

VĚDECKÉ SPISY VYSOKÉHO UČENÍ TECHNICKÉHO V BRNĚ

*Edice Habilitační a inaugurační spisy, sv. 493*

*ISSN 1213-418X*

**Josef Čáslavský**

# **HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE A ŽIVOTNÍ PROSTŘEDÍ**

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ  
Fakulta chemická  
Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí

**doc. Ing. Josef Čáslavský, CSc.**

## **HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE A ŽIVOTNÍ PROSTŘEDÍ**

MASS SPECTROMETRY AND THE ENVIRONMENT

TEZE PŘEDNÁŠKY  
K PROFESORSKÉMU JMENOVACÍMU ŘÍZENÍ  
V OBORU  
CHEMIE A TECHNOLOGIE OCHRANY ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ



BRNO 2014

## **KLÍČOVÁ SLOVA**

Ochrana životního prostředí, osud polutantů v životním prostředí, environmentální analytická chemie, hmotnostní spektrometrie, separační techniky.

## **KEYWORDS**

Environmental protection, the fate of pollutants in the environment, environmental analytical chemistry, mass spectrometry, separation techniques.

© Josef Čáslavský, 2014

ISBN 978-80-214-5103-2

ISSN 1213-418X

## OBSAH

<b>PŘEDSTAVENÍ AUTORA</b> .....	4
1 ÚVOD .....	7
2 POHLED DO MINULOSTI .....	8
3 HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE A JEJÍ VÝZNAM V ENVIRONMENTÁLNÍ ANALÝZE .....	11
4 NOVÉ VÝZVY V OBLASTI ENVIRONMENTÁLNÍ ANALÝZY .....	12
4.1 Antimon .....	13
4.2 Nanomateriály .....	13
4.3 Umělá sladidla .....	14
4.4 Léčiva .....	14
4.5 Syntetické vonné látky .....	15
4.6 Perfluorované sloučeniny .....	16
4.7 Vedlejší produkty desinfekce bazénové vody .....	16
5 PERSPEKTIVY A VÝHLEDY .....	17
6 CITOVANÁ LITERATURA .....	19

# PŘEDSTAVENÍ AUTORA

doc. Ing. Josef Čáslavský, CSc.



## Osobní údaje

---

**Datum a místo narození:** 30. 3. 1953, Raná u Hlinska v Čechách  
**Národnost:** česká  
**Stav:** rozvedený, 5 dětí  
**Zaměstnavatel:** Vysoké učení technické v Brně  
Antonínská 548/1, 601 90 Brno  
**Kontakt:** caslavsky@fch.vutbr.cz

## Vzdělání

---

**1977 Ing.** Vysoká škola chemicko-technologická Pardubice, obor Technická analytická a fyzikální chemie  
**1992 CSc.** Vysoká škola chemicko-technologická Pardubice, obor Analytická chemie  
**2006 doc.** Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, obor Chemie a technologie ochrany životního prostředí

## Zaměstnání

---

1977 – 1979 vedoucí výroby, zástupce ředitele závodu, Brněnské papírny, závod Šlapanice  
1979 – 1991 vědecko-výzkumný pracovník, vedoucí laboratoře plynové chromatografie, Ústřední ústav geologický (později Český geologický ústav, dnes Česká geologická služba), pobočka Brno, Leitnerova 22, 658 69 Brno  
1991 – 1997 vědecko-výzkumný pracovník, odborný asistent, Katedra chemie životního prostředí a ekotoxikologie, Přírodovědecká fakulta MU, Kotlářská 2, 611 37 Brno  
1997 - 2005 samostatný vědecký pracovník, Ústav analytické chemie AV ČR, Veverčí 97, 602 00 Brno  
2005 – dosud odborný asistent, docent, Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno  
2006 – 2014 ředitel ÚCHTOŽP

## Zahraníční stáže

---

1982 - Rakousko, ÖMV (1 týden)

1992 - USA, University of Tennessee, Knoxville (1 měsíc)

1996 - Finsko, University of Jyväskylä (2 týdny)

1998 - Finsko, University of Jyväskylä (1 týden)

## Odborné aktivity

---

### Odborné zaměření

- Analýza organických polutantů v životním prostředí pomocí separačních metod ve spojení s hmotnostní spektrometrií
- Nové typy organických kontaminantů životního prostředí
- Hmotnostní spektrometrie vysokomolekulárních látek (MALDI-TOF MS)
- Pasivní vzorkování persistentních organických polutantů v životním prostředí

### Publikační činnost

Autor a spoluautor:

- 5 kapitol v monografiích
- 49 publikací v odborných časopisech
- 89 přednášek na zahraničních i domácích konferencích.
- 56 plakátových sdělení na zahraničních i domácích konferencích
- 45 technických a výzkumných zpráv

Celkem 349 citací uveřejněných prací (k 7.9.2013), h-index: 11

### Grantová aktivita

2 granty GAČR

2 granty GA AV ČR

1 grant COST (spoluřešitel)

## Pedagogické aktivity

---

### Garant studijního programu/oboru

1. Bakalářský studijní obor Chemie a technologie ochrany životního prostředí studijního programu Chemie a chemické technologie (prezenční i kombinovaná forma studia)
2. Navazující magisterský studijní program Chemie a technologie ochrany životního prostředí (prezenční i kombinovaná forma studia)
3. Doktorský studijní program Chemie a technologie ochrany životního prostředí (prezenční i kombinovaná forma studia)

### Garant předmětů

Analytická chemie I

Analytická chemie II

Analytické metody technické praxe

Odborná praxe-CHTOŽP

Zpracování experimentálních dat – ŽP  
Instrumentální a strukturní analýza  
Praktikum z instrumentální a strukturní analýzy –CHTOŽP  
Metody strukturní analýzy  
Hmotnostní spektrometrie  
Mass spectrometry  
Chromatografie  
Chromatography  
Environmentální modelování  
Laboratoř oboru I  
Laboratoř oboru II

**Vedení studentských prací** Na FCH VUT vedení úspěšně obhájených 13 bakalářských, 30 magisterských a 6 disertačních prací.

V současnosti školitel 15 studentů doktorandského studia.

