

Projekt 3.4 Charakterystyka estrów pochodzących z utleniania α -pinenu i β -pinenu za pomocą chromatografii cieczerwowej połączonej ze spektrometrią mas o wysokiej rozdzielczości

Promotor: prof. dr hab. Rafal Szmigielski / dr inż. Agata Błaziak

Instytut: Chemii Fizycznej PAN

Zespół: 17. Chemia Środowiska - prof. dr hab. inż. Rafal Szmigielski

www: <http://groups.ichf.edu.pl/szmigielski>

Opis:

Aerозole atmosferyczne powstają z różnorodnych źródeł naturalnych i antropogenicznych. Ważnym źródłem aerозolu atmosferycznego jest utlenianie węglowodorów nienasyconych, w tym mono- i seskwiterpenów, emitowanych przez rośliny w wyniku złożonych procesów biochemicznych towarzyszących ich wzrostowi. Stwierdzono, że globalna emisja biogenych lotnych związków organicznych, szacowana na 500 – 1130 Tg/rok, znacznie przewyższa emisję ze źródeł antropogenicznych, które wynoszą odpowiednio 100 – 150 Tg/rok. Dlatego też, aby uzyskać szczegółowy opis powstawania aerозolu atmosferycznego i jego reakcji, należy zwrócić szczególną uwagę na źródła naturalne. (Hallquist i in., 2009)

W Europie, w zależności od regionu, najczęstszym budulcem flory leśnej są drzewa iglaste, takie jak sosny. Biorąc pod uwagę, że każdy gatunek iglasty charakteryzuje się szczególną emisją lotnych związków organicznych w fazie gazowej, atmosferę złożonego lasu można określić jako reaktor chemiczny, w którym szereg produktów reaguje z substancjami utleniającymi, takimi jak ozon (O₃), OH/NO₃ rodniki, co jeszcze bardziej komplikuje analizę składu atmosfery leśnej. (Aydin i in., 2014)

Przez ponad dwie dekady, przy użyciu zaawansowanych technik spektrometrii mas identyfikowano związki o dużej masie cząsteczkowej – jako ważne składniki zarówno monoterpenu SOA pochodzenia laboratoryjnego, jak i otoczenia (np. wzrost, lotność, lepkość i aktywność jąder kondensacji chmur (CCN) (Noziere i in., 2015). Jednakże ze względu na brak autentycznych wzorców, struktury molekularne estrów nie są jednoznacznie określone, a jedynie można je postulować w oparciu o dokładne pomiary masy i procesy fragmentacji w źródle spektrometru mas. W rezultacie mechanistyczne rozumienie powstawania estrów dimerów, w szczególności znaczenie chemii fazy gazowej i cząstek, pozostaje nierozpoznane. (Kenseth i in., 2023).

Dlatego w prezentowanym projekcie, wykorzystującym ultrasprawną chromatografię cieczerwową sprzężoną z kwadrupolową spektrometrią mas z ujemnym jonizacją przez elektrorozpylanie [UPLC/(-)ESI-Q-TOF-MS], analiza składu molekularnego SOA zostanie przeprowadzona w celu charakteryzacji dimerów estrów α -pinenu i β -pinenu, które łącznie odpowiadają za więcej niż 50% całkowitego strumienia emisji monoterpenów. (Hallquist i in., 2009).

Cel projektu:

Celem tego projektu jest analiza składu molekularnego wtórnych aerозoli organicznych (SOA) ze szczególnym uwzględnieniem estrów pochodzących z α -pinenu i β -pinenu, przy użyciu ultrasprawnej chromatografii cieczerwowej sprzężonej z spektrometrem mas (UPLC/(-)ESI-Q-TOF-MS). Biorąc pod uwagę znaczący udział biogenych lotnych związków organicznych (BVOC) w tworzeniu się aerозoli atmosferycznych, niniejsze badania mają na celu lepsze zrozumienie mechanistycznego powstawania estrów, uwzględniając złożoność chemii fazy gazowej i skondensowanej w atmosferze leśnej. Charakteryzując związki dimeryczne (i/lub oligomeryczne), postaramy się wyjaśnić ich rolę w tworzeniu się cząstek, wzroście, lotności, lepkości i aktywności jąder kondensacji chmur (CCN). Badania te zapewnią wgląd w naturalne procesy rządzące aerозolami atmosferycznymi, na które w Europie największy wpływ mają emisje z drzew iglastych, takich jak sosny.

Wymagania:

- Wykształcenie: Tytuł magistra chemii, biologii, nauk o środowisku, nauk o atmosferze lub dziedziny pokrewnej;

- doświadczenie badawcze: Podstawowa wiedza z zakresu technik spektrometrii masowej, w szczególności UPLC/(-)ESI-Q-TOF-MS/MS; doświadczenie w pracy z metodami chemii analitycznej;
- kompetencje miękkie: Dobre umiejętności komunikacji w mowie i piśmie w języku angielskim; umiejętność pracy samodzielnej oraz chęć bycia częścią multidyscyplinarnego zespołu badawczego; umiejętności organizacyjne oraz umiejętność zarządzania wieloma zadaniami i terminami; zaangażowanie w bezpieczeństwo i standardy etyczne wymaganych w badaniach naukowych.

Kontakt: rszmigielski@ichf.edu.pl, akolodziejczyk@ichf.edu.pl