

POVZETEK

Cilj doktorskega dela je bil razvoj napovednih modelov za nekatere pomembne fizikalno-kemijske lastnosti organskih spojin in izdelava analizne metode za določevanje organskih spojin v aerosolnih delcih za boljše razumevanje tvorbe sekundarnih organskih aerosolov. Doktorsko delo je razdeljeno na dva dela. V prvem delu sem se ukvarjal s teoretičnim študijem mehanizma tvorbe sekundarnih organskih aerosolov. V ta namen sem na osnovi strukture spojin razvil modele za napovedovanje njihovih lastnosti (Quantitative Structure - Property Relationship, QSPR). Skupaj s sodelavci sem izdelal nov računalniški program MACI (angl. Molecular Activity Characterization Indices), ki sem ga nato uporabil v svojih teoretičnih raziskavah. Razvil sem QSPR modele za napovedovanje lastnosti, iz katerih lahko sklepamo na delež porazdelitve organskih spojin na aerosolih: parnega tlaka, konstante porazdelitve med oktanolom in zrakom – K_{oa} in parametra higroskopičnosti aerosolov – κ . Poleg tega sem razvil tudi dva ločena modela za napovedovanje delnih reakcijskih hitrosti med hidroksilnimi radikali in nekonjugiranimi alkeni. Prvi je bil izdelan na osnovi novega variabilnega povezovalnega indeksa 0. reda in drugi na osnovi primerjave kvantnomehanskih izračunov z eksperimentalnimi podatki. Oba modela sem primerjal s trenutno uveljavljenim modelom. Raziskave nakazujejo, da je alilno mesto veliko reaktivnejše, kot se trenutno upošteva v globalnih modelih. Razvita modela predstavljata pomemben prispevek k boljšemu razumevanju procesov pri nastanku sekundarnega organskega aerosola. V drugem delu disertacije sem razvil analizno metodo za določevanje organskih kislin (dikarboksilnih kislin in hidroksibenzojskih kislin) v atmosferskih delcih PM₁₀ in PM_{2,5}. Uporabil sem sklopljeno tehniko tekočinske kromatografije in tandemske masne spektrometrije. Dikarboksilne kisline se lahko namreč uporabi za oceno prispevka sekundarnih organskih aerosolov. Analizno metodo sem uporabil za določevanje organskih kislin na dveh merilnih mestih (mestno – Maribor center in regionalno ozadje – Iskrba) in v dveh letnih časih (poleti in pozimi). Z vključitvijo meritev, ki so bile izvedene na Agenciji Republike Slovenije za okolje, sem ovrednotil možne vire organskih kislin v Mariboru v poletnem in zimskem obdobju.

Ključne besede: sekundarni organski aerosoli; hidroksilni radikali; delne reakcijske hitrosti; variabilni povezovalni indeksi; tandemska masna spektrometrija; dikarboksilne kisline.