**Grantová aktivita**

- Na FCH získáno a úspěšně realizováno 11 projektů FRVŠ
- Spoluřešitel projektu „MCHEM - Modernisation of Post-Graduate Studies in Chemistry and Chemistry Related Programmes“ v rámci programu Tempus IV, zaměřeného na zavedení environmentálně orientovaného magisterského a doktorandského studia na 5 universitách v Srbsku
- Odpovědný manažer projektu OPVK EnviTox - Environmentální a toxikologické vzdělávání pro pedagogické pracovníky

## **Ostatní aktivity a členství**

---

Člen České společnosti chemické, dříve Československé společnosti chemické (od r. 1980)

Člen Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci (od r. 2005 člen Hlavního výboru)

Člen Association of Chemistry and the Environment ([www.europeanace.com](http://www.europeanace.com))

od r. 1999 člen vědecké rady

od 1. 12. 2013 do 30. 11. 2014: Vice-president Association of Chemistry and the Environment

od 1. 12. 2014 do 30. 11. 2015: President Association of Chemistry and the Environment

Člen České společnosti pro hmotnostní spektrometrii

Člen Vědecké rady Fakulty chemické VUT v Brně

## **Jazykové znalosti**

---

**Angličtina** aktivně, **ruština** pasivně

# 1 ÚVOD

## MOTTO:



*„Cokoliv se přihodí zvířatům, přihodí se i člověku. Všechny věci spolu souvisí. Cokoliv postihne zemi, postihne také syny země.“*

Seattle (Sealth), indiánský náčelník kmene Duwamish, v poselství k americkému prezidentovi a ke Kongresu roku 1854

Tento spis není kompletní prezentací vědeckých výsledků uchazeče. Jeho smyslem je zamyšlení nad rozporuplností problematiky životního prostředí při zohlednění její komplexnosti a multidisciplinarity. Řada názorů zde prezentovaných jsou názory autora, který se problematice životního prostředí věnuje od počátků realizace projektu TOCOEN (Toxic Organic Compounds in the Environment) od roku 1988, na což navázalo jeho dlouholetého působení v oblasti environmentální analytické chemie, zaměřeného zejména k využití hmotnostní spektrometrie a jejího spojení se separačními technikami pro analýzu organických polutantů v životním prostředí. Odráží se zde rovněž autorův názor, že pokud chceme pohlédnout do budoucnosti, je zapotřebí se odrazit od minulosti a opřít se o současnost. Na tomto pozadí jsou pak konkretizovány vybrané přínosy hmotnostní spektrometrie k poznání stavu životního prostředí z pohledu přítomnosti cizorodých látek.

Specifikou problematiky (nebo též kvality) životního prostředí je skutečnost, že se dotýká všech organismů na Zemi přebývajících, nezávisle na jejich vůli, vnímání, chápání a přijetí této skutečnosti, nezná hranic, působí nezávisle na společenských systémech, dotýká se ve větší nebo menší míře všech humánních aktivit.

Z výše uvedeného vyplývá výjimečné postavení problematiky životního prostředí, se kterým je zapotřebí zacházet tak, aby umožňovalo alespoň zachování, když už ne další rozvoj druhu *Homo Sapiens* na zemském povrchu (antropocentrismus), všeho živého na povrchu zemském při zachování biodiverzity (biocentrismus) nebo Země jako celku, tedy biosféry, geosféry i atmosféry (např. teorie Gaia [1, 2]).



## 2 POHLED DO MINULOSTI

Je poměrně zajímavou skutečností, že velmi dobrý vztah k životnímu prostředí měly národy někdy označované jako primitivní – například severoameričtí Indiáni. Není tedy divu, že za první vpravdě ekologické poselství je považován projev náčelníka indiánského kmene Duwamish Seattlea k tehdejšímu prezidentovi USA Franklinu Pierceovi a ke Kongresu USA z roku 1854, kterým reagoval na požadavek odkoupení území Indiánů pro potřeby imigrantů. Poselství představuje extrakt moudrosti indiánských národů a varování před zneužíváním přírodních zdrojů Země. Hory, moře, řeky, ryby, ptáky, zvířata a lidi vnímali Indiáni jako jeden živý organismus, který je vzájemně propojen a na sobě závislý (což o mnoho let později prohlašovala i teorie Gaia). Mnohé názory tohoto náčelníka, pronesené před 160 lety, neztratily ani dnes na své naléhavosti – například:

„...Zdá se, že bílý muž si nevšimá vzduchu, který dýchá; jako muž, který už mnoho dní umírá, je i on otupělý proti zápachu...“

... Pokračujte se zamořováním svého lože a jedné noci se udusíte ve svém vlastním odpadu...“

Tato slova však u bílého muže nepadla na úrodnou půdu, a tak musela přijít mnohem důraznější varování.

Prvního prosince 1930 se vytvořila inverze v údolí řeky Maasy (Meuse River) ve východní Belgii. V tomto údolí širokém zhruba 2,5 km o hloubce okolo 100 m se nacházela řada průmyslových podniků včetně několika elektráren spalujících uhlí, probíhala tam intenzivní automobilová doprava a v domácnostech se rovněž topilo převážně uhlím. Díky inverzní situaci tak došlo k výraznému nárůstu koncentrací škodlivin v ovzduší. Jen během 4. a 5. prosince 1930 bylo v zasažené oblasti hlášeno 63 úmrtí a na 6 000 onemocnění. Z následného zkoumání příčin stojí za zmínku prognóza jednoho z členů vyšetřovací komise prof. J. Firketa z University of Liège, který napsal, že „pokud by podobné situaci musel čelit například Londýn, musely by úřady očekávat na 3200 náhlých úmrtí“ [3]. O 16 let později se tato jeho prognóza naplnila.

28. listopadu 1939 se tehdy osmisetřicetileté město St. Louis v Missouri probudilo do chladného zimního rána. Toho dne obyvatelé ale čekali na rozednění marně. Údolí bylo sevřeno jednou z nejhorších inverzních situací za uplynulé období, a kouř produkovaný spalováním bituminózního uhlí v elektrárnách, průmyslových kotelnách i domácnostech zůstával v přízemních vrstvách městské atmosféry. Pouliční osvětlení zůstalo zapnuté po celý den a automobily kvůli orientaci musely i v pravé poledne jezdit s rozsvícenými hlavními reflektory. Tento den byl později označen jako „Black Tuesday“ (Černé úterý). Ještě devět následujících dní inverze svírala údolí, až desátý den se rozptylové podmínky zlepšily a obyvatelé se mohli nadechnout relativně čistého vzduchu. Reakce odpovědných orgánů byla rychlá a relativně účinná – pro příští zimu zajistili k vytápění kvalitní uhlí (semi-anthracit) [4].



