

Témata disertačních prací v programu **Environmentální chemie a technologie**

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

Fakulta životního prostředí uskutečňuje doktorský studijní program **Environmentální chemie a technologie** se standardní dobou studia 4 roky. Tento studijní program byl akreditován v r. 2019 na dobu 10 let. Studium je uskutečňováno ve spolupráci s Ústavem anorganické chemie AV ČR, v.v.i., podobně, jako dříve uskutečňovaný obor Environmentální analytická chemie. 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 ČR. Studenti jsou přijímáni ke studiu na Fakultě životního prostředí UJEP, studium se řídí interními předpisy univerzity. Disertační práce v uvedeném programu jsou zaměřeny zejména do dvou prioritních oblastí, kterými jsou **environmentální analytická chemie a pokročilé technologie pro ochranu životního prostředí**.

Studium je zaměřeno na prohloubení znalostí analytické chemie, moderních analytických metod a řešení vybraných problémů chemie životního prostředí s využitím metod analytické chemie, jakož i využití pokročilých oxidačních procesů, fotokatalýzy, speciálních a reaktivních sorbentů, vybraných biotechnologických postupů, např. fytoremediace, případně dalších remediačních či recirkulačních technologií.

Studenti jsou přijímáni ke studiu na základě přijímacího řízení, které vyhláší děkan FŽP. 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. Vyhlášená 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 a konzultovat s ním teze práce ještě před podáním přihlášky ke studiu. Školitelé uvítají návštěvu budoucích doktorandů na svých pracovištích!

Podrobné informace o studiu poskytne **prof. Ing. Pavel Janoš, CSc.**, předseda oborové rady doktorského studia. Informace o tématech disertačních prací poskytnou jednotliví školitelé.

Kontakt:

prof. Ing. Pavel Janoš, CSc.,
Fakulta životního prostředí, Univerzita J. E. Purkyně, Purkyňova 3632/15,
400 96 Ústí nad Labem, tel.: +420 475 284 148, 739 335 088,
e-mail: pavel.janos@ujep.cz

Vývoj aplikačních forem reaktivních sorbentů pro rozklad toxických látek

Školitel: Prof. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP

Tel. 475 284 148, 739 335 088, e-mail: pavel.janos@ujep.cz

Konzultant: Ing. Martin Štastný, ÚACH AV ČR

Tel.: 311 236 920, 607 825 404, e-mail: stastny@iic.cas.cz

V uplynulých letech bylo jak na FŽP UJEP, tak v ÚACH Řež vyvinuto několik typů tzv. reaktivních sorbentů na bázi nanostrukturních oxidů kovů. Tyto látky byly úspěšně použity k rozkladu organofosforečných pesticidů a dalších vysoce toxických látek včetně bojových chemických látek (soman, sarin, yperit, VX agent) a jejich simulantů (dimethyl methylfosfonát, 2-chlorethyl ethylsulfid, apod.). Nověji je zkoumáno použití reaktivních sorbentů k rozkladu dalších typů nebezpečných látek, např. cytostatik (doxorubicin, cyklofosamid, platinová cytostatika) či retardérů hoření (trifenylofosfát). Dosavadní testy byly prováděny především s práškovými reaktivními sorbenty převážně v nepolárních, případně aprotických rozpouštědlech (heptan, hexan, acetonitril). Cílem práce je rozšíření aplikačních možností reaktivních sorbentů. K tomuto účelu budou výzkumné práce zaměřeny zejména na následující oblasti:

- Aplikace známých typů reaktivních sorbentů (TiO_2 , CeO_2 , MgO , MnO_2 , aj.) na nové typy polutantů.
- Vývoj nových typů reaktivních sorbentů a modifikace jejich vlastností, např. vývoj kompozitních a dopovaných materiálů, či sorbentů s komplikovanější strukturou (např. kompozity s grafenem a grafen oxidem).
- Studium vlivu prostředí (rozpouštědel) na účinnost rozkladu polutantů, studium vlivu přísadků tenzidů či jiných aditiv, vývoj multifunkčních materiálů.
- Vývoj „smart“ textilií, aktivních ochranných vrstev apod.

