

## Doktorské studium

# Environmentální analytická chemie

Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem, Fakulta životního prostředí

Doktorské studium v oboru **Environmentální analytická chemie** je uskutečňováno na Fakultě životního prostředí Univerzity Jana Evangelisty Purkyně (UJEP) v Ústí nad Labem a v Ústavu anorganické chemie AVČR, v.v.i. v Řeži na základě společné akreditace uvedeného oboru.

Studenti jsou přijímáni ke studiu na Fakultě životního prostředí UJEP, studium se řídí interními předpisy univerzity. Denní studium je čtyřleté, je možná i kombinovaná forma studia. Školícími pracovišti doktorandů jsou Fakulta životního prostředí UJEP nebo Ústav anorganické chemie v Řeži. Na výuce se podílí též Přírodovědecká fakulta UJEP a řada odborníků z jiných vysokých škol a ústavů AV.

Přijímací řízení bylo vyhlášeno v lednu 2013 s předpokládaným začátkem studia od akademického roku 2013/2014, termín podání přihlášek je do 15. 5. 2013, termín přijímací zkoušky je 20. 6. 2013. Blíže viz **Podmínky přijímacího řízení** (<http://fzp.ujep.cz/>).

Studium je zaměřeno na prohloubení znalostí analytické chemie, moderních analytických metod a řešení vybraných problémů chemie životního prostředí s využitím metod analytické chemie. Součástí přijímacího pohovoru je kromě ověření znalostí z analytické chemie, chemie životního prostředí a jazykových znalostí především odborná rozprava nad možným zaměřením disertační práce uchazeče o studium. Vyhlášena témata disertačních prací jsou uvedena v příloze. Vyloučena není ani možnost stanovit téma disertační práce podle vlastního návrhu uchazeče. V každém případě je doporučováno kontaktovat uvažovaného školitele práce a konzultovat s ním teze práce. Školitelé uvítají návštěvu budoucích doktorandů na svých pracovištích!

Podrobné informace o studiu poskytne **doc. Ing. Pavel Janoš, CSc.**, proděkan pro vědu Fakulty životního prostředí UJEP a předseda oborové rady. Informace o tématech disertačních prací poskytnou jednotliví školitelé.

### Kontakt:

doc. Ing. Pavel Janoš, CSc.,

Fakulta životního prostředí, Univerzita J. E. Purkyně, Králova výšina 3132/7,  
400 96 Ústí nad Labem, tel.: +420 475 284 148, e-mail: [pavel.janos@ujep.cz](mailto:pavel.janos@ujep.cz)

## Témata disertačních prací v oboru **Environmentální analytická chemie**

### **Stanovení organických polutantů ve složitých matricích pomocí chromatografických metod ve spojení se spektrálními technikami**

Školitel: Dr. Ing. Pavel Kuráň, FŽP UJEP.

Tel.: 475 309 256, e-mail: [pavel.kuran@vuanch.cz](mailto:pavel.kuran@vuanch.cz)

V tomto okruhu je možné vypsát více prací, které se budou lišit zaměřením na různý typ sledovaných analytů a zvláště pak na různý typ matric. Společným rysem bude využití chromatografických technik ve spojení se spektrálními metodami (GC-MS, HPLC-MS, HPLC-DAD, aj.), přičemž důležitou součástí výzkumu bude vývoj metod úpravy vzorků před vlastní analýzou (separace, prekoncentrace, derivatizace aj.). Předpokládá se zaměření prací do dvou oblastí. První oblastí je analýza složitých průmyslových efluentů, druhou oblastí je charakterizace půd resp. půdní biomasy a mikroflory nepřímými chemickými postupy s využitím chromatografického stanovení vhodných typů sloučenin, např. fosfolipidů. Zaměření práce je možné upřesnit po konzultaci se školitelem. Ve všech případech bude součástí práce vývoj a validace analytických metod, určení jejich výkonnostních charakteristik, případně výhod a omezení ve srovnání s alternativními postupy.