Obr 1: Pamětní deska Donora smogu

Ve dnech 27. – 30. října 1948 se tento scénář opakovale ve čtrnáctitisícovém městě Donora, nacházejícího se v Pensylvánii v údolí řeky Monongahela. Faktory byly obdobné jako v předchozím případě, situaci zhoršovaly emise fluorovodíku a oxidů síry a dusíku z nedaleké zinkové huti a z drátovny. Smogová epizoda byla ukončena deštěm 31. října 1948. Téměř polovina obyvatel města byla postižena dýchacími potížemi, 20 jich zemřelo během smogové epizody a dalších 50 do jednoho měsíce po jejím skončení. Kromě lidí byla těžce postižena i biota – v okolí Donory bylo napočítáno na 800 mrtvých těl zvířat a vegetace v okruhu půl míle okolo

zinkové huti byla zničena. Dvě pozoruhodnosti stojí v této souvislosti za zmínku. První bylo zřízení „krizového centra“ přijímajícího žádosti o lékařskou pomoc a koordinujícího práci 8 lékařů v Donoře – tím se zamezilo neefektivitě způsobené tím, že postižení s cílem dostat co nejrychleji lékařskou pomoc volali více lékařům. Druhou je aktivita místních hasičů a zejména jejich velitele Johna Volka. Zásoby kyslíku z místní hasičské stanice byly poskytnuty městské nemocnici, a po jejich vyčerpání John Volk objížděl okolní hasičské stanice a vypůjčoval kyslík, kde se dalo. Sám se kyslíku ani nedotkl; po návratu na hasičskou stanici si vždy dal sklenici whisky, načež opět usedl za volant hasičského vozu a vyrazil na další výpravu [5].

Nejproslulejší smogovou epizodou je bezpochyby „*Great Smog of '52*“, londýnská smogová epizoda odehrávající se v období 5. – 9. prosince 1952. I zde sehrály rozhodující roli meteorologické podmínky, kdy teploty klesly k nule, a nad celou jižní Anglií zavládlo netypické bezvětří. K vytápění domácností a ke spalování v průmyslových kotelnách a uhelných elektrárnách se v tehdy devítimilionovém Londýně používalo uhlí nízké kvality obsahující síru, neboť kvalitní se v poválečných letech z ekonomických důvodů exportovalo. Situaci dále zhoršilo i „moudré“ rozhodnutí o nahrazení tramvajové dopravy autobusovou, což bylo realizováno v polovině roku 1952.

Mlha v prosinci nikoho nepřekvapila, neboť v Londýně je poměrně obvyklým jevem. Ovšem na rozdíl od předchozích tato postupně tmavla a houstla a stávala se štiplavou. Viditelnost se výrazně snižovala, v třetím dni klesla až na půl metru, takže chodci nedohlédli ani na svoje vlastní nohy. Pozemní doprava postupně zpomalovala, až nakonec zůstala úplně paralyzována a fungovalo pouze metro. Smog začal pronikat i do uzavřených prostor, takže kina a divadla rušila představení, neboť na plátno nebylo možno dohlédnout a herci nemohli hrát kvůli kašli. V úterý 9. prosince 1952 se zvedl vítr a ukončil tuto smogovou epizodu. Během ní onemocnělo přes 25 000 obyvatel Londýna, z nichž na 4 000 zemřelo. Zejména byly postiženy děti a starší občané trpící nemocemi dýchacího traktu (astma, bronchitida). Do konce prosince pak na stejné choroby zemřelo dalších zhruba 8 000 pacientů [6]. Tato smogová epizoda se proto označuje jako první velká ekologická katastrofa.

Typický britský konzervatismus fungoval i v tomto případě. Čtyři roky uběhly, než se zákonodárci dohodli na změně předpisů týkajících se spalování nekvalitních paliv a vydali první zákon na ochranu ovzduší - Clean Air Act 1956.

Tuto kapitolu nelze považovat za uzavřenou – dokladem toho je například smogová epizoda, která sužovala severovýchodní Čínu od 20. do 25. října 2013, přičemž v postižené oblasti paralyzovala leteckou dopravu a vynutila si uzavření více než 2 000 škol, nebo další, která od 1. do 12. prosince 2013 postihla východní Čínu.

Velmi významnými polutanty životního prostředí jsou halogenderiváty organických sloučenin, zejména pak chlorované sloučeniny. V environmentalistické obci je populární výrok prof. Otto Hutzingera<sup>1</sup>, který prohlásil, že Bůh stvořil 90 prvků, člověk okolo 17, ale ďábel pouze jediný: chlor.

Tento prvek ukázal svoji ďábelskou podobu v první světové válce, kdy byl použit německou armádou proti spojencům u francouzského města Ypres 2. ledna 1915, a potom opět 22. dubna 1915. Tím byla zahájena éra bojových chemických látek jako zbraní hromadného ničení [7].

Je ovšem skutečností, že tentýž prvek je dnes používán k zajištění hygienické nezávadnosti pitné vody během transportu z úpraven ke spotřebiteli, a používá se rovněž k zajištění hygienické nezávadnosti vody v bazénech; zde se ale mohou projevit negativní efekty vlivem tvorby nežádoucích produktů potenciálně škodících lidskému zdraví [8].

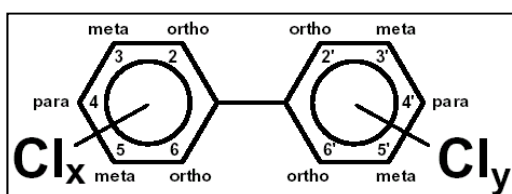
---

<sup>1</sup> Objevitel polychlorovaných dibenzo-*p*-dioxinů a furanů v emisích a polétavém prachu ze spaloven odpadů



Obr. 2: Plynový útok německé armády chlorem proti spojencům 22. dubna 1915 u Ypres

Polychlorované bifenyly jsou známy jako jedny z nejzávažnějších kontaminantů životního prostředí. Sloučeniny této skupiny byly poprvé syntetizovány v Německu roku 1881 [9].



