

Doktorské studium na Ústavu chemických procesů AV ČR

Seznam projektů pro FCHT na rok 2008

Obory doktorského studia (akreditované společně s VŠCHT Praha):

CHI - CHEMICKÉ INŽENÝRSTVÍ, **FCH** - FYZIKÁLNÍ CHEMIE, **OCH** - ORGANICKÁ CHEMIE

CHTOŽP - CHEMIE A TECHNOLOGIE OCHRANY ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ

OT - ORGANICKÁ TECHNOLOGIE, **BT** – BIOTECHNOLOGIE

str.	Školitel	Obor	Název projektu
1	Círka V.	OCH/OT	Fotochemie organických sloučenin v mikrovlnném poli
2	Círka V.	OCH/OT	Mikrovlnná organická chemie nových meziproductů u PCDD/PCDF
3	Čapek P., Hejtmánek V.	OT	Makroskopické vlastnosti pórovitých materiálů pro nosiče membrán
4	Fajgar R.	OCH	Příprava fotokatalyzátorů na bázi Ti/O/Si a studium fotooxidace modelových sloučenin
5	Izák P.	OT	Dělení kapalných směsí pervaporací pomocí membrán s iontovými rozpouštědly
6	Jirátová K.	OT	Totální oxidace těkavých organických látek na strukturovaných heterogenních katalyzátorech
7	Pola J.	OT	Laserově iniciovaná deposice nových polymerů
8	Schraml J.	OCH/FCH	LC-NMR: kombinace HPLC chromatografie s NMR spektroskopií
9	Schwarz J.	OT	Charakterizace uhlíkatého aerosolu v ovzduší v závislosti na jeho velikosti
10	Vít Z.	OT	Studium přípravy molybdenových katalyzátorů promotovaných vzácnými kovy

PROJEKT DOKTORSKÉHO STUDIA V OBORU
ORGANICKÁ CHEMIE / ORGANICKÁ TECHNOLOGIE

Fotochemie organických sloučenin v mikrovlnném poli

Školitel: Dr. Ing. Vladimír Církva

Laboratoř procesů ochrany prostředí
Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., 165 02 Praha 6 – Suchdol

Projekt reprezentuje originální myšlenku z mezioborové oblasti uplatnění chemie za extrémních a neklasických podmínek. Idea spočívá v propojení dvou vědeckých oborů: tradiční fotochemie a nedávno vzniklé mikrovlnné chemie. Tato nová vědní disciplína byla nazvána *mikrovlnná fotochemie*. Zabývá se studiem vlivu ultrafialového (UV) a mikrovlnného záření na chemické a fyzikální vlastnosti molekul. UV záření je generováno zcela netypicky, přímo mikrovlnným polem pomocí tzv. bezelektrodové lampy.

Cílem projektu je základní výzkum vlivu mikrovlnného záření na průběh vybrané fotochemické reakce, a to jak z hlediska ovlivnění její regioselektivity či mechanismu, tak zároveň z důvodu vývoje zařízení pro tuto novou experimentální techniku. V rámci projektu budou navrženy nové bezelektrodové UV lampy (emitující v jiných vlnových délkách, než tradiční UV výbojky) a zkonstruován mikrovlnný fotoreaktor pracující jak ve vsádkovém, tak v kontinuálním režimu. Získané výsledky budou mít značný význam nejen pro rozšíření vědeckého poznání, ale rovněž naleznou uplatnění i v průmyslových fotochemických procesech či v metodách degradace nežádoucích polutantů životního prostředí.

Mikrovlnná laboratoř ÚCHP AV ČR patří mezi světově uznávaná pracoviště. Laboratoře jsou vybavené požadovanou mikrovlnnou technikou (originální a modifikované trouby: Milestone, Panasonic, Whirlpool) i fotochemickým zařízením (UV a bezelektrodové lampy, fotoreaktory, zařízení na měření kvantových výtěžků). Pro analytické účely jsou k dispozici vlastní přístroje: GC (HP5890), GC/MS (Focus DSQ, program Xcalibur), HPLC a UV spektrometry (Helios γ , program Vision 32; USB2000). Spektra NMR (Varian 300) je možno měřit samostatně, servisem je zajišťováno měření na LC/NMR (Varian 500) spektrometru.