### **Využití pokročilých analytických postupů pro sledování průběhu bioremediačních zásahů**

Školitelé: Dr. Ing. Pavel Kuráň, FŽP UJEP, tel. 475 309 256, e-mail: [pavel.kuran@vuanch.cz](mailto:pavel.kuran@vuanch.cz)

Ing. Josef Trögl, Ph.D., FŽP UJEP, tel. 475 284 151, e-mail: [josef.trogl@ujep.cz](mailto:josef.trogl@ujep.cz)

Práce bude zaměřena na využití pokročilých analytických postupů (chromatografie, NEETs – non-exhaustive extraction techniques apod.) pro sledování, hodnocení a predikci bioremediačních zásahů. Hlavním směrem výzkumu bude studium extrakčních technik (sekvenční extrakce, NEETs) vhodných pro odhad biologicky dostupného podílu polutantů v půdě, porovnání se skutečným průběhem bioremediací a predikce výsledků bioremediačních zásahů. Druhým směrem výzkumu bude výběr a stanovení vhodných chemických biomarkerů umožňujících odhadnout kvantitu, fyziologický stav a zastoupení jednotlivých skupin půdních mikroorganismů (esterově i neesterově vázané fosfolipidové mastné kyseliny, membránové steroly apod.). Součástí experimentálních prací bude i optimalizace a validace postupů na půdách s vysokým komplexním znečištěním.

### **Kompozitní materiály s grafenem pro rozklad organických polutantů**

Školitel: Mgr. Václav Štengl, Ph.D., ÚACH AVČR, v.v.i., Rež

Tel.: 266 173 193, email: [stengl@iic.cas.cz](mailto:stengl@iic.cas.cz)

Práce navazuje na předchozí systematické studium oxidů Ti, Fe a Mn dopovaných dalším prvky pro 1) stechiometrickou degradaci rozpuštěných organických polutantů (sorpci a hydrolýzu), 2) fotokatalytickou degradaci plynných a rozpuštěných polutantů (fotochemický rozklad). Další vývoj těchto materiálů bude zahrnovat přípravu jejich kompozitů s grafenem, tj. zcela delaminovaným grafitem - vrstvou složenou z dvojrozměrné sítě atomů uhlíku. Grafen v kompozitech bude sloužit jako templát (šablona) pro vylučování nanočástic oxidů kovů, který zajistí jejich pevné prostorové svázání bez ztráty účinného povrchu agregací a zrychlí sorpci polutantů z plynného nebo kapalného prostředí. Grafen se bude připravovat postupem vyvinutým v posledních letech ve spolupráci NANOGIES, s.r.o. a ÚACH AV ČR, v.v.i., tedy na pracovišti školitele. Testování materiálů bude zahrnovat studium kinetiky sorpce nebo degradace polutantů na kompozitech a analýzu jejich mechanismu. Práce bude probíhat v rámci běžících i nových projektů základního i aplikovaného výzkumu, řešených společně ÚACH a UJEP. Jejich cílem bude vyvinout a optimalizovat materiály vhodné k sanaci znečištění prostředí organickými polutanty.

## **Fotoelektrochemické senzory pro sledování kvality životního prostředí**

Školitelé: Doc. Dr. Ing. Petr Klusoň a Doc. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP, tel.: 220 390 204, e-mail: [kluson@icpf.cas.cz](mailto:kluson@icpf.cas.cz) (P. Klusoň), 475 284 148, [pavel.janos@ujep.cz](mailto:pavel.janos@ujep.cz) (P. Janoš)

Toto téma doktorské disertační práce je zaměřeno na návrh a vývoj speciálních typů světlo-aktivních senzorů, které mohou být využity pro sledování výskytu i koncentrace řady významných polutantů životního prostředí. Senzory jsou založeny na fotoaktivních nanočásticích kovových oxidů a řady dalších příměsí, které nabývají konečné podoby velmi tenké transparentní vrstvy. Ta je při interakci s fotony odpovídající vlnové délky aktivována. Tak dochází ke generaci fotoindukovaného proudu (fotoproudu). Jeho velikost i charakter odezvy pak mohou být kalibrovány na určitý charakteristický typ elektrolytu – polutantu. Jde o téma spojující materiálové inženýrství, fyzikální chemii, analytickou chemii a chemii životního prostředí. Práce bude probíhat na nejmodernějších elektrochemických a analytických zařízeních, často ojedinělých v podmínkách ČR. Očekává se úzká kooperace s pracovišti AV ČR i dalšími VŠ v ČR i zahraničí.

