

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.

Aktuální přijímací řízení bylo vyhlášeno v lednu 2014 s předpokládaným začátkem studia od akademického roku 2014/2015, termín podání přihlášek je do **15. 5. 2014**, termín přijímací zkoušky je **19. 6. 2014**. Další informace jsou v dokumentu 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.

Informace o studiu poskytne některý člen oborové rady, například T. Matys Grygar (266173113, [grygar@iic.cas.cz](mailto:grygar@iic.cas.cz)) nebo P. Janoš ([pavel.janos@ujep.cz](mailto:pavel.janos@ujep.cz)). Školitelem může být vědeckopedagogický pracovník FŽP UJEP nebo vědecký pracovník ÚACh. Téma práce je možné dohodnout s možným školitelem (po konzultaci s členem oborové rady) nebo jej lze vybrat z existujícího seznamu (dále v tomto dokumentu). V každém případě je nutné kontaktovat uvažovaného školitele práce, diskutovat s ním teze práce a vybrat konzultanta práce ještě před podáním přihlášky ke studiu. Školitelé vyžadují návštěvu budoucích doktorandů na svých pracovištích.

### **Možní školitelé z UJEP pro zahájení studia v roce 2014/2015**

Ing. S. Kříženecká, Ph.D., [sylvie.krizenecka@ujep.cz](mailto:sylvie.krizenecka@ujep.cz)

Dr. Ing. Pavel Kuráň, Ph.D., [pavel.kuran@ujep.cz](mailto:pavel.kuran@ujep.cz)

doc. Ing. T. Loučka, CSc., [tomas.loucka@ujep.cz](mailto:tomas.loucka@ujep.cz)

Ing. J. Trögl, Ph.D., [josef.trogl@ujep.cz](mailto:josef.trogl@ujep.cz)

### **Možní školitelé z ÚACh AV ČR pro zahájení studia v roce 2014/2015**

Mgr. V. Štengl, Ph.D., e-mail: [stengl@iic.cas.cz](mailto:stengl@iic.cas.cz)

RNDr. T. Matys Grygar, CSc., e-mail: grygar@iic.cas.cz

Další školitelé z pracovišť FŽP UJEP a ÚACH mohou být navrženi k projednání oborovou radou doktorského studia.

## **Seznam témat navržených pro rok 2014-2015**

### **Studium kinetiky a mechanismu rozkladu organických polutantů na fotoaktivních materiálech a reaktivních sorbentech**

Školitel: Mgr. V. Štengl, Ph.D., ÚACH AVČR, v.v.i., Řež, tel.: 266 172 202, e-mail: stengl@iic.cas.cz

Práce bude zaměřena na detailní studium interakce a následných rozkladných reakcí vybraných organických polutantů na materiálech s aktivním povrchem (stechiometrické degradace) nebo na fotoaktivních materiálech (fotochemické degradace). Mezi takové materiály patří směsné dopované oxidy a hydroxidy Ti, Zn, Fe, a Mn a jejich kompozity s grafenem a jeho anorganickými analogy. Adsorpci polutantu na povrch materiálu a následné rozkladné produkty lze téměř v reálném čase sledovat pomocí tzv. *in-situ operando* FTIR (infračervená spektroskopie). Pro studium povrchu nebo identifikaci rozkladných produktů budou využity také další spektrální metody (Ramanova a UV-Vis spektroskopie), elektronová mikroskopie (SEM, HRTEM), fotoelektronová spektroskopie (XPS), atd. Práce bude probíhat v rámci běžících i nových projektů základního i aplikovaného výzkumu, řešených společně ÚACH a UJEP.