Uchazeč by měl být experimentálně zručný a prakticky obeznámený s organickou syntézou. Vítány jsou i určité teoretické znalosti z fotochemie či mikrovlnné chemie.

Doporučená literatura:

Klán P., Církva V.: *Microwaves in Photochemistry*. V knize: *Microwaves in Organic Synthesis*, 2nd Edition, kap. 19. (Loupy, A., Ed.), pp 860-897, John Wiley, Weinheim 2006.
Církva, V.; Vlková, L.; Relich, S.; Hájek, M.: *J. Photochem. Photobiol. A*: 179 (2006) 229.

PROJEKT DOKTORSKÉHO STUDIA V OBORU
ORGANICKÁ CHEMIE / ORGANICKÁ TECHNOLOGIE

Mikrovlánná organická chemie nových meziproductů u PCDD/PCDF

Školitel: Dr. Ing. Vladimír Církva

Laboratoř procesů ochrany prostředí
Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., 165 02 Praha 6 – Suchdol

Projekt se zabývá studiem syntetických organických reakcí v mikrovlánném poli. Řeší problematiku podmínek vzniku nových meziproductů u perzistentních organických polutantů typu PCDD a PCDF (polychlorované dioxiny a furany) z jejich surogátů, a to na vhodných pevných nosičích (silikagel, alumina, atd.). Jako hlavní navržené surogáty jsou uvažovány chlorované fenoly a benzeny.

Cílem projektu je základní výzkum vlivu mikrovlánného záření na průběh organických reakcí, při kterých vznikají nové meziproducty PCDD/PCDF (např. polychlorované deriváty difenyletherů a jejich heteroanaloga). Zvláštní pozornost bude věnována vlivu matrice a metalické mědi s rozdílnými fyzikálně-chemickými vlastnostmi na průběh syntéz. Získané výsledky budou mít značný význam nejen pro rozšíření vědeckého poznání, ale rovněž naleznou uplatnění i v průmyslových spalovacích procesech či v metodách degradace nežádoucích polutantů životního prostředí.

Laboratoř procesů ochrany prostředí na ÚCHP AV ČR patří mezi světově uznávaná pracoviště. Laboratoře jsou vybavené požadovanou mikrovlánnou technikou (originální a modifikované trouby: Milestone, Panasonic, Whirlpool). Pro analytické účely jsou k dispozici vlastní přístroje: GC (HP5890), GC/MS (Focus DSQ, program Xcalibur), HPLC a UV spektrometry (Helios γ , program Vision 32). Spektra NMR (Varian 300) je možno měřit samostatně, servisem je zajišťováno měření na LC/NMR (Varian 500) spektrometru.

Uchazeč by měl být experimentálně zručný a prakticky obeznámený s organickou syntézou. Vítány jsou i určité teoretické znalosti z mikrovlánné a environmentální chemie.

Doporučená literatura:

Loupy, A.: *Microwaves in Organic Synthesis*, 2nd Ed., kap. 19., John Wiley, Weinheim 2006.
Schwarzenbach, R.P., Gschwend, P.M., Imboden, D.M.: *Environmental Organic Chemistry*, 2nd Ed., John Wiley & Sons, New Jersey, 2003.