Obr. 3: Struktura PCBs

Průmyslově začaly být vyráběny v roce 1929 v USA, ale jejich výroba se postupně rozšířila do mnoha zemí světa, tehdejší Československo nevyjímaje (výrobním závodem bylo Chemko Strážské, PCBs se zde vyráběly v období 1959 – 1984). Tyto sloučeniny vykazovaly vynikající technologické vlastnosti, takže začaly být široce využívány v uzavřených systémech jako hydraulické kapaliny ve stavebních strojích, dielektrické kapaliny

v kondenzátorech nebo jako teplotnosné kapaliny, byly přidávány do nátěrových barev, využívaly se v samopropisujících papírech, byly složkou mazacích olejů, aditiv do cementu, těsnících olejů a podobně [10]. Bohužel ty samé vlastnosti, které je činily vynikající z technologického hlediska a možnosti jejich využívání, po jejich vstupu do životního prostředí (ať již v důsledku nedbalosti, úniků při výrobě nebo při haváriích, případně při běžném používání) předurčily jejich dlouhodobé setrvání v něm, schopnost transportu na dlouhé vzdálenosti a schopnost bioakumulace, což jsou vlastnosti charakterizující persistentní organické polutanty.

Prokázání přítomnosti polychlorovaných bifenyly v životním prostředí bylo záležitostí obtížnou a časově náročnou. Roku 1964 švédský chemik Søren Jensen při analýze obsahu chlorovaných pesticidů v biotických vzorcích pomocí plynové chromatografie na náplňových kolonách s detektorem elektronového záchytu našel na chromatogramech mnohem více píků, než očekával. Při pokusu o identifikaci příslušných sloučenin analyzoval celou řadu biotických vzorků různého původu; tajemné píky byly na všech chromatogramech. Analyzoval dokonce i peří orlů z archivních vzorků z roku 1935, i zde byly neznámé látky nalezeny. Protože to bylo před zahájením masivního využívání chlorovaných pesticidů, vyloučil příbuznost s touto skupinou látek. Pozitivní identifikace bylo po dvouletém úsilí nakonec dosaženo. Søren Jensen dospěl k podezření, že se jedná o polychlorované bifenyly, od německého výrobce Bayer AG získal vzorek, analyzoval jej a našel perfektní shodu mezi chromatogramem tohoto vzorku a neznámými píky na chromatogramech vzorků bioty [11]. Po dvou letech tedy úspěšně identifikoval neznámé kontaminanty. Oč rychleji by byl daný problém vyřešen, kdyby mohl použít namísto detektoru elektronového záchytu hmotnostní spektrometr...

### 3 HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE A JEJÍ VÝZNAM V ENVIRONMENTÁLNÍ ANALÝZE

Hmotnostní spektrometrie je poměrně letitá analytická technika; byla objevena na přelomu 18. a 19. století při studiu elektrických výbojů v plynech. Za jejího objevitele je považován anglický fyzik sir Joseph John Thomson [12]. Po svém objevu až do druhé světové války byla tato technika využívána pro potřeby anorganické analýzy; její hlavní úlohou byla charakterizace nově objevených prvků včetně určení izotopické distribuce.

Období druhé světové války otevřelo hmotnostní spektrometrii dveře do oblasti analýzy organických sloučenin. Válečná mašinerie té doby se vyznačovala mimořádně vysokou spotřebou paliv na bázi ropy, nicméně chyběla analytická metoda schopná rychle posoudit kvalitu ropy nebo ropného produktu. Hmotnostní spektrometrie se v této úloze osvědčila a technika označovaná jako „strukturně typová analýza ropy“ založená na přímé (a tudíž velmi rychlé) analýze neupravovaného vzorku se v podstatě používá dodnes. V této etapě se započalo s využíváním tandemů GC/MS využívajících elektronové ionizace, které se postupně staly jedním z nejučinnějších nástrojů organické analýzy.

Zhruba v polovině šedesátých let minulého století pak hmotností spektrometrie prolomila další bariéru, kterou byla možnost ionizace pouze v plynném stavu. Objev měkkých ionizačních technik (ESI - elektrosprej, APCI - chemická ionizace za atmosférického tlaku, APPI – fotoionizace za atmosférického tlaku, MALDI – desorpce/ionizace laserem za spoluúčasti matrice) eliminoval nutnost odpaření vzorku, možnost ionizace z kapalného nebo pevného stavu pak umožnila analyzovat i látky termolabilní a vysokomolekulární. Nové ionizační techniky umožnily i relativně robustní spojení kapalinové chromatografie s hmotnostní spektrometrií. Pokles informační obsažnosti hmotnostních spekter při využití měkkých ionizačních technik, kdy spektra obsahovala pouze kvazimolekulární iont, případně další aduktové ionty, s minimem fragmentů umožňujících dedukovat strukturu analyzované sloučeniny, byl kompenzován jednak zavedením tandemové hmotnostní spektrometrie, jednak hmotnostní spektrometrie s vysokým rozlišením, umožňující na základě přesně stanovené hmotnosti iontu určit jeho sumární vzorec.

Hmotnostní spektrometrie se velice rychle stala klíčovou technikou v environmentální analýze. Její hlavní devizou na tomto poli jsou bezkonkurenčně nízké nároky na množství vzorku potřebného k analýze, a při využití elektronové ionizace i výpovědní schopnost naměřených spekter, umožňující identifikovat analyzovanou sloučeninu buď porovnáním experimentálního spektra s knihovnou, nebo interpretací hmotnostního spektra, neboť zákonitosti fragmentace menších organických molekul v podmínkách elektronové ionizace byly poměrně dobře propracovány [13].

Potenciál využití hmotnostního spektrometru jako detektoru u plynové chromatografie byl rozpoznán poměrně rychle. Plynová chromatografie jako analytická technika byla poprvé popsána roku 1952 [14], první pokusy o její spojení spadají do roku 1956, první publikace popisující tento tandem vyšla roku 1957 [15], prvním výrobcem GC/MS systémů se stala firma Finnigan Instrument Corporation, založená roku 1967 Robertem Finniganem. Její první komerční GC-MS systém, model 1015, uvedený na trh počátkem roku 1968, byl osazen kvadrupólovým analyzátořem, elektronovou ionizací a separátorem, umožňujícím práci s plynově chromatografickými náplňovými kolonami [16].