### **Studium kinetiky a mechanismu degradace organických polutantů pomocí reaktivních sorbentů**

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

Tel.: 475 309 256, e-mail: pavel.kuran@ujep.cz

doc. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP

Tel. 475 284 148, e-mail: pavel.janos@ujep.cz

Reaktivní sorbenty představují slibnou a ekonomickou variantu dekontaminace lokalit po ekologických haváriích nebo teroristických útocích, kdy se do životního prostředí mohou dostat pesticidy a bojové otravné látky na bázi organofosfátů. Z tohoto hlediska je příprava, charakterizace a testování degradační účinnosti nových reaktivních sorbentů pořád aktuální. Práce bude v úvodní části zaměřena na přípravu reaktivních sorbentů na bázi oxidu ceričitého a jeho směsí s jinými kovy nebo oxidy kovů, přičemž stěžejním tématem bude studium kinetiky a mechanismu degradace vybraného modelového pesticidu simulujícího bojovou otravnou látku nebo jiného organického polutantu. K těmto účelům se budou využívat moderní chromatografické techniky ve spojení se spektrálními metodami (GC-MS, HPLC-MS, HPLC-DAD). Práce bude součástí aktuálních projektů řešených na FŽP UJEP.

### **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@ujep.cz

doc. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP

Tel. 475 284 148, e-mail: pavel.janos@ujep.cz

Při mapování rozsahu kontaminace organickými polutanty nebo sledování vlivu zásahů směřujících k jejich odstranění ze životního prostředí je zásadním předpokladem úspěšné monitorování pomocí spolehlivé analytické metodiky. Z hlediska potřeb aktuálně řešených projektů bude u tohoto tématu stěžejní vývoj a validace analytických metod na stanovení požadovaných polutantů, určení jejich výkonnostních charakteristik, případně výhod a omezení ve srovnání s alternativními postupy. S ohledem na rozmanitost organických polutantů je možné v tomto okruhu 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.). Zaměření práce je možné upřesnit po konzultaci se školitelem. Práce bude součástí aktuálních projektů řešených na FŽP UJEP.

### **Chemické analýzy jako nástroj sledování bioremediačních zásahů**

Vedoucí práce: Ing. Josef Trögl, Ph.D. FŽP UJEP

Konzultanti: Dr. Ing. Pavel Kuráň, Ph.D. FŽP UJEP, Ing. Sylvie Kříženecká, Ph.D. FŽP UJEP

Téma je zaměřeno na využití pokročilých analytických postupů (chromatografické postupy, 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 souvisejícím 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.).

### **Detekce dostupnosti a toxicity polutantů**

Vedoucí práce: Ing. Josef Trögl, Ph.D. FŽP UJEP

Konzultanti: Dr. Ing. Pavel Kuráň, Ph.D. FŽP UJEP, Ing. Sylvie Kříženecká, Ph.D. FŽP UJEP, Ing. Gabriel Kuncová, CSc. ÚCHP AV ČR, RNDr. Tomáš Matys Grygar, CSc.

Téma je zaměřeno na kombinaci klasických postupů analytické chemie (chromatografie apod.) s bioanalytickými postupy využívající živých geneticky modifikovaných mikroorganismů – bioreportérů. Dnes je k dispozici řada bioreportérových bakterií i kvasinek, které více či méně selektivně reagují na přítomnost nejrůznějších polutantů (aromatické uhlovodíky, endokrinní disruptory, těžké kovy apod.) snadno detekovatelnou expresí reportérových genů pro luminiscenci nebo fluorescenci. Odpověď bioreportéru se ale omezuje jen na biologicky dostupný podíl polutantu resp. na polutanty mající specifický účinek (genotoxicita, endokrinní disrupce apod.).

Vlastní práce bude orientována zejména na látky vykazující estrogenní nebo androgenní aktivitu. Bude porovnáváno stanovení těchto látek ve vodě a sedimentech pomocí extrakčních postupů s chromatografickou koncovkou (LC-MS) a pomocí assay využívajících specifických bioreportérů. Po

optimalizaci analytických postupů bude práce orientována buď na sledování distribuce těchto látek v heterogenních systémech nebo na sledování jejich degradačních produktů v průběhu inovativních procesů čištění odpadních vod.

