

Doktorské studium

Environmentální chemie a technologie

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

Doktorské studium ve studijním programu **Environmentální chemie a technologie** 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 programu. Akreditace byla udělena v r. 2019 na dobu deseti let.

Studenti jsou přijímáni ke studiu na Fakultě životního prostředí UJEP, studium se řídí interními předpisy univerzity. Standardní doba studia je čtyři roky. 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, zejména pak instituce sdružené ve výzkumné infrastruktuře NanoEnviCz (<http://www.nanoenvicz.cz/cs>).

Přijímací řízení bylo vyhlášeno v lednu 2020 s předpokládaným začátkem studia od akademického roku 2020/2021, termín podání přihlášek je do 15. 5. 2020, přijímací zkoušky se uskuteční v červnu 2020 (bude upřesněno).

Blíže viz **Podmínky přijímacího řízení**

(https://www.fzp.ujep.cz/wp-content/uploads/2020/01/Podminky_PR_ak-2020_2021_doktorske.pdf).

Studenti si mohou vybrat ze **dvou specializací**. Ve specializaci **Environmentální analytická chemie** jsou prohlubovány znalosti metod pro identifikaci a stanovení chemických látek v jednotlivých složkách životního prostředí a jsou rozvíjeny sofistikované metody studia osudu chemických látek v životním prostředí s cílem identifikovat, vyhodnotit a omezit rizika spojená s přítomností těchto látek v životním prostředí. Specializace **Pokročilé technologie pro ochranu životního prostředí** rovněž vychází ze znalostí chemie životního prostředí. V rámci studia získávají studenti přehled o metodách zachycování a zneškodňování škodlivých látek ve vodách, ovzduší, půdách, horninovém prostředí či průmyslových efluentech s využitím pokročilých oxidačních a jiných procesů a progresivních sanačních technologií.

Součástí přijímacího pohovoru je kromě ověření znalostí z environmentální a analytické chemie a jazykových znalostí především odborná rozprava nad plánovaným 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 práce 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, Králova výšina 3132/7,

400 96 Ústí nad Labem, tel.: +420 475 284 148, 739 335 088, e-mail:

pavel.janos@ujep.cz

Témata disertačních prací v programu Environmentální chemie a technologie

a) Specializace Environmentální analytická chemie

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.

Znečištění životního prostředí – speciace, biologická dostupnost a odezva bioreportérů

Školitel:

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.,

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

Konzultanti:

Prof. Ing. Miloslav Suchánek, CSc.,

Ing. Sylvie Kříženecká, Ph.D.

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

Spolupráce s E & H services a.s.

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. Většina dosud publikovaných prací však zabývá jen modelovými roztoky, prací testující odezvu v reálných vzorcích ŽP je málo.

Cílem doktorského projektu bude vývoj bioanalytických aplikací bioreportérů se zaměřením na polutanty ve složkách životního 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.
- Vztah mezi odezvou bioreportéru a specií polutantu v reálných vzorcích.
- Detekce hormonální aktivity vybraných látek a jejich degradačních produktů ve vodách pomocí kvasinkových bioassay a LC-MS.
- Zvýšení meze detekce a meze stanovitelnosti bioreportéru s využitím pasivních vzorkovačů.

Chemické analýzy jako nástroj sledování bioremediačních zásahů

Školitel:

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.).

