

TGA-PTR-ToF-MS: Nowy system do kompleksowej analizy lotnych produktów termicznego rozkładu

Cel projektu: Naszym celem jest stworzenie narzędzia analitycznego do badania rodzaju i ilości lotnych związków organicznych (LZO) emitowanych podczas ogrzewania próbki w kontrolowanych warunkach. Narzędzie to będzie bardzo czułe i umożliwi monitorowanie dynamicznych procesów degradacji termicznej w czasie rzeczywistym. Emisja LZO z materiałów podgrzanych do temperatur, w których ma miejsce degradacja termiczna, postępuje bardzo szybko – wystarczy pomyśleć o zapachu, który towarzyszy topiącym się tworzywom sztucznym. W celu uchwycenia tych emisji w danym momencie nie możemy polegać na podgrzaniu próbki i analizie łącznej ilości i rodzaju LZO powstałych podczas całego eksperymentu. Musimy być w stanie śledzić zmiany stężenia setek różnych związków chemicznych sekunda po sekundzie oraz ustalić, w którym momencie lub w jakiej temperaturze zmiany te zachodzą najbardziej dynamicznie. Łącząc obie te informacje uzyskamy całościowy i szczegółowy obraz dotyczący rodzaju, ilości i profilu emisji związków z danej próbki w zależności od czasu i temperatury.

Jak to osiągniemy: Istnieje metoda umożliwiająca podgrzewanie próbki do zadanej temperatury w ściśle kontrolowanych warunkach, jednocześnie mierząc zmiany jej wagi: jest to analiza termogravimetryczna (ang. TGA). Niewielka ilość badanego materiału jest umieszczana na bardzo dokładnej wadze i podgrzewana do ponad 1000 °C w strumieniu gazu. W rezultacie powstaje wykres pokazujący, jak waga próbki zmienia się w czasie wraz ze zmianą temperatury. W celu przeanalizowania złożonej mieszaniny gazów powstających podczas tego procesu wykorzystamy spektrometrię mas. W technice tej cząsteczki gazów są jonizowane, a następnie przy użyciu zaawansowanego detektora ustala się ich dokładną masę, lub raczej stosunek masy do ładunku. Na podstawie intensywności sygnału odpowiadającemu danym jonom można też mierzyć ich ilość. Trudno jest jednak przeprowadzić taki pomiar bezpośrednio i w czasie rzeczywistym, ponieważ strumień gazów wylotowych z TGA, choć zawiera śladowe ilości interesujących nas gazów, składa się głównie z powietrza, a więc w 78% z azotu i 21% z tlenu. Jeśli zjonizujemy te główne składowe powietrza, to nasycony, przeładowany detektor nie będzie w stanie zarejestrować w tym samym czasie LZO. Dlatego też do badania gazów powstających podczas analizy termogravimetrycznej wykorzystamy spektrometr mas z jonizacją poprzez reakcję przeniesienia protonu z analizatorem czasu przelotu (ang. PTR-ToF-MS). Umożliwia on selektywną jonizację, a co za tym idzie analizę wyłącznie LZO, pomijając zupełnie nieorganiczne komponenty powietrza. Umożliwia to monitorowanie w czasie rzeczywistym związków na poziomie stężeń w zakresie 10 części na bilion (ppt), co odpowiada jednej kropli wody w objętości dwóch stadionów olimpijskich. Tym samym będziemy w stanie powiązać zmiany stężenia setek różnych LZO ze zmianą wagi próbki w zależności od temperatury w dowolnym momencie analizy.

Dlaczego jest to istotne: Szczegółowe zbadanie emisji LZO podczas degradacji termicznej jest kluczowe dla opracowania bezpieczniejszych materiałów i przeciwdziałania niepożądanemu wpływowi zanieczyszczeń na środowisko. Istniejące techniki nie umożliwiają śledzenia dynamicznych zmian profili emisji lotnych związków i określania krytycznych temperatur w których generowane są szkodliwe substancje chemiczne. Nasz projekt wypełni tę lukę, umożliwiając naukowcom korelowanie emisji LZO z zachowaniem materiałów stopniowo podgrzewanych do wysokich temperatur. Uzyskane w ten sposób dane pomogą opracować innowacyjne, przyjazne dla środowiska materiały, bezpieczniejsze procesy przetwórstwa żywności i dokładniejsze regulacje dotyczące narażenia na substancje toksyczne.

Spodziewane efekty: W wyniku realizacji projektu zostanie opracowane nowy, czuły, zwalidowany i innowacyjny system analityczny. Następnie przeprowadzona zostanie seria badań mających na celu wykazanie nowych możliwości płynących z jego wykorzystania w różnych dziedzinach nauki:

- W **badaniach materiałowych**, poprzez badanie wpływu składu mieszanek polimerowych na profile emisji LZO podczas ich degradacji termicznej;
- W **chemii żywności**, śledząc powstawanie produktów reakcji Maillarda (brązowienia) mikro-podpłomyków podczas pieczenia;
- W **zdrowiu publicznym**, oznaczając emisje LZO z produktów tytoniowych w kontrolowanych warunkach odwzorowujących nawyki palących.