S využitím této techniky byly již v roce 1974 identifikovány vedlejší produkty desinfekce v pitné vodě, které vznikají chlorací vody přírodní s obsahem huminových látek [17]. V témže roce bylo v pitné vodě z New Orleans pomocí GC/MS identifikováno 66 organických sloučenin téhož původu [18]. O dva roky později byla pak v USA prokázána všudypřítomnost chloroformu ve vodách upravovaných chlorací, přičemž počet identifikovaných sloučenin se zvýšil z 66 na více než 1500 [19]. Klíčovou technikou i zde byla plynová chromatografie s hmotnostně spektrometrickou detekcí a s elektronovou ionizací. Nicméně byla navržena i přímá analýza

kontaminantů životního prostředí pomocí tandemové hmotnostní spektrometrie [20], využívající přímého dávkování těkavých složek neupravených vzorků (pevných nebo kapalných) přímo do iontového zdroje hmotnostního spektrometru s následnou analýzou generovaných iontů pomocí trojitého kvadrupólu. Během půl hodiny tak bylo možné stanovit více než 100 organických kontaminantů s detekčními limity řádu 10 – 100 ppb.

Spojení plynové chromatografie s hmotnostní spektrometrií bylo relativně bezproblémové, neboť vzorek byl do hmotnostního spektrometru dodáván v plynné fázi, což je ideální skupenství pro elektronovou ionizaci. Omezení této techniky na sloučeniny separovatelné plynovou chromatografií nebylo při analýze persistentních organických polutantů až tak citelné, neboť tyto sloučeniny jsou termostabilní a semivolatilní. Rozšíření oblasti zájmu i na polární a méně těkavé sloučeniny pak vyvolalo nutnost derivatizace před plynově chromatografickou analýzou nebo využití separace kapalinovou chromatografií.

Spojení kapalinové chromatografie s hmotnostně spektrometrickou detekcí bylo mnohem problematictější, a to z důvodu skupenství mobilní fáze i povahy látek touto technikou separovaných. Po dlouhé a komplikované cestě bylo nalezeno řešení ve formě sprejovacích technik za atmosférického tlaku, kterými je elektrosprej (Electrospray Ionization - ESI) [21, 22], vhodný pro analýzu organických látek mírné až vysoké polaritity, a jak bylo později objeveno, i pro vysokomolekulární látky díky schopnosti je mnohonásobně nabíjet [23], chemická ionizace za atmosférického tlaku (Atmospheric Pressure Chemical Ionization – APCI) [24] vhodná pro nepolární až středně polární látky nepříliš velké molekulové hmotnosti, a fotoionizace za atmosférického tlaku (Atmospheric Pressure Photoionization – APPI) [25] vhodné pro sloučeniny zhruba téhož rozsahu schopné absorbovat v UV oblasti. Tyto techniky umožnily uplatnění hmotnostní spektrometrie i pro typy látek zmíněné v následující kapitole.

#### 4 NOVÉ VÝZVY V OBLASTI ENVIRONMENTÁLNÍ ANALÝZY

Počet různých chemikálií provázejících lidské pokolení neustále narůstá; mnohé z nich se kromě svého původního určení stávají i kontaminanty životního prostředí. Skupina těchto nových polutantů (někdy označovaných jako emergentní) se neustále rozrůstá.

Objektem zájmů stále zůstávají polutanty, které mohou být označeny jako tradiční; sem lze zařadit:

- polycyklické aromatické uhlovodíky a jejich deriváty
- polychlorované bifenyly
- DDT a jeho metabolity spolu s dalšími organochlorovými pesticidy
- polychlorované dibenzo-*p*-dioxiny a furany
- bromované zpomalovače hoření

Klíčovou technikou v této oblasti zůstává plynová chromatografie s hmotnostně spektrometrickou detekcí; nejvýznamnějším přínosem poslední doby je využití kompletní ortogonální dvojrozměrné plynové chromatografie s hmotnostně spektrometrickou detekcí využívající elektronové ionizace a vysokorychlostním nízkorozlišovacím analyzátozem doby letu. Tento systém nabízí v porovnání s jednorozměrnou separací výrazně zvýšenou píkovou kapacitu, ještě dále umocněnou schopností dekonvoluce. Před uvedením na trh je analogický systém s vysokorychlostním vysokorozlišovacím analyzátozem doby letu, který k výše uvedeným výhodám ještě přidá možnost určení sumárního vzorce na základě přesně určené hmotnosti iontu.

Mezi nově sledované (emergentní) polutanty pak lze zařadit (příčemž tento výčet nelze považovat za vyčerpávající):

- antimon (případně i arsen a selen)
- nanomateriály

- umělá sladidla
- léčiva
- syntetické vonné látky
- perfluorované organické sloučeniny

Specifikem této skupiny látek je, že se sledují převážně ve vodních ekosystémech, hlavní cestou jejich vstupu do životního prostředí jsou odpadní vody. S přihlédnutím k vlastnostem těchto látek je zde hlavní analytickou metodou kapalinová chromatografie s hmotnostně spektrometrickou detekcí.

Objektem zájmu jsou rovněž:

- vedlejší produkty desinfekce pitné vody
- vedlejší produkty desinfekce bazénové vody
- UV-filtry v ochranných prostředcích (ochrana proti nadměrnému opálení)
- naftenické kyseliny
- chloristany
- řasové toxiny
- iontové kapaliny.

Při analýze prakticky všech výše uvedených sloučenin nebo jejich skupin hraje důležitou úlohu hmotnostní spektrometrie. O vybraných polutantech a jejich skupinách bude podrobněji pojednáno v následujícím textu.

#### 4.1 ANTIMON

Antimon (resp.  $\text{Sb}_2\text{O}_3$ ) se používá při výrobě polyethyltereftalátu jako katalyzátor a jeho koncentrace ve výsledném materiálu přesahuje  $100 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ . Při skladování balené pitné vody se antimon vyluhuje z obalu a jeho obsah v balené pitné vodě se zvyšuje. Bylo zjištěno, že v Německu zakoupená balená voda obsahovala ihned po zakoupení  $625 \text{ ng}\cdot\text{l}^{-1}$  antimonu, po 6 měsících skladování se tato hodnota zvýšila na  $1\,520 \text{ ng}\cdot\text{l}^{-1}$  [26].

Antimon vykazuje toxické účinky projevující se bolestí žaludku, průjmem, bolestmi svalů, třesem, anemickou uremií. Bylo rovněž prokázáno, že výluhy z PET lahví vykazují estrogenní aktivitu, na čemž se pravděpodobně kromě antimonu podílejí i vyluhované ftaláty [27].

Příslušné stanovení se nejčastěji provádí pomocí techniky ICP-MS, případně HPLC/ICP-MS, umožňující speciaci jak antimonu, tak i arsenu a selenu.