## **Rozlišení zdrojů a mechanismů transportu kontaminantů do nivy řeky Jizery**

Školitel: RNDr. Tomáš Matys Grygar, CSc., ÚACH AVČR, v.v.i.  
Tel.: 266 17 31 13, e-mail: [grygar@iic.cas.cz](mailto:grygar@iic.cas.cz)

Řeka Jizera protéká na svém středním a dolním toku několika městy s místním průmyslem, produkcí komunálních odpadů a popílků ze spalovacích procesů. Z těchto měst je nejvýznamnější Mladá Boleslav s dlouholetou výrobou akumulátorů a automobilů. Tato města jsou zdroji kontaminace Cr, Cu, Ni, Pb a Zn, která se do nivy transportuje hlavně vodním tokem. Podél nivy Ploučnice vede významná silnice E65 (rychlostní komunikace R10), tedy další místní zdroj kontaminace Pb (v době používání olovnatého benzínu) šířené vzduchem. K obsahu rizikových prvků v půdách v každé moderní krajině navíc přispívá velkoplošné využívání hnojiv a agrochemikálií, které jsou zdrojem Cu a Zn. K rozlišení vlivu těchto zdrojů kontaminace je třeba využít modelů terénu s využitím dostupných nástrojů GIS, informací o ploše nivy zaplavované při povodních a informací o změnách polohy koryta podle historických map na pracovištích UJEP, které poslouží pro výběr místa odběru vzorků sedimentů. Odběrová místa musejí zahrnovat zaplavované území v nivě řeky i starší, dnes už nezaplavované říční terasy, a to jak blízké tak i vzdálené od zmíněné rychlostní komunikace R10 i od dalších bodových zdrojů kontaminace. Tyto vzorky se pak budou analyzovat na obsah rizikových prvků (hlavně Cr, Cu, Ni, Pb a Zn) v laboratořích ÚACH v Řeži. Cílem práce bude zdokonalení popisu lidských činností, které přispívají ke zvýšeným obsahům rizikových prvků v povrchových vrstvách půd i rozpoznání přírodních (pedogenních procesů), které antropogenní činnosti maskují.

### *Literatura*

1. B. Bølviken, J. Bogen, M. Jartun, M. Langedal, R.T. Ottesen, T. Volden, Overbank sediments: A natural bed blending sampling medium for large-scale geochemical mapping, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 74 (1), 183-199 (2004)
2. T. Matys Grygar, J. Sedláček, O. Bábek, L. Strnad, M. Mihaljevič, Regional contamination of Moravia (south-eastern Czech Republic): Temporal shift of Pb and Zn loading in fluvial sediments, *Water, Air, & Soil Pollution* 223 (2), 739-753 (2012)

## **Kontaminace nivy řeky Ploučnice v důsledku těžby uranu ve Stráži pod Ralskem**

Školitel: RNDr. Tomáš Matys Grygar, CSc., ÚACH AVČR, v.v.i.  
Tel.: 266 17 31 13, e-mail: [grygar@iic.cas.cz](mailto:grygar@iic.cas.cz)

Na konci 60. let byla zahájena v oblasti Stráže pod Ralskem těžba uranu podzemním loužením kovoносných vrstev silně kyselými roztoky. Celkem se přitom spotřebovaly 4 milióny tun kyseliny sírové a skoro 1 milión tun dalších kyselin. Z výluhu se dosud získává uran, ostatní vyloužené kovy se