Připravené sorbenty budou materiálově charakterizovány ve spolupráci s ÚACH Řež pomocí dostupných metod analýzy pevných látek (rentgenová strukturní analýza, mikroskopické techniky HRSEM, HRTEM, infračervená spektroskopie, apod.).

Pseudo-enzymatické reakce vybraných oxidů kovů

Školitel: Prof. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP

Tel. 475 284 148, 739 335 088, e-mail: pavel.janos@ujep.cz

Konzultant:

Oxidy některých kovů (železa, ceru, aj.) vykazují schopnost katalyzovat biologicky relevantní reakce podobným způsobem, jako konvenční enzymy. Na FŽP UJEP byla zkoumána zejména schopnost oxidu ceričitého rozkládat i poměrně stabilní fosfoesterové vazby v různých organofosforečných sloučeninách počínaje organofosforečnými pesticidy, ATP, ADP a jinými nukleotidy, DNA/RNA, a konče mj. fosfolipidy, tvořícími mj. obálku některých typů virů. Pro nanokrystalické formy oxidů kovů látky se používá název nanozymy. Mají rozsáhlé využití v medicíně či v proteinovém inženýrství. Některým z těchto oxidů je přisuzována významná role při vzniku života na zemi.

Cílem práce bude syntéza aktivních forem oxidů kovů a testování jejich pseudo-enzymatických vlastností, studium chemismu těchto reakcí, a v širším kontextu též antimikrobiálních a antivirálních vlastností nanozymů.

Vysokorozlišovací hmotnostní spektrometrie (HR-MS) a její využití při identifikaci neznámých organických látek v různých matricích životního prostředí a při degračních experimentech.

Školitel:

Doc. Dr. Ing. Pavel Kuráň, FŽP UJEP.

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

Prof. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP

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

Ve světě přibývá několik tisíc nových organických látek ročně. Tyto látky se dostávají v nemalé míře i do životního prostředí, kde mohou podléhat různým přeměnám. S tím také narůstá potřeba identifikace neznámých látek v životním prostředí, aby bylo možné zmapování rozsahu kontaminace organickými polutanty nebo sledování vlivu zásahů směřujících k odstranění organických polutantů v životním prostředí. Z hlediska potřeb aktuálně řešených projektů bude u tohoto tématu stěžejní vypracování měřících metodických postupů a ionizačních technik pro měření přesné hmoty organických látek pro všechny modulární kombinace vysokorozlišovacího MS – „direct infusion“ MS (DI-MS), GC-HR-MS a HPLC-HR-MS.

Pro podporu identifikace neznámých látek se počítá i s využitím běžných chromatografických technik ve spojení se spektrálními metodami (GC-MS, GC-FID, HPLC-DAD, aj.), přičemž 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.

Aplikace bioreportérů při analýze znečištění životního prostředí

Doc. Ing. Josef Trögl, Ph.D., FŽP UJEP

Tel.: 475 284 153, 608 168 848, e-mail: josef.trogl@ujep.cz

Ing. Gabriela Kuncová, CSc., Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i.

Tel.: 220 390 243, e-mail: kuncova@icpf.cas.cz

Bioreportéry jsou geneticky modifikované mikroorganismy, u kterých byly účelově spojeny geny kódující vybranou metabolickou dráhu (např. pro rozklad organických polutantů, rezistenci k těžkým kovům nebo reparaci poškozené DNA) s tzv. reportérovými geny, které kódují produkci snadno měřitelného signálu (bioluminiscence, fluorescence). To umožňuje snadnou detekci příslušné metabolické aktivity (např. biodegradace polutantu) a při znalosti regulačních mechanismů i analytické aplikace. Cílem doktorského projektu bude vývoj bioanalytických aplikací bioreportérů se zaměřením na polutanty v životním prostředí a jejich porovnání s dostupnými instrumentálními metodami v těchto oblastech:

- Detekce biologické dostupnosti organických látek (ropné látky, halogenované uhlovodíky) v půdě pomocí bioreportérů a nevyčerpávajících extrakčních metod (non-exhaustive extraction techniques, NEETs) s chromatografickou koncovkou.
- Vývoj bioassay pro detekci těžkých kovů a jejich toxicity ve vodách.
- Detekce hormonální aktivity vybraných látek a jejich degradačních produktů ve vodách pomocí kvasinkových bioassay a LC-MS.

