

Stanovení tematických okruhů pro státní doktorské zkoušky (SDZ) v oboru

Environmentální analytická chemie

Oborová rada oboru Environmentální analytická chemie **stanovuje** předměty a okruhy SDZ pro jednotlivé studenty následujícím způsobem:

(Platí pro studenty, přihlášené ke SDZ v březnu 2017 s předpokládaným termínem SDZ v červnu 2017)

Student: **Ing. Slavomír Adamec**

Předmět 1: Analytická chemie – Stopová analýza organických polutantů

Předmět 2: Metody studia fotochemických a stechiometrických rozkladů látek

Předmět 3: Metody analýzy pevných látek

Student: **Ing. Daniel Bůžek**

Předmět 1: Analytická chemie – Stopová analýza organických polutantů

Předmět 2: Pokročilé metody molekulové spektrometrie

Předmět 3: Metody analýzy pevných látek

Student: **Ing. Marek Došek**

Předmět 1: Analytická chemie – Stopová analýza organických polutantů

Předmět 2: Moderní elektroanalytické metody

Předmět 3: Elektrochemie

Student: **Mgr. Jakub Ederer**

Předmět 1: Analytická chemie – Stopová analýza organických polutantů

Předmět 2: Rovnováhy chemických polutantů v životním prostředí

Předmět 3: Pokročilé metody molekulové spektrometrie

Student: **Mgr. Michaela Slušná**

Předmět 1: Analytická chemie – Separační metody chromatografické a elektromigrační

Předmět 2: Metody studia fotochemických a stechiometrických rozkladů látek

Předmět 3: Metody analýzy pevných látek

Student: **Ing. Martin Šťastný**

Předmět 1: Analytická chemie – Stopová analýza organických polutantů

Předmět 2: Metody studia fotochemických a stechiometrických rozkladů látek

Předmět 3: Pokročilé metody molekulové spektrometrie

Student: **Ing. Petr Vomáčka**

Předmět 1: Analytická chemie – Separační metody chromatografické a elektromigrační

Předmět 2: Metody studia fotochemických a stechiometrických rozkladů látek

Předmět 3: Metody analýzy pevných látek

Tematické okruhy pro jednotlivé předměty (platí pro všechny studenty, kteří mají uvedený předmět určený jako součást SDZ):

Analytická chemie – Separační metody chromatografické a elektromigrační

1. Princip chromatografické separace, hlavní chromatografické techniky z hlediska uspořádání a převládajícího děje. Základní pojmy v kolonové chromatografii, popis chromatogramu, účinnost separace, účinnost kolony, pojem teoretického patra, Van-Deemterova rovnice.
2. Plynová chromatografie: hlavní součásti zařízení, typy kolon, hlavní typy detektorů, techniky nástřiku, derivatizace, oblasti použití.
3. Kapalinová chromatografie: hlavní součásti chromatografu, chromatografické systémy, kolony a stacionární fáze, hlavní typy detektorů, složení mobilní fáze a ovlivňování retence/separace. Oblasti využití HPLC.
4. Elektromigrační metody: princip separace (elektroforetická pohyblivost a její ovlivňování, elektroosmotický tok), hlavní metody – principy a uspořádání.

Analytická chemie – Stopová analýza organických polutantů

1. Odběr a úprava vzorků, extrakce, čištění, prekoncentrační techniky, derivatizace.
2. Vývoj a validace analytických metod stanovení organických polutantů v životním prostředí.
3. Detektory používané při stanovení organických polutantů a jejich kombinace s chromatografickými technikami – GC-MS, LC-MS.
4. Zpracování získaných dat – požadavky na software, vybrané aplikace pokročilého zpracování dat (integrace chromatogramů a operace s chromatografickými záznamy, fragmentogramy u GC-MS)
5. Nejběžnější organické polutanty v životním prostředí a jejich stanovení (BTEX, VOC, VOX, PAH, ropné látky, PCB, dioxiny, léčiva).

Moderní elektroanalytické metody

1. Klasifikace elektroanalytických metod (potenciometrie, polarografie/voltametrie).
2. Potenciometrie (přímá potenciometrie, potenciometrické titrace, měření pH, ISE).
3. Klasická polarografie a její omezení z hlediska experimentálního uspořádání, elektrodových materiálů aj.
4. Metody s eliminací kapacitního proudu, DPP aj.
5. Metody využívající akumulace analytu na pracovní elektrodě.
6. Elektrody a elektrodové materiály.