odstraňují krystalizací a dále neutralizací vápnem. Důsledkem jsou velké plochy odvalů a rekultivovaných i dodnes aktivních odkališť v oblasti Stráže pod Ralskem. Nevyhnutelným následkem těchto aktivit je kontaminace nivy Ploučnice uranem,  $^{226}\text{Ra}$ , rizikovými prvky jako jsou Co, Ni, Zn a některé další. Plošné rozložení kontaminantů v nivě se začalo zjišťovat a zveřejňovat až v 90. letech, ale tyto studie se většinou omezily na věcný popis povrchové radioaktivity a identifikaci bodových anomálií. Dodnes chybí popis mechanismu distribuce a stability kontaminantů v celé nivě. Niva má navíc velmi pestrou strukturu a na území mezi Mimoní a Českou Lípou se vyvíjí takřka přirozeně, s významným bočním pohybem koryta i jeho překládáním, což má za následek také významné erozní a redepoziční procesy. Práce bude vyžadovat škálu postupů od geomorfologické studie (sestavení digitálních modelů terénu) a vyhodnocení historických a současných map (na UJEP) po vzorkování nivní výplně ručními vrtáky a laboratorní analýzy odebraných vzorků (v ÚACH). Výsledkem bude nejen případová studie nivy Ploučnice s vymezením prostředí s nejvyšší kontaminací, ale i zdokonalení poznatků o distribuci kontaminantů v nivách meandrujících řek. Tyto poznatky přispějí k metodice hodnocení rizik spojených s revitalizací řek, v jejichž povodí jsou významné historické environmentální zátěže.

#### Literatura

1. M.G. Macklin, P.A. Brewer, K.A. Hudson-Edwards, G. Bird, T.J. Coulthard, I.A. Dennis, P.J. Lechler, J.R. Miller, J.F. Turner, A geomorphological approach to the management of rivers contaminated by metal mining, *Geomorphology* 79 (3-4), 423-447 (2006)
2. T. Matys Grygar, Co zaznamenal sedimentární archiv ve Strážnickém Pomoraví, *Vesmír* 90, 708-711, 2011/12
3. T. Matys Grygar, J. Sedláček, O. Bábek, L. Strnad, M. Mihaljevič, Regional contamination of Moravia (south-eastern Czech Republic): Temporal shift of Pb and Zn loading in fluvial sediments, *Water, Air, & Soil Pollution* 223 (2), 739-753 (2012)

### **Stechiometrická degradace simulantů organofosfátových pesticidů**

**Školitel:** Mgr. Václav Štengl, Ph.D., ÚACH AVČR, v.v.i., Řež

Tel.: 266 173 193, email: [stengl@iic.cas.cz](mailto:stengl@iic.cas.cz)

Projekt je zaměřen na vývoj a optimalizaci metod k dekontaminaci velkých ploch zamořených organickými polutanty, především organofosfáty a halogenovanými a sulfidickými organickými látkami včetně vývoje analytických metod potřebných jak pro charakterizaci dekontaminačních činidel, tak zejména pro sledování mechanismů a účinnosti degradace. Práce bude zahrnovat přípravu kompozitů grafenu a nanodispersních směsných oxidů Ti, Fe a Zr, případně dalších reaktivních sorbentů. Připravené kompozity budou charakterizovány RTG práškovou difrakcí, měrným povrchem a porozitou, infračervenou a Ramanovou spektroskopií. Jedním z hlavních cílů studia bude popis kinetiky a mechanismu rozkladu modelových sloučenin na těchto připravených kompozitech. Degradace polutantů probíhá chemisorpcí a hydrolýzou na povrchu sorbentů katalyzovanou povrchovými funkčními skupinami. Kinetika stechiometrického rozkladu bude zjištěna pomocí difúzní IČ spektroskopie (ÚACH) a chromatografie (UJEP), mechanismus bude sledován hlavně pomocí chromatografie (UJEP) a Ramanovy a infračervené spektroskopie (ÚACH). Jako modelová látka bude použit trimethylester nebo triethylester kyseliny fosforečné, později s dalšími simulanty organických polutantů. Práce bude součástí evropského projektu koordinovaného Universitou Carlose III v Madridu ve Španělsku.

*Projektová podpora: COUNTERFOG - 2013-2015 Device for large scale fog decontamination*

#### Literatura:

1. V. Štengl, Nanočástice rozkládají bojové otravné látky, *Vesmír* 5/2009
2. V. Štengl, V. Houšková, S. Bakardžieva, N. Murafa, M. Maříková, F. Opluštil, T. Němec, Zirconium doped nano-dispersed oxides of Fe, Al and Zn for destruction of warfare agents, *Materials Characterization*, 61 (2010) 1080-1088.