PROJEKT DOKTORSKÉHO STUDIA V OBORU ORGANICKÁ TECHNOLOGIE

Makroskopické vlastnosti pórovitých materiálů pro nosiče membrán

Školitel: Ing. Pavel Čapek, CSc. ¹

Školitel specialista: Ing. Vladimír Hejtmánek, CSc. ²

¹ Ústav organické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6-Dejvice

² Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství, ÚCHP AV ČR, v.v.i., 16502, Praha 6 - Suchbátka

Mezi technické obory, v nichž je prakticky potřebná znalost makroskopických vlastností pórovitých materiálů, patří membránové separace a chemické technologie založené na heterogenní katalýze a adsorpci. Makroskopické vlastnosti pórovitých materiálů (efektivní difuzivita a permeabilita tekutin) úzce souvisí s jejich texturou (mikrostrukturou), tzn. s geometrií a topologií prostoru pórů. Díky rychlému rozvoji metod třírozměrné rekonstrukce pórovitých látek lze vytvářet realistické modely mikrostruktur pórovitých látek (repliky). S jejich pomocí a na základě modelů transportu hmoty se dají vypočítat veličiny charakterizující makroskopické vlastnosti pórovitých materiálů jako jsou efektivní permeabilita a efektivní difuzivita. Tyto je možné následně porovnat s jejich experimentálními protějšky. Získané informace se využívají při optimalizaci průmyslových technologií, jsou ukazatelem při vývoji materiálů požadovaných vlastností a prohlubují teoretický popis procesů v pórovitých materiálech.

Cílem projektu je srovnání experimentálně naměřených a vypočítaných efektivních hodnot difuzivity a permeability plynů ve vybraných pórovitých materiálech. Pozornost bude zaměřena na potenciální nosiče membrán na bázi α -aluminy, určených pro membránové separátory a reaktory, které jsou vyvíjeny v paralelním projektu. Třírozměrné modely pórovitých materiálů budou vytvořeny metodami stochastické rekonstrukce založené na dvourozměrných snímcích rovinných řezů pórovitými materiály. Rekonstruovaný prostor pórů poslouží jako základní prvek pro výpočet efektivních hodnot difuzivity a permeability plynů v pórovitém materiálu.

Pracoviště je vybaveno aparaturami pro měření efektivních difuzivit a permeabilit metodami stacionární difúze a kvazistacionární permeace za sníženého tlaku. K dispozici jsou také zařízení k přípravě vzorků pro pozorování v elektronovém mikroskopu, který vlastní spolupracující tým na dalším pracovišti AV ČR. Klíčovou součástí projektu je zpracování digitálních snímků a stochastická rekonstrukce, pro které byly vyvinuty efektivní algoritmy. Jako podpůrná měření lze využít klasickou texturní analýzu (rtuťový pórometr a heliový pyknometr).

Uchazeč bude potřebovat jistou zručnost při práci s přístroji a aparaturami, výhodou budou dobré znalosti programování a numerických metod, vítána je jeho pečlivost při práci a samostatnost.

Doporučená literatura:

Torquato S.: Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties. Springer-Verlag, New York 2002.

Čapek P., Hejtmánek V., Brabec L., Zikánová A., Kočířík M., Network Modelling of Capillary Pressure Curves, Permeability, and Diffusivity. Chem. Eng. Sci. 62(18–20), 5117–5122 (2007).

PROJEKT DOKTORSKÉHO STUDIA V OBORU ORGANICKÁ CHEMIE

Příprava fotokatalyzátorů na bázi Ti/O/Si a studium fotooxidace modelových sloučenin

Školitel: RNDr. Radek Fajgar, CSc.

Laboratoř laserové chemie
Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., 165 02 Praha 6 - Suchdol

Vzrůstající znečištění ovzduší těkavými organickými látkami je způsobeno stále rostoucím počtem automobilů a pokračující industrializací. Řešení problému znečištění se stává jednou z priorit společnosti 21. století a vyžaduje aplikaci nových technologií. Jednou z neslibnějších technik, sloužících k odstraňování těkavých polutantů z ovzduší se zdá být fotokatalytická oxidace. Heterogenní fotokatalytická oxidace je studována již dvě desetiletí a posledních několik let se začínají objevovat praktické aplikace fotokatalýzy (např. výroba samočisticích materiálů, antimikrobiálních dlaždic, úprava a čištění vody apod.).