#### 4.2 NANOMATERIÁLY

Nanomateriály představují jedno ze žhavých témat současnosti. Jsou tvořeny částicemi velmi malých rozměrů (1 – 100 nm). Díky těmto rozměrům vykazují jedinečné vlastnosti a mají velmi široké předpokládané využití.

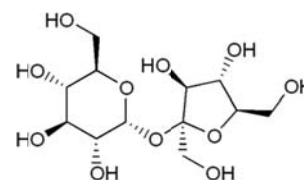
Jednou z možných aplikací nanomateriálů jsou i technologie ochrany životního prostředí – např. [28]. Nicméně nanomateriály mohou vykazovat i neblahé účinky na životní prostředí, dokladem čehož může být následující příklad:

Jednou z úspěšných aplikací nanostříbra jsou ponožky obsahující tento materiál, které eliminují zápach nohou (problém části mužské populace) na základě inhibice mikrobiální aktivity. Nicméně i tyto ponožky je zapotřebí čas od času vyprat, přičemž se část nanostříbra uvolní – bylo prokázáno, že ponožka obsahující  $1360 \mu\text{g Ag/g}$  ponožky uvolní při vyprání až  $650 \mu\text{g Ag}$  do 500 ml vody [29]. Toto nanostříbro pak je transportováno s odpadními vodami do příslušné čistírny, kde opět uplatní svoji aktivitu. Inhibice mikrobiální aktivity zde však působí neblaze, neboť snižuje účinnost biologického čištění odpadních vod.

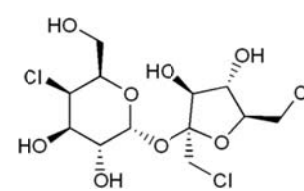
V citované publikaci [29] nebyla využita hmotnostní spektrometrie; ke stanovení obsahu uvolněného nanostříbra autoři využili membránové separace a potenciometrie s iontově selektivní elektrodou a dále skenovací a transmisní elektronovou mikroskopie doplněnou energiově dispersní rentgenfluorescenční spektrometrií. Nicméně využití hmotnostní spektrometrie (konkrétně ICP-MS) ve spojení s frakcionačním tokem v poli (Asymmetric Field-Flow Fractionation, A-FFF) pro stanovení nanostříbra ve vodných matricích již bylo popsáno [30].

### 4.3 UMĚLÁ SLADIDLA

Je s podivem, že i ze sloučenin tohoto typu se mohou stát kontaminanty životního prostředí. Příčinu snad přiblíží porovnání strukturálních vzorků sacharózy a její náhražky – umělého sladidla Sukralózy, známé též jako E955 nebo Splenda (Obr. 4 a Obr. 5). Substitucí tří hydroxylových skupin v sacharóze chlórem se ztratí schopnost utilizace této sloučeniny organismem (takže má nulový energetický obsah) a současně se zvýší sladivost zhruba 600x. Nicméně zavedením atomů chlóru do struktury vzniká persistentní organická sloučenina, která je z organismu vylučována prakticky kvantitativně v nezměněné formě, s odpadní vodou je transportována do čistíren odpadních vod, kde je velmi nedokonale eliminována (< 10 %) a poté vstupuje od povrchových vod. Její další osud není dosud detailněji objasněn.



Obr. 2: Sacharóza



Obr. 3: Sukralóza

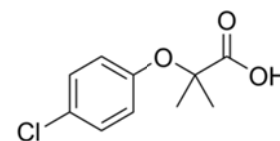
Paleta umělých sladidel, která se sledují, zahrnuje kromě již zmíněné sukralózy nejčastěji ještě acesulfam, aspartam, cyklamát, neotam, neohesperidin dihydrochalkon a samozřejmě sacharin.

Jako analytická metoda se v tomto případě využívá kapalinová chromatografie s tandemovou nebo vysokorozlišovací hmotnostní spektrometrií, iontovým zdrojem je elektrosprej a detekují se anionty [31].

### 4.4 LÉČIVA

Přítomnost léčiv v odpadních vodách je jeden z nejzávažnějších problémů v dané oblasti, jehož naléhavost vzrůstá se stoupající spotřebou léčiv lidskou populací. Tyto látky se do odpadních vod dostávají zejména po podání pacientům, neboť značná část účinné složky opouští organismus v nezměněné formě (takže si uchovává svoji aktivitu) a s odpadní vodou je transportována do čistírny odpadních vod. Jistý podíl na kontaminaci má rovněž nesprávná likvidace exspirovaných léčiv a úniky při výrobě.

První účinná látka nalezená v odpadní vodě před zhruba 30 lety byla kyselina klofibrová (Obr. 6), metabolit regulátorů lipidů, která měla poločas rozpadu ve vodním prostředí 21 let, takže byla opravdu persistentní sloučeninou [32]. V současnosti používané léky mají podstatně menší stabilitu, ale díky víceméně konstantnímu přísunu jsou jejich koncentrace ve vodním ekosystému relativně ustálené, proto se někdy označují jako pseudo-persistentní polutanty. Jejich koncentrace ve vodách se pohybují řádově v  $\text{ng.l}^{-1}$  až  $\text{mg.l}^{-1}$  [33]. Nejfrekventovanější léčiva jsou:



Obr. 4: Kyselina klofibrová

- nesteroidní protizánětlivá léčiva (ibuprofen, ketoprofen, naproxen, diclofenac, aspirin)
- antibiotika
- hormonální přípravky (zejména složky hormonální antikoncepce)
- antihypertonika
- antidepressiva
- léky upravující metabolismus

Přítomnost těchto látek v odpadní vodě může negativně působit na účinnost čistícího procesu – například antibiotika mohou „přeléčit“ aktivovaný kal v biologickém stupni čištění, takže přestane fungovat. V důsledku nedokonalé eliminace v ČOV se účinné látky dostávají do povrchových vod, kde pak v závislosti na typu léčiva mohou negativním způsobem ovlivňovat i vodní biotu – například feminizace rybí populace jako důsledek chronické expozice hormonálními prostředky [34].

Poměrně zajímavá informace z oblasti výskytu hormonálních látek v povrchových a pitných vodách byla publikována v deníku Dnes (dříve Mladá Fronta) dne 25. 7. 2012. Podle ní byla nalezena souvislost mezi expozicí hormonálními přípravky používaným v ženské antikoncepci a rakovinou prostaty. Expoziční cestou je pitná voda připravovaná z vody povrchové, do které jsou vypouštěny vyčištěné odpadní vody. To samozřejmě zvyšuje nároky na technologii úpravy pitné vody; běžně používané procesy tyto látky neodstraňují, jediným účinným způsobem jejich eliminace je adsorpce na aktivním uhlí, což je ekonomicky značně náročné.