Osudy polutantů v přehradních nádržích

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

Sediment a vodní sloupec nad sedimentem v jezerech a přehradách představují „chemické reaktory“, ve kterých probíhá redoxní cyklus iontů/oxidů Fe a Mn jakož i S a As. Tyto cykly ovlivňují i osudy iontů, které jsou na některé pevné fáze s redoxně citlivými ionty sorbovány. Výsledkem jsou pak pomalé ale dlouhodobé migrace nebo naopak jejich zadržování v sedimentu. Navíc, oxidy Mn a Fe značně urychlují oxidativní odbourávání organických látek včetně polutantů. Tyto jevy nejsou dobře prozkoumané, ačkoli mají velký význam pro stav říčních systémů s přehradami. Práce bude zaměřena hlavně na přehrady na řece Ohři, které zadržují poměrně dosti znečištěný sediment. Bude zahrnovat rešerši, odběr vzorků sedimentů (včetně sedimentárních jader ve spolupráci s Univerzitou v Olomouci) a jejich zpracování a analýzu rtg fluorescenční spektroskopii a chromatografií. Cílem má být posouzení, zda přehrady plní kladnou svou roli v osudu organických polutantů v říčních systémech tím, že v nich dochází k urychlení jejich degradace. Práce by měla být v budoucnu součástí grantového projektu.

Reálná hrozba ohnisek znečištění

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

Tel.: 311236949, e-mail: grygar@iic.cas.cz

Konzultanti:

Ing. Jitka Elznicová, Ph.D., FŽP UJEP

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

Mgr. Michal Hošek

Tel.: 311236941, email: hosek@iic.cas.cz

V minulých letech jsme mapovali místa v nivách českých řek, kde jsou nejvyšší koncentrace rizikových prvků v nivních půdách ČR. V současnosti ale chybí reálná představa, jak jsou tato místa nebezpečná pro životní prostředí. Domníváme se, že některé prvky, hlavně Cd, Hg a U, nejsou ve znečištěném nivním sedimentu zcela pevně vázány a mohou se, jak pohybovat migrací, tak vstupovat do potravní sítě. Místa zkoumání by byla: niva Litavky pod Příbramí, niva Reslavy a Ohře nad Chebem, a niva Ploučnice pod Mimoní, případně další. Práce by navazovala na řadu studií, které jsme na těchto místech už provedli, ale ve kterých jsme pohybu rizikových prvků nevěnovali náležitou pozornost. V současnosti pro ohniska znečištění neexistují žádné intervenční limity nebo jiný legislativní podklad, podle nichž by se tato místa měla vyznačit, omezit na nich hospodaření, nebo dokonce revitalizovat. To může být způsobeno nedostatkem studií o skutečné naléhavosti této hrozby. Tuto nedostatečnost je třeba napravit. Práce by byla součástí běžícího projektu GAČR na ÚACH a GIÚ AV ČR.

b) Specializace Pokročilé technologie pro ochranu životního prostředí

Chemické postupy při recyklaci lithiových baterií

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

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

Konzultanti: specialisté f. IBG

Baterie obsahující lithium patří dnes k nejdůležitějším sekundárním zdrojům elektrické energie a používají se v nejrůznějších typech zařízení, nicméně lze očekávat, že v nedaleké budoucnosti bude dominující oblastí použití automobilový průmysl (viz očekávaný masový nástup elektromobilů) a oblast manipulace s materiálem, kde se používají obdobné typy baterií. Tyto baterie se svou velikostí, konstrukcí, výkonem i cenou výrazně liší od baterií používaných např. v mobilních telefonech, a rovněž jejich životní cyklus se řídí jinými pravidly. Výrobci elektromobilů a podobných zařízení jsou povinni odebírat zpět baterie s prošlou životností, které však často vykazují dostatečnou účinnost. Z těchto baterií budují specializované firmy úložiště energie a prodlužují tak životnost (využitelnost) baterií. Nicméně i tento „druhý život“ baterií časem končí. Baterie, které nelze dále využívat jako zdroje elektrické energie, představují rizika pro životní prostředí, na druhou stranu však mohou být zdrojem cenných prvků.