Nejvíce pozornosti bylo věnováno fotokatalytickému jevu na povrchu oxidu titaničitého. Výhodou použití TiO₂ je jak jeho stabilita, tak i vysoká fotokatalytická aktivita vůči široké škále organických sloučenin, virů, bakterií, řas atd., které jsou na povrchu fotokatalyzátoru mineralizovány až na CO₂, vodu a neškodné anorganické ionty. Široká aktivita TiO₂ je přisuzována především přítomnosti hydroxylových radikálů s vysokým oxidačním potenciálem (2,8 V) na povrchu katalyzátoru.

V literatuře je popsána řada technik přípravy fotokatalyzátorů, založených na TiO₂ s cílem zlepšit jeho vlastnosti: i) úprava komerčního TiO₂, ii) depozice tenkých vrstev chemickými a fyzikálními technikami, iii) příprava dopovaného TiO₂ apod. Cílem těchto prací je snaha o zvýšení fotokatalytického účinku ve viditelné oblasti spektra a vyřešení problému deaktivace katalyzátoru.

V navrhovaném projektu se doktorand bude věnovat:

- i) přípravě fotokatalyzátorů na bázi nestechiometrického oxidu titaničitého
- ii) studiu a popisu vlastností připravených katalyzátorů
- iii) studiu fotokatalytické oxidace vybraných polutantů na připravených katalyzátorech

Nstechiometrické katalyzátory budou připraveny laserovou pyrolýzou a laserovou fotolýzou tetrakis(trimethylsilyloxy)titanu v plynné fázi. Připravené Ti/O/Si materiály budou deponovány v tenké vrstvě na vhodný substrát (Si, SiO₂). Podobně budou připraveny Ti/O/Si katalyzátory, dopované oxidy kovů (Cr, Ce, Fe).

Vlastnosti katalyzátorů budou studovány řadou technik, dostupných jak na školícím pracovišti, tak i v dalších spolupracujících laboratořích. Hlavní pozornost bude věnována především spektrálním vlastnostem (UV, IR a Ramanova spektra), chemickému složení (fotoelektronová spektroskopie, EDX) a morfologii (elektronová mikroskopie, difrakční techniky) připravených materiálů.

Proces fotokatalytické oxidace bude studován na modelových polutantech, kterými budou sloučeniny, běžně se vyskytující ve znečištěném ovzduší: benzen, toluen, formaldehyd apod. Proces bude studován ve skleněném reaktoru a jeho průběh bude sledován technikou infračervené spektroskopie. Produkty fotochemické oxidace budou studovány plynovou chromatografií a hmotnostní spektrometrií.

Důvodem přípravy těchto nestechiometrických Ti/O/Si katalyzátorů je očekávaná vyšší povrchová koncentrace OH radikálů a tím předpokládaná vyšší fotokatalytická aktivita. Obsah oxidů kovů v připravených katalyzátorech umožní rozšířit fotokatalytickou aktivitu do oblasti viditelné části spektra a snížit deaktivaci katalyzátoru vlivem povrchové karbonizace.

Literatura:

1. A. Fujishima, K. Hashimoto, T. Watanabe: TiO₂ fotokatalýza: základy a aplikace, Silikátový svaz 2002
2. O. Carp, C.L. Huisman, A. Reller: Prog. Solid State Chem. 32, 33 (2004)

Dělení kapalných směsí pervaporací pomocí membrán s iontovými rozpouštědly

Školitel: Ing. Pavel Izák, Ph.D.

Oddělení separačních procesů
Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., 16502, Praha 6 - Suchbátka

Cílem tohoto projektu je vývoj a aplikace zakotvených kapalných membrán na bázi iontových rozpouštědel. Návrh je zaměřen na separaci produktů biotransformace a oddělení různých cenných látek ze směsí, u nichž je zajištěno jejich praktické využití v průmyslu.

Iontová rozpouštědla mají velký potenciál v membránových procesech, zvláště v případech, kde je jejich potřeba jen malé množství, tj. v zakotvených kapalných membránách. Speciální vlastností iontových rozpouštědel je jejich neměřitelná tenze par při běžných experimentálních podmínkách, což umožňuje jejich atraktivní využití u pervaporace. Zakotvené iontové kapalně membrány nabízejí mnoho výhod [1,2].

