalność w wodzie. Biorąc pod uwagę złożoność aerozolu atmosferycznego, ważnym aspektem powstałego w tych doświadczeniach, tzw.

laboratoryjnie wytworzonego aqSOA, jest to, że ma on znacznie uproszczony skład w zestawieniu ze składem naturalnego aerozolu. Dzięki temu dużo prostsze jest ustalenie struktury powstałych produktów. Szczegółowe określenie dróg transformacji badanych związków w reakcji z rodnikiem OH dostarczy wielu istotnych informacji na temat mechanizmu tworzenia się aqSOA. Ponadto, w prezentowanym projekcie zostaną użyte zaawansowane techniki spektrometrii mas (w tym pomiary wysokiej rozdzielczości), dzięki którym możliwa będzie szczegółowa analiza produktów opisywanych reakcji.

Biorąc pod uwagę, że globalna roczna produkcja aqSOA zamyka się w przedziale 20-30 Tg, reakcje rodnikowe produktów utleniania monoterpenu w fazie wodnej mogą być bardzo ważnym, lecz na razie słabo poznany mechanizmem ich degradacji w atmosferze.



Schemat 1 Procesy zachodzące w atmosferze, prowadzące do powstania składników wtórnego aerozolu atmosferycznego.

1. Hallquist, M., et al., The Formation, Properties and Impact of Secondary Organic Aerosol: Current and Emerging Issues. *Atmospheric Chemistry and Physics* **2009**, 9, 5155-5236.

*Teragram - 10¹² g