Poněkud nepřesný termín „lithiové baterie“ zahrnuje pestrou paletu elektrických článků obsahujících sloučeniny lithia. V současné době jsou patrně nejrozšířenější baterie lithium – iontové (Li-ion) a baterie na bázi fosforečnanu železnato lithného (LiFePO₄). Je třeba si ovšem uvědomit, že konstrukce baterií podléhá poměrně rychlým změnám, kromě zmíněných sloučenin mohou baterie obsahovat řadu jiných sloučenin lithia i dalších prvků a je obtížné předvídat, jaký typ baterii bude dominovat v horizontu několika let. Nicméně není příliš pravděpodobné, že bude lithium jako klíčový prvek při konstrukci baterií nahrazeno prvkem jiným, byť i v tomto směru probíhá další výzkum.

Použité lithiové baterie zatím nejsou využívány jako zdroj surovin (navzdory rostoucím cenám lithia), případně jsou zpracovávány postupy určenými pro recyklaci jiných typů baterií (např. hydrometalurgickými či pyrometalurgickými), jež nejsou pro daný účel vhodné. Cílem projektu (disertační práce) bude vývoj postupů pro získávání cenných prvků z článků, jež nelze dále využívat jako zdroje elektrické energie. Předpokládá se použití běžných chemických či hydrometalurgických postupů, jako jsou termický či chemický rozklad, loužení, srážení či krystalizace, nicméně pozornost by měla být zaměřena hlavně na použití sofistikovanějších postupů, jako jsou selektivní loužení, selektivní extrakce, použití selektivních sorbentů apod. „na míru širých“ pro zpracování novějších typů Li baterií. Výzkum bude probíhat ve spolupráci s firmami zabývajícími se sekundárním (energetickým) využitím Li baterií; tyto firmy se budou podílet na specifikaci požadavků na vstupní surovinu pro chemické zpracování.

Nanoparticulate inorganic and composite materials for advanced applications

Advisor: prof. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP

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

Supervisor/consultant: Dr. Jiří Zelenka, TOSEDA

Tel.: 605 407 306

Focusing on the HI-TECH polymers and composites TOSEDA s.r.o. continuously extends its research activities with the goal to develop new materials for most advanced applications in diverse areas, such as in space industry, environmental protection, medicine, sensing and many others. New nanoparticles are required for various application to adjust the properties of polymeric materials (optical and thermomechanical properties, expansion coefficient, ...). The research activities will be focused on synthesis of the selected nanoparticles and their characterization by suitable methods. Nanoparticle synthesis will be targeted on environment friendly procedures. Polymeric nanocomposites will be prepared in second step. Required properties of prepared nanocomposites will be verified by functional testing (thermomechanical, electrical, optical properties etc.) before and after aging. Some well known materials (TiO₂, ZnO) will be synthesized in the initial part of the work, and their potential applications in the medicine will be assessed after detailed characterization. Then, some fewer common nanoparticles will be prepared, e.g. calomel (Hg₂Cl₂) nanoparticles, which can be used in a development of sensors working in the IR region. The properties of composites can be optimized by addition of calomel nanoparticles to polymeric binders.

Most of the work will be carried out in the research laboratories in TOSEDA, special measurements and characterization will be carried at University of Jan Evangelisty Purkyně or in the Institute of Inorganic Chemistry.

Sekundární využití jednorázových plen

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

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

Školitel specialista: Ing. Pavel Krystyník, Ph.D.

Jednorázové pleny tvoří nezanedbatelnou část komunálního odpadu u nás i v jiných průmyslově významných zemích. Skládají se z několika vrstev s náplní tvořenou hydrogelem (polyakrylát sodný). Použité pleny pak navíc obsahují zbytky moči a exkrementů. V současné době není u nás a patrně ani jinde ve světě zaveden žádný udržitelný systém pro recyklaci či znovuvyužití odpadních plen. Ty se pak stávají součástí směsného komunálního odpadu, kde tvoří asi 2 hm%, a jsou likvidovány skládkováním (přičemž odhadovaná doba rozkladu je až 400 let) nebo spalováním, což s sebou přináší problémy kvůli absorbované vlhkosti a vzniku škodlivin.