Pro vybrané produkty biotransformace a racemických směsí byly již vyvinuty analytické metody na Ústavu chemických procesů (ÚCHP) AV ČR (plynová a kapalinová chromatografie). Ve spolupráci s izraelskou firmou CHAMEDA bylo vyvinuto speciální chirální iontové rozpouštědlo, které je schopné dělit racemické směsi. Iontová rozpouštědla (včetně chirálních) byla ve spolupráci s Ústavem polymerní chemie na VŠCHT v Praze zabudována do polymerní matrice.

Předmětem doktorské práce bude stanovení pervaporačních charakteristik u vybraných systémů na již zakoupené pervaporační aparatuře na ÚCHP. Na jejich základě bude vybrán nejslibnější systém z hlediska ekonomického přínosu a ten bude dále rozvíjen pro komerční využití v průmyslu.

U kandidáta doktorské práce bude vyžadováno zpracování podrobné rešerše zahraniční literatury v dané problematice (nutnost aktivní znalosti anglického jazyka), samostatné měření a zpracování výsledků a ve spolupráci se školitelem i napsání publikací do zahraničních periodik.

Doporučená literatura:

1. Mulder M.: Basic Principles of Membrane Technology, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, (1998).
2. P. Izák, M. Köckerling, U. Kragl; Stability and selectivity of a multiphase membrane, consisting of a dimethylpolysiloxane on ionic liquid, used in the separation of solutes from aqueous mixtures by pervaporation, Green Chem., 8 (2006) 947

Totální oxidace těkavých organických látek na strukturovaných heterogenních katalyzátorech

Školitel: Ing. Květa Jiráková CSc.

Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., 16502, Praha 6 - Suchbátka

Těkavé organické látky emitované do ovzduší zhoršují jeho kvalitu v blízkosti průmyslových podniků. Vhodným postupem vedoucím ke snížení jejich množství je jejich totální katalytická oxidace. Významným faktorem ovlivňujícím aktivitu, selektivitu a v neposlední řadě i cenu oxidačních katalyzátorů je jejich geometrická forma.

Předmětem projektu je základní výzkum přípravy a vlastností katalyzátorů obsahujících drahé kovy nebo směsné oxidy přechodových kovů (různé kombinace Ni, Co, Mn, Cu aj.) na nosičích lišících se nejen svojí geometrickou strukturou, ale i svými acido-bázickými vlastnostmi a afinitou k vodě. Jednou z fází projektu bude příprava katalyzátorů nanášením nanočástic aktivní složky ve formě tenkých vrstev na předem zformovaný nosič (keramický nebo kovový) opatřený vhodnou mezivrstvou. Nanočástice oxidických, případně kovových katalyzátorů budou připravovány jak klasickým impregnačním postupem, tak i z reverzních mikroemulzí (voda v oleji), které umožňují regulovat velikost částic aktivní složky katalyzátoru, eventuálně dalšími postupy.

Aktivita vzniklých katalyzátorů bude studována v laboratorním integrálním reaktoru spojeném on-line s plynovým chromatografem řízeným počítačem a IR analyzátozem. Katalyzátory budou charakterizovány měřením povrchu, roentgenovou analýzou, elektronovou mikrosondou, teplotně programovanou redukcí, teplotně programovanou desorpcí amoniaku spojenou s počítačem řízeným hmotovým spektrometrem, velikostí povrchu aktivní složky, případně přímým stanovením velikostí částic aktivní složky.

Běžná zařízení pro preparaci katalyzátorů, aparatury pro testování katalytické aktivity a další charakterizaci katalyzátorů jsou k dispozici a lze si je prohlédnout u školitele.

Požadavky na studenta(ku): Zájem o experimentální práci. V tématu se stýká organická technologie, anorganická chemie a fyzikální chemie a je tedy vhodné pro absolventy různých směrů.

