

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.

Druhé kolo přijímacího řízení bylo vyhlášeno v červnu 2011 s předpokládaným začátkem studia od akademického roku 2011/2012, termín podání přihlášek je do 31. 10. 2011, termín přijímacího řízení je 15. 11. 2011. 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

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

Stanovení organických polutantů ve složitých maticích pomocí chromatografických metod ve spojení se spektrálními technikami

Školitelé: Dr. Ing. Pavel Kuráň, FŽP UJEP a Dr. Vlastimil Dohnal, Ph.D, PŘF UJEP.

Tel.: 475 309 256 (PK), 475 283 386 (VD), e-mail: pavel.kuran@vuanch.cz ;

vlastimil.dohnal@ujep.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 matic. 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 – jako příklad může sloužit sledování nečistot v různých prouděch při výrobě kaprolaktamu. 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 školiteli. Ve všech případech bude součástí práce vývoj a validace analytických metod, určení jejich výkonnostních charakteristik, případně výhod a omezení ve srovnání s alternativními postupy.

Stanovení markerů oxidačního stresu v biologickém materiálu

Školitel: Dr. Vlastimil Dohnal, Ph.D, PŘF UJEP.

Tel.: 475 283 386, e-mail: vlastimil.dohnal@ujep.cz

V živých organismech se po jejich vystavení oxidačnímu stresu objevují specifické látky, které mohou sloužit ke kvantifikaci tohoto jevu. Například při oxidaci lipidů vzniká malondialdehyd jako produkt peroxidace polynenasycených mastných kyselin. Navrhovaná práce je experimentálního charakteru. V prvním kroku by se jednalo o výběr vhodného markeru či více markerů. Následně by byla vyvinuta respektive adaptována a validována metoda pro jejich stanovení pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie s UV nebo hmotnostní detekcí. Poté by byly analyzovány reálné vzorky ve spolupráci s Katedrou toxikologie Univerzitou obrany (doc. Kuča). Výsledky získané během práce budou průběžně zpracovávány a publikovány v odborných časopisech.

Experimentální studium a matematické modelování rovnováh při sorpci na pevných sorbentech

Školitelé: doc. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP a doc. Ing. Josef Šedlbauer, Ph.D., TUL Liberec.

Tel.: 475 284 148 (PJ), 485 353 375 (JŠ), e-mail: pavel.janos@ujep.cz ; josef.sedlbauer@vslib.cz

Adsorpce na pevných sorbentech se využívá jako účinná a ekonomicky výhodná technika k odstraňování různých chemických kontaminantů z vod zejména v těch případech, kdy jde o látky obtížně rozložitelné chemickými postupy. Vzhledem k poměrně vysoké ceně konvenčních sorbentů je věnováno značné úsilí testování alternativních levných sorbentů, zvláště biosorbentů. Cílem práce je experimentální sledování a následné termodynamické modelování vybraných systémů biosorbent-sorbovaná látka-vodná fáze.

Studovány budou kinetické i rovnovážné procesy zahrnující interakce na rozhraní tuhé fáze a vodné fáze, jakož i systémy vedlejších-konkurenčních rovnováh ve vodné fázi (zejména acidobazických a komplexotvorných). Mezi možné studované systémy a procesy patří např. sorpce kationů těžkých kovů na vybraných biosorbentech, kinetika sorpce a identifikace řídicího děje, závislost sorpční rovnováhy na pH a na přítomnosti jiných látek v roztoku. Konkrétní specifikace po dohodě s uchazečem. Předpokladem je schopnost orientace v anglicky psané literatuře a základy programování

ve zvoleném integrovaném programovacím systému, např. Maple nebo Mathematica (bude součástí studijního plánu). Práce navazuje na projekty řešené na katedře technických věd FŽP UJEP – viz <http://fzp.ujep.cz/ktv/>.

Příprava a charakterizace dopovaných fotokatalytických materiálů na bázi TiO₂ na rozklad polutantů

Školitel: Mgr. Václav Štengl, PhD, ÚACH AVČR, v.v.i.