Cílem práce bude návrh způsobu využití odpadních jednorázových plen jako superabsorbentu pro zachycení vody v půdách a následné využití flórou v období sucha. Jedná se tak o sekundární využití materiálů v souladu s principy cirkulární ekonomiky. Hlavní částí práce bude studium environmentálně relevantních vlastností hydrogelu používaného v jednorázových plenách, jeho compatibility se složkami životního prostředí a studium dopadů vnosu tohoto materiálu do životního prostředí. Budou studovány

mechanismy transformace tohoto materiálu ve složkách životního prostředí, biologická odbouratelnost v půdě, zdravotní nezávadnost, migrace polutantů vzniklých při odbourávání, ke kterému již dnes dochází ve skládkách odpadů po celém světě.

Další částí práce bude studium mikrobiálních procesů souvisejících s vnášením plen do životního prostředí – chování v půdě, lidské patogeny a jejich chování v pleni, sterilizace plen. Možnosti přenosu infekčních agens do půdy v případě aplikace, možnosti dezinfekce půdními procesy, migrace E-coli uvolněných z plen do půdy při přímé aplikaci či nutnost dezinfekce před aplikací atd.

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 Šťastný, 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 (trifenylfosfát). 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.).

Projekt je podpořen grantem GAČR 19-07460S pro období 2019-2021.

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

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 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).

Organokovové sítě pro environmentální aplikace

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

Tel.: 266173125, e-mail: demel@iic.cas.cz

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

Tel.: 266172193, 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 využití organokovových sítí pro environmentální aplikace, především sorpci, rozklad vybraných molekul. 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.) až po studium jejich aplikací (NMR, HPLC). Většina prací bude probíhat na pracovišti Ústavu anorganické chemie AV ČR v Řeži.

Molekulové klastry pro antimikrobiální povrchy

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

Tel.: 266172193, e-mail: lang@iic.cas.cz

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

Tel.: 266172194, 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.

Rozklady organosforečných sloučenin na nanostrukturních reaktivních sorbentech

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

Tel.: 266 172 202, e-mail: jiri.henych@ujep.cz

Konzultant: prof. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP

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

Mnohé nanostrukturní oxidy na bázi Ti, Ce, Fe, Mg, aj. jsou schopné na svém povrchu vázat a deaktivovat nebezpečné organosforečnany – bojové chemické látky a jejich simulanty, nebo např. pesticidy. Práce se zaměřuje na přípravu čistých, směsných, nebo jinak modifikovaných nanostrukturních sorbentů s jejich následnou charakterizací a studiem kinetiky a mechanismu rozkladu modelových látek na jejich povrchu pomocí moderních instrumentálních metod. K charakterizaci lze využít širokou škálu metod jako jsou rentgenová difrakce (XRD), fotoelektronová spektroskopie (XPS), vibrační (Raman, IČ) a UV-Vis spektroskopie, stanovení měrného povrchu a porozity fyzisorpcí dusíku (BET a BJH) a elektronová mikroskopie (SEM a HRTEM). Ke studiu reaktivní adsorpce a rozkladu modelových látek a polutantů bude využita *in-situ* infračervená spektroskopie a HPLC, popř. GC-MS. Většina prací bude probíhat na pracovišti Ústavu anorganické chemie AV ČR v Řeži u Prahy. Část prací (chromatografická měření) pak na fakultě ŽP v Ústí nad Labem.