Literatura

1. J.J. Spivey: Complete Catalytic Oxidation of Volatile Organics, Ind. Eng. Chem. Res. 27 (1987) 2165-2180.
2. Handbook of Microemulsion Science and Technology, P. Kumar and K.L. Mittal, Editors, Marcel Dekker, Inc. New York, 1999.

PROJEKT DOKTORSKÉHO STUDIA V OBORU **ORGANICKÁ TECHNOLOGIE**

Laserově iniciovaná deposice nových polymerů

Školitel: RNDr. Josef Pola, DrSc.

Laboratoř laserové chemie

Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., 165 02 Praha 6 - Suchdol

Laserově iniciované chemické reakce v plynné fázi spadají do moderního vědního oboru laserové chemie. Jsou využívány pro přípravu nových typů ultrajemných prášků a pevných nanostrukturovaných filmů anorganických a organických materiálů, které nacházejí použití v mikroelektronice, materiálové vědě a optoelektronice.

V Laboratoři laserové chemie Ústavu chemických procesů byla vyvinuta nová laserová technika pro přípravu polymerních filmů, které vznikají ozářením organické a nebo organokovové sloučeniny v plynné fázi. Podstatou tohoto procesu je tvorba krátce žijících fragmentů a jejich polymerizace v plynné fázi a následná deposice vytvářených polymerních shluků na pevné povrchy. Touto metodou lze připravit strukturálně výjimečné polymerní povlaky (např. [1-3]).

Cílem navrženého doktorandského studia bude výzkum tvorby některých speciálních organických polymerů obsahujících heteroatom křemíku a boru. Výzkum se skládá z provedení reakcí ve stávajících reaktorech, používání UV a IČ laseru a charakterizace plynných a pevných produktů pomocí plynové chromatografie, hmotnostní spektrometrie a jiných spektrálních metod. Dodatečná měření pomocí elektronové mikroskopie a aplikace TGA budou prováděna specialisty. Experimentální zázemí je dobře zajištěno.

Uchazeč by měl mít jistou dávku experimentální zručnosti, umět pracovat s literaturou a být motivován skutečností, že bude pracovat v oboru nových polymerních materiálů. Laboratoř laserové chemie vykazuje řadu zahraničních spoluprací a může nabídnout stáž na zahraničním pracovišti. Po ukončení doktorského studia může uchazeč nalézt trvalé uplatnění v ústavu.

Literatura

1. Urbanová, Vítek, Bastl, Ubik, Pola, Laser CVD of polypyridine films. *J. Mater. Chem.* 5 (1995) 849.
2. Pola, Urbanová, Bastl, Beckers, Formation of hydrogenated Si₂O films by UV laser photolysis of disiloxane, *J. Mater. Chem.* 9 (1999) 2429.
3. Tomovska, Bastl, Vorlíček, Vacek, Šubrt, Plzák, Pola, ArF Laser Induced Chemical Vapour Deposition of Polythiene Films from Carbon Disulfide. *J. Phys. Chem.* 107 (2003) 9793.

PROJEKT DOKTORSKÉHO STUDIA V OBORU
ORGANICKÁ CHEMIE / ANORGANICKÁ CHEMIE / FYZIKÁLNÍ CHEMIE

LC-NMR: kombinace HPLC chromatografie s NMR spektroskopií

Školitel: Prof. Jan Schraml, DrSc.

Centrální LC-NMR Laboratoř
Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., 16502, Praha 6 - Suchbátka

Předmětem doktorské disertace je analýza syntetických produktů založená na kombinaci vysoceúčinné kapalinové chromatografie (HPLC) se spektroskopií nukleární magnetické rezonance (NMR).

Kombinované analytické metody (v angličtině tzv. hyphenated techniques) představují současný vrchol analytických postupů; v případě LC-NMR se jedná o kombinaci uznávaně nejúčinnější a nejuniverzálnější separační techniky s rovněž uznávanou nejvýkonnější metodou pro určování molekulové struktury složitých organických látek v kapalném stavu. Tato synergetická kombinace zvyšuje užité hodnoty obou metod neboť eliminuje přenosy separovaných vzorků a tak jejich možnou kontaminaci nečistotami (např. z použitých rozpouštědel).