3. V. Štengl, J. Bludská, F. Opluštil, T. Němec, Mesoporous titanium-manganese dioxide for sulphur mustard and soman decontamination, *Materials Research Bulletin*, 46 (2011) 2050-2056.
4. V. Štengl, T. Matys Grygar, F. Opluštil, T. Němec, Sulphur mustard degradation on zirconium doped Ti-Fe oxides, *Journal of Hazardous Materials*, 192 (2011) 1491-1504.
5. V. Štengl, T. Matys Grygar, F. Opluštil, T. Němec, Ge<sup>4+</sup> doped TiO<sub>2</sub> for stoichiometric degradation of warfare agents, *Journal of Hazardous Materials*, 227-228 (2012) 62-67.

### **Anorganické analogy grafenu a jejich kompozity**

Školitel: Mgr. Václav Štengl, Ph.D., ÚACH AVČR, v.v.i., Řež

Tel.: 266 173 193, email: [stengl@iic.cas.cz](mailto:stengl@iic.cas.cz)

Příprava a charakterizace materiálů a jejich kompozitů na bázi anorganických analogů grafenu. Anorganické analogy jsou přírodní minerály (spekularit Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, molybdenit MoS<sub>2</sub>, tungstenit WS<sub>2</sub>) s lístečkovitou strukturou, které lze delaminovat jako grafit na grafen a nebo syntetické materiály (BN, C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, CBN) na řádově atomárně tenké částice s obrovským reaktivním povrchem. Materiály budou připravovány hlavně delaminací ve výkonovém ultrazvukovém reaktoru, který je k dispozici v ÚACH v Řeži. Charakterizace připravených vzorků se bude provádět hlavně RTG práškovou difrakcí, měrným povrchem a porózitou, infračervenou a Ramanovou spektroskopií a AFM mikroskopií. Jejich materiálové vlastnosti se budou sledovat na kinetických aparaturách na ÚACH a v laboratorních experimentech na ÚACH a UJEP. Cílem práce bude připravit nové sorbenty, zejména reaktivní sorbenty pro zneškodňování environmentálních zátěží i koncentrovaných toxických odpadů.

#### *Literatura:*

1. V. Štengl, Preparation of Graphene by Using an Intense Cavitation Field in a Pressurized Ultrasonic Reactor, *Chemistry – A European Journal*, 18 (2012) 14047-14054.
2. V. Štengl, D. Popelková, P. Vlášil, TiO<sub>2</sub>-Graphene Nanocomposite as High Performance Photocatalysts, *The Journal of Physical Chemistry C*, 115 (2011) 25209-25218.
3. C.N.R. Rao, A. Nag, Inorganic Analogues of Graphene, *European Journal of Inorganic Chemistry*, (2010) 4244-4250.

### **Rozdělení (speciace) sirných sloučenin v generátorovém plynu a možnosti minimalizace jejich koncentrací**

Školitelé: doc. Ing. Karel Svoboda, CSc., ÚCHP AVČR, v.v.i., Praha a doc. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP,

Tel.: 220 390 241, e-mail: [svoboda@icpf.cas.cz](mailto:svoboda@icpf.cas.cz) (K. Svoboda), 475 284 148, [pavel.janos@ujep.cz](mailto:pavel.janos@ujep.cz) (P. Janoš)

Čistota generátorového plynu ze zplyňování uhlí, biomasy a odpadů hraje důležitou roli při využití tohoto plynu pro výrobu kapalných paliv a v energetických aplikacích. Nízký obsah sirných sloučenin je základním předpokladem u katalytických procesů a při využití generátorového plynu ve vysokoteplotních palivových článcích s pevným elektrolytem (SOFC) k přímé výrobě elektrické energie s vysokou účinností. Práce bude mít čtyři hlavní cíle:

1. Vyvinutí spolehlivého vhodného způsobu odběru vzorků plynu s minimem interferencí pro analýzy sirných sloučenin v generátorovém plynu.
2. Stanovení celkové koncentrace síry a sirných sloučenin v generátorovém plynu při středních i nízkých koncentracích síry v plynu.
3. Určení vlivů typu tuhého paliva (vybraná biomasa, uhlí, odpady) a podmínek zplyňování na celkový obsah síry, rozdělení sirných sloučenin a na minimalizaci tvorby COS a organických sloučenin síry.
4. Navržení vhodných podmínek zplyňování a vhodné metody odstraňování nízkých koncentrací sloučenin síry z generátorového plynu.