Chemické analýzy jako nástroj sledování bioremediačních zásahů

Doc. Ing. Josef Trögl, Ph.D., FŽP UJEP

Tel.: 475 284 153, 608 168 848, e-mail: josef.trogl@ujep.cz

Doc. Dr. Ing. Pavel Kuráň, FŽP UJEP.

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

Dr. Ing. Sylvie Kříženecká, Ph.D.

Tel. 475 284 151, e-mail: sylvie.krizenecka@ujep.cz

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.).

Přehradní nádrže jako „reaktory“ degradace organických polutantů

Školitel:

RNDr. T. Matys Grygar, CSc., FŽP UJEP-ÚACH.

Tel.: 266173113, e-mail: grygar@iic.cas.cz

Konzultanti:

Ing. Sylvie Kříženecká, Ph.D., FŽP UJEP

Tel. : 475 284 151, e-mail: sylvie.krizenecka@ujep.cz

Ing. Jitka Elznicová, Ph.D., FŽP UJEP

Tel.: 475 284 136, e-mail: jitka.elznicova@ujep.cz

V přehradních nádržích se zachycují i nejjemnější složky hmot, transportovaných řekami v suspenzi, tj. i koloidní částice včetně organických látek. V přehradách se tedy ukládají i organické polutanty včetně zbytků pesticidů a léčiv (POP), sorbované na koloidních částicích, a to jiných v prostředích a formách, než pro jaké jsou známy rychlosti jejich degradace hlavně hydrolýzou a oxidací. Na přehradním dně se také hromadí oxidy troj- a čtyřmocného Mn a trojmocného Fe, které v sedimentu mohou POP oxidačně rozkládat. Ve vrstvách sedimentu také dochází k četným biogeochemickým procesům, jejichž průběh je závislý na charakteru sedimentů i hydrologických podmínkách v jednotlivých přehradách. Důsledky společného hromadění oxidů Mn a Fe a POP v přehradních sedimentech dosud nebyly sledovány, ale je pravděpodobné, že mohou mít pozitivní dopad na životní prostředí. V této práci by se kombinovaly analýzy vzorků sedimentů z přehradních nádrží i prováděly laboratorní experimenty ke zjištění rychlosti degradace POP za různých podmínek, přibližujících se reálným.

Organokovové sítě pro environmentální aplikace

Školitel: RNDr. Jan Demel, Ph.D., Oddělení materiálové chemie, ÚACH

Tel.: 311236996, e-mail: demel@iic.cas.cz

Konzultanti: Ing. Daniel Bůžek, Ph.D. Fakulta životného prostředí UJEP; Tel. 475284173, email: daniel.buzek@ujep.cz; Ing. Kamil Lang, CSc., DSc. Oddělení materiálové chemie, ÚACH Tel.: 311236900, e-mail: lang@iic.cas.cz

Organokovové sítě (Metal-Organic Frameworks) jsou rychle se rozvíjející obor krystalických materiálů založených na kombinaci kovových klastrů s organickými spojovacími molekulami. Díky dané geometrii jednotlivých stavebních bloků vznikají porézní struktury s povrchem často 1000-2000 m²/g. Široká škála možných kovů a spojovacích molekul dává nepřeborné kombinace, jejichž vlastnosti mohou být ‚ušity na míru‘ dané aplikaci.