V Centrální LC-NMR laboratoři ÚCHP AV ČR je LC-NMR zařízení nainstalováno jako dosud jediné v ČR. Zařízení sestává z HPLC chromatografu Varian Pro Star (HPLC pumpa dovolující použití koncentračních gradientů až 3 rozpouštědel, HPLC kolon, injektor, „stop-flow“ ventil, sběrač frakcí a fotodiodový detektor) řízeného počítačem (Dell PC), NMR spektrometru Varian Inova 500 s LC sondami a potřebných softwarů. Pro použití LC-NMR jsou kritické parametry LC sondy. Citlivý objem sond je 60 μL , měřit lze NMR spektra ^1H , ^{13}C , ^{15}N a unikátně i ^{29}Si jader.

Doktorand bude muset před započítím vlastní experimentální práce zvládnout dostatečně hluboko základy obou metod. Vlastní práce bude záviset na odborném zaměření doktoranda. Organický nebo anorganický chemik se bude podílet na syntetické přípravě studovaných látek, fyzikální chemik se soustředí více na spektroskopický přístup k problematice. Společně bude hledání optimálních podmínek pro separaci komponent a vypracování NMR postupů pro jejich NMR identifikaci. Detaily budou záviset na syntetických produktech vybraných k LC-NMR analýze. Přednost bude dána organokřemičitým kopolymerům v jejichž LC-NMR analýze má laboratoř světovou prioritu.¹

Vzhledem k náročnosti LC-NMR na kvalitu a znalosti obsluhy (a vysokou cenu zařízení) bude na tomto tématu moci pracovat pouze výborný student.

Literatura:

Blechta V., Sýkora J., Hetflejš J., Šabata S., Schraml J.: “ ^{29}Si NMR in LC-NMR analysis of silicones“, *Magn. Reson. Chem.* 44, 7 – 10 (2006).

PROJEKT DOKTORSKÉHO STUDIA V OBORU **ORGANICKÁ TECHNOLOGIE**
Charakterizace uhlíkatého aerosolu v ovzduší v závislosti na jeho velikosti

Školitel: Ing. Jaroslav Schwarz CSc.

Laboratoř chemie a fyziky aerosolů
Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., 16502, Praha 6 - Suchdol

Množství, velikost a složení aerosolových částic („jedovatého prachu“) obsažených v atmosféře představuje, vedle plynných polutantů, jeden z rozhodujících faktorů ovlivňujících kvalitu životního prostředí. Jednu z hlavních složek aerosolu tvoří uhlíkaté sloučeniny, které tvoří obvykle 20-50% hmoty částic menších než 10 μm a 30-80% částic menších než 2,5 μm . Počet jednotlivých uhlíkatých organických sloučenin obsažených v aerosolu však jde do desítek tisíců. Přesto že jsou vyvíjeny analytické metody schopné v jedné analýze identifikovat tisíce sloučenin, zdá se schůdnější zaměřit pozornost na analýzu jednotlivých tříd sloučenin od celkového elementárního (EC) a organického uhlíku (OC) po charakterizaci jednotlivých tříd sloučenin a nebo na analýzu sloučenin specifických pro určité zdroje aerosolových částic a na základě jejich výskytu určit původ aerosolů zatěžujících naše ovzduší. Dále, vzhledem k tomu, že velikost aerosolových částic je závislá na jejich původu, je velmi výhodné analyzovat částice separované podle velikosti.

Studium složení uhlíkaté části atmosférických aerosolů separovaných podle velikosti je hlavním tématem a náplní tohoto doktorandského projektu. Laboratoř chemie a fyziky aerosolů je plně vybavené přístroji pro odběr aerosolů i jejich třídění a vzorkování podle velikosti a HPLC s fluorescenčním a UV detektorem a je možná spolupráce s analytickým oddělením ÚChP vybaveného kromě jiných metod i NMR a LC-NMR. Metody pro stanovení OC a EC jsou dostupné ve spolupráci s ČHMÚ nebo na spolupracujícím pracovišti Univerzity v Gentu.