Klíčovými analytickými technikami v této oblasti jsou plynová chromatografie s hmotnostní spektrometrií a kapalinová chromatografie s hmotnostní spektrometrií, přičemž druhá z nich je využívána častěji.

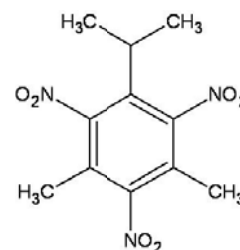
V této oblasti se rovněž relativně intenzivně angažuje jak Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí, tak i autor osobně (posledním aktivitou bylo sledování inhibitorů fosfodiesterázy typ V v odpadních vodách v Brně [35]).

#### 4.5 SYNTETICKÉ VONNÉ LÁTKY

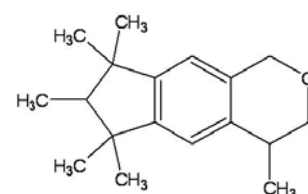
Se syntetickými vonnými látkami (někdy též označovanými jako musk sloučeniny) se setkáváme v prostředcích osobní péče a předmětech denní potřeby, jako jsou prací a čistící prostředky, avivážní prostředky osvěžovače vzduchu, krémy na ruce i jiné části těla, mýdla, parfémy, deodoranty atd. Vonné substance byly lidstvem využívány odedávna, ale původně se jednalo o prostředky živočišného nebo rostlinného původu. Se vzrůstající produkcí prostředků osobní péče však tyto zdroje přestávaly stačit, a tak nastoupila syntetická chemie. Snaha o produkci látek strukturně identických s přírodními byla brzy opuštěna ve prospěch látek s odlišnou strukturou, ale příjemnou vůní, mnohdy i výhodnějšími vlastnostmi a mnohem ekonomičtější výrobou.

První skupinu sloučenin tohoto typu tvořily tzv. nitro-musk sloučeniny, které se vyznačovaly benzenovým jádrem substituovanými nitroskupinami a dalšími skupinami (příklad viz Obr. 7). Podobnost těchto sloučenin s výbušninami (TNT) není náhodná – byly objeveny jako vedlejší produkt snahy o nalezení brizantnější výbušniny než trinitrotoluen německým chemikem Albertem Baurem v roce 1888. Pro svoje toxické účinky a nízkou fotostabilitu byly po druhé světové válce postupně nahrazovány polycyklickými musk sloučeninami, které ve své struktuře obsahují několik cyklů. Příklad (galaxolid) je uveden na Obr. 8. Nicméně po objevu negativních vlivů polycyklických musk sloučenin spočívající v narušování buněčného metabolismu byly hledány další alternativy. Těmi se staly jednak makrocyclické musk sloučeniny, které ve své struktuře mají jeden cyklus tvořený obvykle 10 – 15 atomy uhlíku (příklad – muscone – je na Obr. 9), a nejnověji lineární musk sloučeniny (Obr. 10 – helvetolid).

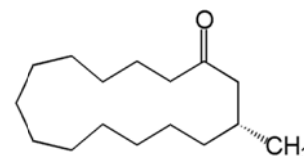
Rovněž tyto sloučeniny jsou po použití prostředku, v němž jsou obsaženy, uvolněny do odpadních vod a



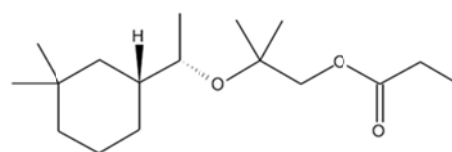
Obr. 5: Musk xylen



Obr. 6: Galaxolid



Obr. 9: Muscone



Obr. 10: Helvetolid



transportovány do ČOV, kde účinnost jejich odstranění je v některých případech (zejména u nitromusk sloučenin a polycyklických musk sloučenin) nevalná. Významný jejich podíl pak vstupuje do recipientu, kde vzhledem k jejich lipofilnímu charakteru mohou být kumulovány ve vodní biotě [36, 37].

S přihlédnutím k charakteru těchto látek je hlavní metodou jejich analýzy plynová chromatografie s hmotnostní spektrometrií.

Rovněž v této oblasti se Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí i autor těchto řádků angažuje.

#### **4.6 PERFLUOROVANÉ SLOUČENINY**

Tyto sloučeniny označované souhrnně zkratkou PFC představují poměrně nové kontaminanty životního prostředí – jsou průmyslově vyráběny od 50. let minulého století. Jejich struktura je tvořena fluorovaným alkylovým řetězcem s počtem atomů uhlíku obvykle v rozmezí 4 – 16 (buď plně fluorovaným, nebo s vloženou skupinou  $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ , pak se jedná o telomery) a hydrofilní částí.

Díky vysoké vazebné energii vazby fluoru s uhlíkem a nízké polarizovatelnosti fluoru jsou tyto sloučeniny velmi stabilní, díky slabým intermolekulárním interakcím mají poměrně nízké body varů v porovnání s uhlovodíkovými analogy a vyšší teploty tání [38].

Perfluorované sloučeniny mají poměrně široké využití. Vzhledem k jejich struktuře jsou oleofobní i hydrofobní, takže se využívají jako ochranné vrstvy tkanin, kobereců a jiných textilií, případně kožených výrobků proti nečistotám nepolárního i polárního charakteru. Rovněž jsou jimi chráněny obalové materiály (sáčky, krabičky, papírové talíře) i průmyslové obaly. Jsou i součástí pěnidel pro hašení [39]. Svoje využití našly i v technologiích jako je pokovování, fotolitografie, jsou součástí čisticích prostředků, nátěrových hmot a aditiv, hydraulických kapalin pro letecký průmysl apod.

Do životního prostředí se tyto sloučeniny dostávají v důsledku antropogenních aktivit [40]; protože mají potenciál k dálkovému transportu, byly prokázány i v místech velmi vzdálených od jejich vstupu, např. v arktických oblastech [41].

Pro analýzu těchto látek se častěji využívá spojení plynové chromatografie s hmotnostně spektrometrickou detekcí [42], méně často je využívána kapalinová chromatografie rovněž s hmotnostně spektrometrickou detekcí [43].