Tel.: 266 17 31 93, e-mail: stengl@iic.cas.cz

TiO₂ je zřejmě nejperspektivnější anorganický materiál umožňující fotokatalytický rozklad organických polutantů. Jeho použití je omezeno nutností aktivace UV zářením. Aby bylo možné aktivovat fotochemické reakce tohoto materiálu viditelným světlem, je třeba modifikovat strukturu a elektronické vlastnosti čistého TiO₂ dopováním dalšími prvky. Toho bude dosaženo použitím syntetických metod vyvíjených školitelem v rámci několika běžících projektů aplikovaného výzkumu poskytovaných Ministerstvem průmyslu a obchodu ČR (www.uach.cz/projekty/). Připravené materiály budou podrobně charakterizovány konvenčními metodami (specifický povrch a poróznost, rtg difrakce, elektronová mikroskopie). Materiály budou testovány pro fotokatalytický rozklad jak modelových sloučenin (Orange 2, rhodamin B, salicylová kyselina), tak vybraných organických polutantů s využitím chemicko-analytických metod.

Příprava a charakterizace oxidů a oxido-hydroxidů přechodných kovů na rozklad polutantů

Školitel: Mgr. Václav Štengl, PhD, ÚACH AVČR, v.v.i.

Tel.: 266 17 31 93, e-mail: stengl@iic.cas.cz

Oxidy a hydroxidy Fe, Ti a Zr jsou velmi účinné sorbenty a katalyzátory rozkladu anorganických polutantů. Jejich zavedení do praxe vyžaduje ekonomicky schůdné a ekologicky šetrné metody přípravy, které vedou k produktům umožňujícím práci v provozním měřítku, např. mají dobrou filtrovatelnost, stabilitu při skládkování. K přípravě těchto materiálů byla školitelem této práce vyvinuta originální metoda homogenní hydrolýzy pomocí močoviny nebo thioacetamidu. K charakterizaci materiálů je pracoviště vybaveno instrumentální technikou, financování práce je zajišťováno projekty aplikovaného výzkumu v rámci podpory průmyslových inovací (www.uach.cz/projekty/). Materiály budou využity ke stechiometrickému rozkladu znečišťujících látek pomocí oxidačních nebo srážecích reakcí. Práce bude kombinovat moderní chemické i analytické přístupy a směřovat k praktické aplikaci.

Studium kinetiky a mechanismu rozkladu plynných polutantů na fotokatalytických materiálech

Školitel: Mgr. Václav Štengl, PhD, ÚACH AVČR, v.v.i.

Tel.: 266 17 31 93, e-mail: stengl@iic.cas.cz

Fotokatalytický rozklad plynných polutantů je princip, který najde uplatnění jak při snižování emisí škodlivin v průmyslu, tak při zlepšování kvality vnitřního prostředí. V rámci práce budou připravovány vrstvy fotokatalytických materiálů pro studium fotokatalytického rozkladu těkavých organických látek (VOC), jako jsou např. aceton a ethanol, pomocí plynové chromatografie s hmotově spektrometrickou detekcí (GC-MS). Jedním z cílů práce bude také popis reakčního mechanismu rozkladu s sledováním případných nebezpečných vedlejších reakčních produktů. Pracoviště školitele je pro tuto práci kompletně vybaveno. Další informace jsou k dispozici na adrese www.uach.cz.

Fotokatalytické vlastnosti tenkých vrstev vybraných kovových oxidů

Školitel: doc. Ing. Petr Kluson, Ph.D., ÚCHP AVČR, v.v.i.