### **Vývoj metodiky hodnocení míry znečištění říčních sedimentů**

Školitel: RNDr. T. Matys Grygar, CSc., ÚACH AVČR, v.v.i., e-mail: grygar@iic.cas.cz , nebo

Ing. Sylvie Kříženecká, Ph.D., FŽP UJEP, e-mail: sylvie.krizenecka@ujep.cz

Konzultant: Ing. J. Elznicová, Ph.D., FŽP UJEP, e-mail: jitka.elznicova@ujep.cz

Míra znečištění rizikovými prvky (např. těžkými kovy) i organickými polutanty (např. polyaromatickými uhlovodíky a pesticidy) se dnes nejčastěji posuzuje velmi formálně mechanickým srovnáním naměřených koncentrací s hodnotami tabelovanými pro jistý daný typ materiálu (sediment, půda, materiál manipulovaný při úpravě vodních toků) v normách a předpisech. Alternativou tohoto přístupu je věcné zjištění, jakou část koncentrace polutantu lze přisoudit antropogennímu vlivu a jaká je obsahem přirozeným pro daný typ (litologii) sedimentů v dané oblasti (pro místní geologii/geochemii) nebo jaká kombinace polutantů dokazuje, že zkoumaný materiál byl znečištěn. Tento alternativní přístup, výpočet faktoru nabohacení a relativní poměry polutantů je vyvíjen s cílem jednak vytvořit strategii odběru vzorků říčních sedimentů, jednak navrhnout, jak posoudit míru antropogenního znečištění, obojí v návaznosti na moderní vědecké poznatky o různorodosti říčních systémů.

### **Analýza kontaminace řeky Ploučnice v souvislosti s těžbou uranu v oblasti Stráže pod Ralskem**

Školitel: RNDr. T. Matys Grygar, CSc., ÚACH AVČR, v.v.i., e-mail: grygar@iic.cas.cz

Konzultant: Ing. J. Elznicová, FŽP UJEP, e-mail: jitka.elznicova@ujep.cz

V rozmezí mezi začátkem 70. let a rokem 1989 docházelo k uvolňování některých rizikových prvků (Co, Ni, <sup>226</sup>Ra, U, Zn) do říčního systému Ploučnice. Řeka uložila část tohoto znečištění do povodňových sedimentů, což umožňuje podrobně studovat průběh šíření znečištění v minulosti a posoudit jeho stabilitu v nivě v nejbližší budoucnosti. Práce bude zahrnovat terénní odběry vzorků sedimentů, zpracování dat o morfologii nivy v GIS, analýzy sedimentů, např. rtg fluorescenční spektroskopii a chemickými analytickými metodami, a vyhodnocení dat. Cílem bude tedy mapovat (dokumentovat) současný stav a popsat konkrétní dopady dřívější těžby uranu na říční systém Ploučnice. Tento typ studií je důležitý i pro plánované revitalizace řek s historickým znečištěním, s nimiž se budeme v budoucnu stále častěji setkávat.

### **Využití nástrojů GIS při hodnocení rozložení anorganických polutantů v krajině**

Školitel: RNDr. T. Matys Grygar, CSc., ÚACH AVČR, v.v.i., e-mail: grygar@iic.cas.cz

Konzultant: Ing. J. Elznicová, Ph.D., FŽP UJEP, e-mail: jitka.elznicova@ujep.cz

Analýza chemického znečištění půd rizikovými prvky vyžaduje nejen použití nástrojů chemické analýzy, ale i znalost geomorfologie krajiny. Zjištění původu historického znečištění půd olovem vyžaduje odlišení regionálního atmosférického spadu (např. z využití olovnatého benzínu ve druhé polovině 20. století), vysloveně místních bodových zdrojů (v těsném okolí místních průmyslových

podniků) a přirozené geochemické proměnlivosti povrchu. Tato práce se neobejde bez invenčního využití geoinformatiky. GIS umožňuje jednak vizualizaci rozložení polutantů do specializovaných map, jednak rekonstrukci minulého vývoje krajiny a tedy pochopení drah pohybu polutantů v prostředí v minulost i předpověď situace budoucnosti. Práce bude zahrnovat fyzikální a chemickou analýzu polutantů (ÚACH) a především kreativní práci s GIS (UJEP).

Zpracoval: RNDr. Tomáš Matys Grygar, CSc.

V Ústí nad Labem, 15. 1. 2014