Cílem disertační práce bude studium využití organokovových sítí pro environmentální aplikace, především sorpci, rozklad vybraných molekul a studium stability MOFů během sorpce a rozkladů. Jelikož organokovové sítě mají známou krystalovou strukturu, dalším úkolem bude korelovat chemické a texturní vlastnosti sítí s jejich schopností sorpce a rozkladu molekul. V rámci disertační práce se student naučí syntetické postupy při přípravě organokovových sítí, jejich charakterizace (práškový XRD, sorpce N₂, termická analýza apod.) a dále pak HPLC, kterým se bude sledovat sorpce, rozklady a stabilita MOFů. Přibližně polovina práce bude probíhat na FŽP UJEP pod vedením Daniela Bůžka, zbytek pak na ÚACH AV ČR v Řeži.

Nové sorbenty pro uchovávání plynů

Školitel: RNDr. Jan Demel, Ph.D., Oddělení materiálové chemie, ÚACH

Tel.: 311236996, e-mail: demel@iic.cas.cz

Konzultant: Michael Londesborough Ph.D. Oddělení Syntéz, ÚACH

Tel.: 311236953, e-mail: michaell@iic.cas.cz

Uskladnění plynů pomocí sorbentů představuje celou řadu výhod, především pak možnost skladování při nižších tlacích. Účinný sorbent vodíku nebo metanu by umožnil rychlejší rozvoj automobilů s pohonem na tyto plyny, popřípadě přechod na tzv. vodíkové hospodářství kdy by vodík nahradil baterie i v běžných přenosných elektrických zařízeních jako jsou notebooky.

Cílem disertační práce bude příprava nových porézních struktur, jejich detailní charakterizace a použití pro uchování plynů, především vodíku a metanu. Dále budou tyto porézní struktury studovány jako nosiče funkčních skupin nebo jako sorbenty toxických polutantů. V rámci disertace se student naučí systematické práci v laboratoři, vyhodnocování dat z celé řady charakterizačních metod (práškový XRD, sorpce N₂, infračervená spektroskopie, NMR, atd.) a studium použití připravených porézních struktur pro konkrétní aplikace. Většina práce bude probíhat na ÚACH AV ČR v Řeži.

Molekulové klastry pro antimikrobiální povrchy

Školitel: Ing. Kamil Lang, CSc., DSc. Oddělení materiálové chemie, ÚACH

Tel.: 311236900, e-mail: lang@iic.cas.cz

Konzultant: Kaplan Kirakci, PhD., Oddělení materiálové chemie, ÚACH

Tel.: 311236995, e-mail: kaplan@iic.cas.cz

Práce je zaměřena na přípravu modifikovaných kovových klastrů a studium jejich fotofyzikálních vlastností. Jedná se převážně o šestijaderné molybdenové klastry – nanometrové struktury složené z oktaedricky uspořádaných atomů molybdenu a z osmi pevně vázaných atomů jódu, které vytvářejí deformovanou krychli s atomy molybdenu ve středech stran. Na Mo atomy je navázáno dalších šest ligandů, jejichž volbou lze určovat vlastnosti sloučenin. V rámci projektu bude připravena řada nových, doposud nepopsaných sloučenin, které po ozáření světlem vykazují výraznou luminiscenci a produkci excitované formy kyslíku - singletového kyslíku. Singletový kyslík je vysoce reaktivní a inaktivuje mikroorganismy. Tato funkce bude využita k přípravě antimikrobiálních povrchů. Většina prací bude probíhat na pracovišti Ústavu anorganické chemie AV ČR v Řeži.

Kompozitní oxidy kovů v environmentální nanotechnologii

Školitel: Ing. Jiří Henych, Ph.D., ÚACH AV ČR/FŽP UJEP

Tel.: 311 236 921, e-mail: jiri.henych@ujep.cz

Konzultanti:

Prof. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP

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

Ing. Martin Šťastný, Ph.D., ÚACH AV ČR/FŽP UJEP

Tel.: 311 236 920, e-mail: stastny@iic.cas.cz

Předmětem práce je příprava nanokompozitních oxidů zejména přechodných kovů a studium jejich neobyčejných vlastností využitelných v environmentální nanotechnologii. Konkrétně se jedná o přípravu nanostrukturních oxidů TiO_2 , CeO_2 , Cu_2O , CuO , Bi_2O_3 , aj., které jsou schopny velmi účinně vázat nebezpečné polutanty z vod i ovzduší a účinně je rozkládat pomocí unikátních povrchových vlastností nebo při osvitě pomocí fotochemických reakcí. K charakterizaci připravených materiálů jsou k dispozici moderní špičkové analytické přístroje (např. elektronové mikroskopy HRTEM i HRSEM; XRD; Raman mikroskop; FTIR, UV-Vis i jiné spektrometry; TGA/DT; DLS; sorpční analyzátoary; aj.). Kinetika i mechanismus adsorpce a (foto)degradace vybraných polutantů vod (zahrnujících organofosforečné pesticidy, endokrinní disruptory, nebo zbytky léčiv) bude sledována pomocí moderního HPLC přístroje. Studium adsorpce a degradace plyných látek ze skupiny běžných VOC, ale i látky simulují bojové chemické látky typu Sarin, Soman, Novičok, bude probíhat na speciálně konstruovaném *operando* FTIR spektrometru. Většina prací bude probíhat na pracovišti Ústavu anorganické chemie AV ČR v Řeži.

Studium elektrochemické oxidace organických polutantů (zejména pesticidů) na pevných elektrodách nebo elektrodách modifikovaných nanočásticemi

Školitel:

Doc. Ing. Tomáš Loučka, CSc., FŽP UJEP

Tel.: 475 284 151, e-mail: tomas.loucka@ujep.cz

Konzultant:

Ing. Sylvie Kříženecká, Ph.D., FŽP UJEP

Tel.: 475 284 151, e-mail: sylvie.krizenecka@ujep.cz

Práce bude zaměřena na detailní studium adsorpce a elektrochemické oxidace (případně i redukce) organických polutantů, zejména pesticidů, s cílem dosáhnout lepšího pochopení procesů elektrochemické likvidace organických polutantů. Procesy adsorpce a oxidace budou sledovány zejména na Pt, Au, Ag, GCE elektrodách, na elektrodách modifikovaných grafenem, případně i na elektrodách modifikovaných nanočásticemi vzácných kovů. Sledování bude prováděno voltametrickými metodami, měřením impedance elektrod, případně i dalšími metodami. Sledování bude doplněno sledováním vlastností povrchu elektrod spektrálními metodami (Ramanova a UV vis spektrometrie, případně elektronová a fotoelektronová spektroskopie), rovněž i identifikací produktů rozkladu (např. GC-MS).

Optimální technologické parametry pro elektrochemickou likvidaci vybrané odpadní vody

Doc. Ing. Tomáš Loučka, CSc., FŽP UJEP

Tel.: 475 284 151, e-mail: tomas.loucka@ujep.cz

Konzultant:

Ing. Sylvie Kříženecká, Ph.D., FŽP UJEP

Tel.: 475 284 151, e-mail: sylvie.krizenecka@ujep.cz

Práce bude zaměřena na zpracování konkrétní odpadní vody z potravinářského nebo papírenského průmyslu, nebo z jiných průmyslových odpadních vod některými z elektrochemických pokročilých oxidačních procesů (AOPs Advanced Oxidation Processes). Sledovány mohou být i elektrochemické procesy redukční. Cílem bude zjištění optimálních parametrů pro jejich likvidaci z hlediska elektrodových materiálů, fyzikálních podmínek (pH, proudová hustota, proudová a energetická účinnost). Sledování bude prováděno běžnými elektrochemickými metodami (voltametrie, galvanometrické metody, případně i dalšími metodami). Sledování bude doplněno sledováním vlastností povrchu elektrod spektrálními metodami (Ramanova a UV vis spektrometrie, případně elektronová a fotoelektronová spektroskopie), rovněž i identifikací produktů rozkladu (např. GC-MS). Využity budou i metody měření CHSK, BSK i TOC).