Tel.: 220 390 204, e-mail: kluson@icpf.cas.cz

Tematicky je tato práce zaměřena na vytváření tenkých vrstev vybraných kovových oxidů, především oxidu titaničitého, oxidu ceričitého a oxidu zinečnatého. Tyto materiály mají za určitých podmínek charakter polovodiče, který je schopen tzv. fotoexcitace. Vrstvy mají použití například jako součásti speciálních elektrod pro selektivní sledování kontaminantů v životním prostředí, jako heterogenní fotokatalyzátory, atd. V práci bude jejich aktivita testována především ve vsádkovém reakčním systému osazeném světelnými diodami emitujícími v UV oblasti a s míchadlem, jehož lopatky budou potaženy vrstvami tvořenými uvedenými oxidy. Toto reakční uspořádání by mělo umožnit důkladnou diskuzi kinetiky studovaných reakcí, včetně posouzení vlivu vnitřní a vnější difuze a schopnosti fotokatalyzátoru využít fotonového toku. Reakce budou vedeny jak za standardních podmínek tak také např. v deuterovaných rozpouštědlech. Součástí bude vývoj metod pro hodnocení katalyzátorů a sledování průběhu reakce.

Kontaminace nivních sedimentů těžkými kovy

Školitel: RNDr. Tomáš Matys Grygar, CSc., ÚACH AVČR, v.v.i.

Tel.: 266 17 31 13, e-mail: grygar@iic.cas.cz

Nivy řek, které ukládají při povodních jemné sedimenty, takto vytváří hmotný environmentální archív lokální i regionální kontaminace těžkými kovy, např. Cr, Cu, Pb a Zn. Pokud řeky agradují, tj. pokud s časem systematicky roste mocnost povodňových sedimentů, může tento archív obsahovat informaci o vývoji kontaminace za několik posledních staletí až tisíciletí. Takový je například případ nivy řeky Moravy na Strážnicku (www.iic.cas.cz/~grygar/M_projekt.htm), ale i mnoha dalších českých, např. Jizery, Ploučnice, Lužnice a Ohře. V oblastech, které nebyly ovlivněny těžbou zpracováním rud, se jako hlavní zdroje kontaminace těžkými kovy uplatnily spady popílků (Pb, Zn), imise z chemického průmyslu, využívání antikorozi ochrany ocelí (Cr, Zn), užívání olovnatých automobilových benzínů (Pb) a další. Vývoj kontaminace přírody těmito kovy od doby průmyslové revoluce v českých zemích (od 19. století) nebyl dosud příliš zkoumán, ačkoli její rekonstrukce by měla nejen značný mezioborový vědecký přesah i velmi praktickým významem. Tento archív dosud nebyl náležitě využit, protože říční nivy vyžadují specifické znalosti a techniky, které nejsou v běžném arzenálu současných environmentálních geochemiků, ale zato jsou k dispozici na pracovišti školitele. Ten poskytne více informací na požádání.

Mobilita těžkých kovů v říčních sedimentech

Školitel: RNDr. Tomáš Matys Grygar, CSc., ÚACH AVČR, v.v.i.

Tel.: 266 17 31 13, e-mail: grygar@iic.cas.cz

Povodňové sedimenty, uložené v nivách řek, jsou potenciálním nebezpečím pro životní prostředí z několika důvodů. Při extrémních povodních mohou být starší sedimenty erodovány a redeponovány, ale díky kolísání hladiny spodní vody v nivě se mohou starší kontaminace mobilizovat a opětovně dostávat do říční vody nebo do vegetace rostoucí v nivě dokonce i bez extrémních událostí. V nivách českých řek se – podobně jako mnohde v Evropě – mohou vyskytovat vrstvy kontaminované středověkými i novověkými těžbami a metalurgickými výrobami, do různé míry znečištěné sedimenty se ukládaly i v zemědělských oblastech po celé 20. století. Odsud se těžké kovy dostávají zpět „do oběhu“ bez ohledu na moderní ekologičtější přístupy a opatření. Práce by měla popsat situaci a z ní vyplývající rizika mobilizace těžkých kovů (hlavně Pb a Zn) na vybraných českých řekách, např. Litavce na Příbramsku, Bílině na Teplicku a Berounce na Plzeňsku a Berounsku. Nástroji práce budou terénní odběry vzorků, jejich geochemická analýza a speciace pomocí sekvenčních extrakcí, datování sedimentů pomocí metod ^{14}C , ^{137}Cs a ^{210}Pb .