V Laboratoři chemie a fyziky aerosolů v současné době probíhá řešení 2 evropských projektů 6. RP, dvou dalších mezinárodních projektů a několika dalších projektů od českých grantových agentur.

Požadovaný profil uchazeče:

- organický chemik, organický technolog, analytický chemik
- samostatnost a chuť do experimentální práce

Literatura:

1. András Gelencsér.: *Carbonaceous Aerosol*, Springer, Dordrecht, 2004.
2. Seinfeld J. H., Pandis S. N.: *Atmospheric Chemistry and Physics*, John Wiley, New York, 1998

PROJEKT DOKTORSKÉHO STUDIA V OBORU **ORGANICKÁ TECHNOLOGIE**
Studium přípravy molybdenových katalyzátorů promotovaných vzácnými kovy

Školitel: Ing. Zdeněk Vít, CSc.

Oddělení katalýzy a reakčního inženýrství
Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., 16502, Praha 6 - Suchbátka

Aktivitu Mo katalyzátorů je možné významně zvýšit přidáním malého množství promotoru. Typickými příklady jsou systémy CoMo či NiMo/alumina, které nacházejí významná uplatnění při výrobě kapalných paliv. Alternativou ke Co či Ni je zde užití některého vzácného kovu v množství pod 1 %. Tento výzkum je prováděn v ÚCHP řadu let a vedl k výrazným promočním efektům Ir, Pt a Ru [1,2]. Nejběžnějším nosičem je zde alumina, avšak promoční efekt může být významně ovlivněn i typem nosiče.

Obsahem práce je studium přípravy Mo katalyzátorů modifikovaných Pt či jiným vzácným kovem (např. Ru, Rh, Pd) na nosiči odlišném od aluminy, např. na ZrO₂ (silika-alumina, TiO₂ apod.). Bude se studovat vliv prekursoru kovu a způsobu depozice, optimální koncentrace apod. Aktivita a selektivita bude porovnávána s klasickými systémy NiMo či CoMo. Mohou být studovány i jednosložkové katalyzátory se vzácnými kovy a samotné Mo katalyzátory. Konkrétní systém bude vybrán na základě literární rešerše a dohody mezi studentem a školitelem.

K charakterizaci katalyzátorů je možno využít TPR, adsorpce H₂, měření textury (specifický povrch, distribuce pórů), chemickou analýzu (obsahy kovů) či případně i elektronovou mikroskopii (morfologie, disperze složek).

Katalytické vlastnosti je zajímavé studovat v reakcích hydrodesulfurizace (hydrodenitrogenace) či hydrogenace modelových látek. Máme k dispozici moderní průtočné mikroreaktory s pevným ložem, kde reakční směsi jsou automaticky analyzovány na plynových chromatografech. Experimentální data se dále zpracovávají na PC.

Cílem práce je hledat faktory při přípravě katalyzátorů, vedoucí ke zlepšení jejich aktivity a porovnat nekonvenční katalyzátory se vzácným kovem a alternativním nosičem s klasickými katalyzátory. Nové poznatky budou přínosem z teoretického hlediska a mohou být užitečné i pro praxi.

Uchazeč bude při studiu využívat hlavně znalostí z anorganické chemie, heterogenní katalýzy a práce na PC. Znalost angličtiny je vítána pro orientaci v literatuře. Charakter vlastní práce je experimentální (syntézy nosičů a katalyzátorů, měření různých vlastností při charakterizaci materiálů a testování aktivit katalyzátorů).

Literatura:

1. Vít Z., D. Gulková, L. Kaluža and M. Zdražil: Synergetic effects of Pt and Ru added to Mo/Al₂O₃ sulfide catalyst in HDS of thiophene and HYD of cyclohexene. *J. Catal.* 232, 447 (2005).
2. Vít Z.: Iridium sulfide and Ir promoted Mo based catalysts (Review). *Appl. Catal. A* 322, 142 (2007).