Pokročilé metody molekulové spektrometrie

1. Základní pojmy molekulární fotofyziky, charakterizace fotofyzikálních a fotochemických dějů, absorpce a rozptyl světla, kvantové výtěžky, fotochemické zákony a pravidla. UV-Vis absorpční spektroskopie: Lambert-Beerův zákon, metody a podmínky měření.
2. Excitace molekul a jejich následná relaxace. Zářivé a nezářivé přechody. Fluorescence, fosforescence, doby života, kvantové výtěžky, zhášení, Jablonského diagram. Kinetika fotofyzikálních procesů.

3. Molekulární kyslík a jeho význam pro vznik reaktivních kyslíkových částic jako jsou hydroxidové radikály, peroxid vodíku a superoxidový anion-radikál. Vlastnosti a reaktivita těchto částic. Foto-Fentonova reakce. Fotochemické děje v přírodních vodách a v atmosféře. Sluneční záření.
4. Singletový kyslík a jeho význam: excitované stavy molekulárního kyslíku, fotosensitizace a parametry, které tento proces ovlivňují, doba života a reaktivita v různých prostředích, detekce a zhášení singletového kyslíku.
5. Fotoindukované jevy ve složitých systémech a jejich aplikace: polovodičové krystaly a kvantové tečky, LED, fotokatalýza, fotokatalytické štěpení vody, fotoindukovaná hydrofilicita povrchů, fotovoltaické články, barvivem sensitizované solární články.

Metody studia fotochemických a stechiometrických rozkladů látek

1. Vymezení pojmů fotokatalyzátor a reaktivní sorbent, rozdíl mezi fotokatalytickými (FA) a stechiometrickými procesy (ST), vlivy prostředí.
2. Absorpce záření, sorpce látek na povrchu, sorpční izoterm, mechanismus vzniku aktivních skupin, fotolýza.
3. Kinetika a mechanismy FA a ST reakcí, reakční rovnice, kinetické rovnice, řady reakcí, stupeň konverze, průběh křivek u FA a ST reakcí.
4. Materiály pro FA a ST rozklady, sorbenty a reaktivní sorbenty, polovodiče, typy FA materiálů, dopování, kompozitní materiály, typy kompozitů, příklady.
5. Vlastnosti materiálů ovlivňující FA a ST aktivitu: měrný povrch, krystalinita, fázové složení, porozita aj.
6. Experimentální uspořádání, metodiky měření: IR spektroskopie, UV-Vis spektroskopie, hmotnostní spektroskopie, chromatografie a kombinované techniky aj.

Metody analýzy pevných látek

1. Definice a zvláštností analýzy pevných látek, základní pojmy.
2. Mikroskopické metody (optické, elektronové), zobrazování povrchů.
3. Rentgenová fluorescenční analýza, princip, způsoby excitace, využití.
4. Prášková difrakce, především rentgenová, principy, využití, kvalitativní a kvantitativní analýza.
5. Spektrální metody v infračervené, viditelné a ultrafialové oblasti, způsoby provedení, principy, využití.
6. Metody s excitací analytického signálu laserem nebo proudem částic.
7. Kinetické metody: termická analýza, metody založené na chemickém a elektrochemickém rozpouštění.

Rovnováhy chemických polutantů v životním prostředí

1. Chemické rovnováhy: definice, Guldbergův-Waageův zákon a rovnovážná konstanta, rovnovážný elektroodový potenciál, termodynamické interpretace.
2. Rovnováhy acido-bazické, komplexotvorné, srážecí, oxidačně-redukční a další.
3. Vliv vedlejších rovnováh na stabilitu komplexů, podmíněné konstanty stability.
4. Distribuční diagramy protolytických a komplexotvorných reakcí, diagram E-pH.
5. Mezifázové rovnováhy (adsorpční, absorpční, součin rozpustnosti, Nernstův rozdělovací zákon). Adsorpční izotermy – měření a interpretace.
6. Vybrané rovnovážné systémy v přírodě – uhličitanový systém apod.
7. Postup při řešení soustav rovnováh.

Elektrochemie

1. Klasická teorie elektrolytů.
2. Vodivost elektrolytů, převodová čísla.
3. Obecná teorie kyselin a zásad (Brønstedova a Lewisova teorie).
4. Elektrody a elektroodový potenciál.
5. Elektrická dvojvrstva na rozhraní kov/elektrolyt.
6. Galvanické články.
7. Závislost rychlosti reakce přenosu náboje na elektroodovém potenciálu (Tafelova rovnice).
8. Transportní procesy a elektroodový děj – stacionární děje, rotující disková elektroda.
9. Transportní procesy a elektroodový děj – nestacionární děje, případ rovinné elektrody s lineárně rostoucím potenciálem.

Zpracoval: prof. Ing. Pavel Janoš, CSc.

Schváleno oborovou radou: 12. 4. 2017