

1. Raziskovalna organizacija (*Research organisation*):

Univerza v Ljubljani, *Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo*

2. Ime in priimek mentorja (*Name and surname of a mentor*):

Matevž Pompe

3. Področje znanosti iz šifranta ARRS (*Primary research field*):

1.04 Kemija

4. Kontaktni e-naslov mentorja (*Contact of a mentor*):

matevz.pompe@fkkt.uni-lj.si

5. Kratek opis programa usposabljanja (*Short description of the program*):

SLO

V zadnjih letih je postalo jasno, da se onesnažen zrak lahko transportira nekaj 1000 kilometrov stran od svojega izvora in tako vpliva na koncentracije oksidantov in aerosolov v troposferi. Prav slednji predstavljajo v zadnjem času še vedno nerešen problem in so pomemben vir prezgodnjih smrti, ki jih zaznamo v področjih s pogostim preseganjem aerosolnih delcev. Največjo neznanko še vedno predstavljajo sekundarni organski aerosoli zaradi zelo kompleksnega in nepopolno pojasnjene mehanizma nastajanja. Za študij omenjenih procesov je potrebno podrobno poznati tako točne koncentracije posameznih ogljikovodikov v zraku kot tudi njihove oksidacijske produkte na aerosolnih delcih.

Zaradi kompleksnosti opazovanega sistema analizni postopki za določevanje omenjenih organskih spojin še niso popolnoma razviti. S stališča analizne kemije se tako srečamo s problemom določevanja kemijsko zelo različnih organskih spojin. Velike razlike tako opazimo tako v vreliščih, porazdelitvenih koeficientih, polarnostih in reaktivnostih le teh. Jasno je, da predstavlja točna identifikacija in kvantifikacija opazovanih zvrsti velik analizni izziv.

Kandidat bo pri svojem delu poskusil čim boljše karakterizacije organskih zvrsti na aerosolih in v plinski fazi uporabljaj najsodobnejše prijeme za ustrezno separacijo in karakterizacijo organskih spojin. Uporabljal bo sodobne separacijske metode sklopljene z masnim spektrometrom. Karakterizacija organskih spojin bo potekala v širokem masnem območju od velikih, skoraj makro molekul, do majhnih hlapnih zvrsti. Poleg določevanja posameznih spojin bo kandidat za karakterizacijo funkcionalnih skupin na aerosolih uporabljal različne spektroskopske tehnike. Kandidat bo vse razvite analizne postopke preveril z meritvami realnih vzorcev.

Reševanje tako kompleksnega problema ni možno brez uporabe sodobnih kemometričnih prijemov. Omenjene principe bo kandidat uporabil tako pri svojem delu na področju razvoja analiznih postopkov, kot tudi za boljšo interpretacijo dobljenih rezultatov, oziroma pri razumevanju fotokemijskih procesov v atmosferi. Pri doktorski disertaciji se bo kandidat spoznal z osnovami kemijskega modeliranja, grupiranja in optimiziranja. Poseben poudarek bo posvečen razvoju napovednih modelov, ki so temeljijo na osnovi kemijske strukture (QSPR).

ANG

In recent years it has become clear that air pollution can be transported some 1,000 kilometers away from its original source, and thus affect the concentration of oxidants and aerosols in the troposphere. The formation of aerosol particles is still very important atmospheric problem, since they are an important source of premature deaths detected in areas with frequent exceeding of the aerosol particles. Among various aerosols a secondary organic aerosols represent especially important problem due to the very complex and unknown mechanism of formation. The studies of above mentioned processes required a thorough understanding of both the exact concentrations of the various hydrocarbons in the air as well as their oxidation products in the aerosol particles.

Due to the complexity of the observed system the analytical procedures for the determination of the aforementioned organic compounds are not yet fully developed. We are facing huge analytical problem, not to analyze such chemically diverse set of organic compounds. Large differences can be observed in the boiling points, partitioning coefficients, polarity and reaction rates with various reactive species. It is obvious that the accurate identification and quantification of the observed species represents a great analytical challenge.

The candidate will be try to characterize organic species in the aerosols and in the gas phase, use the latest techniques for proper separation and characterization of organic compounds using modern separation methods coupled with a mass spectrometer. Characterization of organic compounds will be carried out over a wide mass range from large, almost macro molecules to small volatile ones. The candidate will try to characterize various functional groups on the aerosols using different spectroscopic techniques. The candidate will be test all developed analytical techniques on the real samples.

Solving this complex problem is not possible without the use of modern chemometric approaches. These principles will be used for the development of analytical procedures, as well as for a better interpretation of the obtained results, and to better understand the main photochemical processes in the atmosphere. In his doctoral thesis, the candidate will meet with the basics of chemical modeling, grouping and optimization. Special emphasis will be devoted to the development of predictive models, which are based on chemical structure (QSPR).