Studium fotokatalytických rozkladů organických polutantů na nanokrystalických oxidech

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

Tel.: 266 172 202, e-mail: jiri.henych@ujep.cz

Konzultant: prof. Ing. Pavel Janoš, CSc., FŽP UJEP

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

Fotokatalyzátory jsou látky, které jsou schopny po osvitě vhodným elektromagnetickým zářením (např. UV světlem) rozkládat mnohé organické polutanty. Tuto schopnost vykazují např. nanokrystalický TiO₂, ZnO nebo CeO₂. Mezi látky, které lze rozkládat, patří polutanty ovzduší, např. VOC (acetaldehyd, formaldehyd, 1,2-dichlorethan), ale i polutanty ve vodách jakou jsou azobarviva, pesticidy, nebo endokrinní disruptory. Předmětem práce je studium kinetiky a mechanismu rozkladných reakcí vybraných látek na různých formách nanokrystalických fotokatalyzátorů. Adsorpce i mechanismus reakcí mohou na různých fotokatalyzátorech probíhat odlišně. Jejich detailní charakterizace pomocí vhodných instrumentálních metod (např. rentgenová difrakce, elektronová mikroskopie, fotoelektronová spektroskopie, měření povrchů a porozity, Ramanova a IČ spektroskopie) v návaznosti na účinnost rozkladných reakcí mohou napomoci, jak k objasnění mechanismu fotokatalytických reakcí, tak i k vývoji nových vysoce účinných fotokatalyzátorů.

Phytoremediation of former military and abandoned mining sites with using second generation crop *Miscanthus x giganteus*

Advisor: prof. Valentina Pidlisnyuk, DrSc., FŽP UJEP

Tel.: 776 051 475, e-mail: valentina.pidlisnyuk@ujep.cz

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

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

Phytoremediation is a promising technique being relatively cheap, environmentally friendly and effective for large scale with a small and medium concentration of contaminants. It is desirable to combine the phytoremediation with production of biofuel crops considering the increasing demand for biomass production as alternative energy

sources. Perennial grass *Miscanthusxgiganteus* belongs to the second-generation biofuels crops, was introduced in Europe and USA and showed good harvest yield, including at the relatively poor soils. The research will be focused on monitoring (by means of advanced instrumental techniques) applications of *Miscanthus x giganteus* for phytoremediation of former military and abandoned mining sites. The impact of contaminants and properties of soils to the effectiveness of phytoremediation and plants' stress will be under investigation. Concentrations of contaminants or their metabolic products at the different parts of plants and plant's bioparameters during number of vegetation seasons will be evaluated. Changing of soil properties and possibility to impact to the process by soil amendments and Plant Growth Regulators will be analyzed. The results will be used for developing of phytotechnology with biomass production to be implemented at the selected site in the Czech Republic. The study is related with the on-going NATO SPS Multiyear project and implies the joint cooperative research with the Kansas State University (USA), the University of Life and the Environment and National University "Lvivska Polytechnoka" (Ukraine).

Assessment of the value chain of miscanthus phytomanagement

Advisor: prof. Valentina Pidlisnyuk, DrSc., FŽP UJEP

Tel.: 776 051 475, e-mail: valentina.pidlisnyuk@ujep.cz

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

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

The research aims to assess the process of phytomanagement with the second-generation crop *Miscanthusxgiganteus* when applied to the brownfield and marginal lands. The available in the literature models will be reviewed, including BIOSEM, RECAP, BEAM, BIOCOST, BEAVER, MULTISEES, AGRICOST. The possibility to assess the environmental visibility of the chains by using LCA (Life Cycle Analysis) and LCC (Life Cycle Coasting) will be investigated. The approach for assessing the impact of miscanthus phytomanagement to biodiversity will be created.

Comparative analysis of miscanthus biometric parameters (height, number of shoots, weight), phytoremediation characteristics (bioaccumulation coefficient and value of translocation factor), changing in soil characteristics (available NH₄⁺, NO₃⁻, P, K, Ca, Mg, and Na, total organic carbon (TOC), total nitrogen (TN), cation-exchange capacity (CEC), pH, and total metals content), and energy capacity while plant produced at the differently contaminated soils at the existed miscanthus fields related to on-going NATO SPS Multiyear project will be done. The research will ensure that application of phytoremediation with soil improvement and cascading use of miscanthus biomass permits to achieve the sustainable bioenergy crop's value chains that meets the environmental and economic co-benefits.