Rovněž tato skupina sloučenin byla předmětem studia na ÚCHTOŽP.

#### **4.7 VEDLEJŠÍ PRODUKTY DESINFEKCE BAZÉNOVÉ VODY**

Tato problematika je poměrně nová a souvisí se vzrůstající popularitou bazénů, ať již soukromých (kde naše republika patří k bazénářským velmocem) nebo veřejným. Plavání je nejen rekreační, ale často i rehabilitační aktivitou, a samozřejmě i sportovní disciplínou. Přítomnost chloru jako desinfekčního činidla ve vodě veřejných bazénů je povinná (viz vyhláška 135/2004 Sb.). Chlor sice eliminuje patogeny, ale na druhou stranu může docházet i k vedlejším reakcím s organickou hmotnou přírodního původu (v závislosti na tom, z jakého zdroje je bazén napouštěn), potenciálně přítomnými bromidy nebo jodidy a přispěvky pocházející z plavců (složky potu, slin, případně moči, částice z pokožky, vlasy, mikroorganismy, kosmetické přípravky atd.) [44].

Mezi dosud identifikované vedlejší produkty desinfekce bazénové vody lze zařadit trihalomethany, halogenoctové kyseliny, halogenaldehydy, halogenitrily, halogenované ketony, halogenitromethany, bromičnany, halogenamidy, halogenalkoholy, nitrosaminy a 3-chlor-4-(dichlormethyl)-5-hydroxy-2(5H)furanon a jeho homology [45]. Rovněž byly nalezeny chloraminy. Řada těchto látek (zejména obsahujících dusík) vykazuje vyšší cytotoxicitu a genotoxicitu než trihalomethany.

Jeví se, že kvalita vody napouštěné do bazénu, typ a dávkování desinfekčního činidla a příspěvek od plavců jsou hlavními faktory, které ovlivňují tvorbu vedlejších produktů desinfekce bazénové vody. Vhodnější je voda s menším obsahem organické hmoty přírodního původu, nicméně pokud není k dispozici, stojí za úvahu její úprava ještě před napuštěním do bazénu. Pak je možné snížit dávkování desinfekčního činidla. Příspěvek od plavců je hlavně v oblasti látek obsahujících dusík, a tyto jsou uvolňovány hlavně v prvních minutách po namočení. Proto je vhodné intenzivní sprchování před vstupem do bazénu a co nejmenší prodleva mezi ukončením sprchování a vstupem do bazénu [8]. Nicméně lze konstatovat, že i v této oblasti je více otazníků než dosud známých odpovědí.

## 5 PERSPEKTIVY A VÝHLEDY

Již bylo zmíněno specifikum environmentální problematiky: Tato se týká všech příslušníků rodu *Homo Sapiens*, ať chtějí nebo nechtějí, ať si to uvědomují nebo tuto skutečnost ignorují. Pouze kvalitní životní prostředí je zárukou produkce bezpečných potravin, vytváří základ pro navrhování nových materiálů, ale je podmínkou pro zachování lidstva jako živočišného druhu. Člověk se prohlásil za pána tvorstva; tím ale vzal na sebe zodpovědnost za zachování druhové diverzity na Zemi. Člověk přetváří přírodu k obrazu svému; leč obraz ten je často žalostný.

Oblast chemie a technologie ochrany životního prostředí je – jak vyplývá z předchozího – jednak velmi potřebnou specializací, ale na druhou stranu je mimořádně komplikovaná svou multidisciplinaritou, vyžadující úzkou spolupráci vyvážených týmů složených ze specialistů z různých oblastí chemie, doplněných o biochemiky, fyziky, informatiky, geografy, hydrobiology, ekotoxikology....

Analytická chemie vytváří základní předpoklad jak pro sledování stavu životního prostředí, tak i pro ověření účinnosti různých technologických postupů a nápravných opatření. Při komplexnosti environmentálních matric, které jsou běžně analyzovány, vyžaduje tato disciplína samozřejmě vysokou erudici příslušných specialistů, ale i dostatečně kvalitní instrumentaci. I Paganiniho lze hrát na housle z bazaru, ale výsledek bude neradostný.

Oblast technologie ochrany životního prostředí by měla být na ÚCHTOŽP orientována zejména na problematiku úpravy pitné vody a na technologie čištění vod odpadních. Voda jako základní podmínka života se v následujícím období může stát nedostatkovou surovinou, i když nám to v současnosti vůbec nepřijde na mysl, a tak spokojeně splachujeme toalety kvalitní pitnou vodou... V nepříliš vzdálené budoucnosti lze očekávat narůstající poptávku po efektivnějších technologiích pro úpravu dostatečně kvalitní pitné vody a pro udržení této kvality i při zhoršování jakosti vstupní suroviny. Zde by se kromě ozonizace a adsorpce na aktivním uhlí mohly uplatnit další technologie založené například na využití nanomateriálů; pokusy v tomto směru již byly provedeny a výsledky jsou slibné. Další možnost by mohly nabídnout membránové separace.

Oblast technologie čištění odpadních vod je další významnou tematikou. Jak bylo naznačeno v předchozím textu, standardně využívané technologie založené na mechanickém čištění v prvním stupni a na biologickém čištění pomocí aktivovaného kalu ve stupni druhém jsou schopny odstranit většinu znečišťujících složek, ale u tzv. mikropolutantů je jejich účinnost často diskutabilní, a v některých případech mohou mikropolutanty inhibovat účinnost aktivovaného kalu. Opět je zde prostor pro inovace, jako například ozonizace nebo jiné technologie patřící do skupiny pokročilých oxidačních procesů (AOP – Advanced Oxidation Processes), rozklad pomocí UV záření za katalýzy například  $\text{TiO}_2$ , případně dočištění pomocí membránové separace. Na pořad zřejmě přijde otázka, zdali je výhodné provozovat mamutí čistírny sbírající odpadní vody různého původu z rozsáhlé oblasti, které se vyznačují relativně vysokou energetickou náročností, nebo spíše malé čistírky optimalizované pro odpadní vody určitého druhu, což by umožnilo snížit energetickou náročnost a díky zmíněné optimalizaci zvýšit účinnost čistícího procesu. Zlepšení lze

očekávat i v oblasti energetického využití kalu, který se v současnosti využívá k produkci bioplynu, a dále jako hnojivo v zemědělství. Za úvahu by stálo i materiálové využití hmoty izolované z odpadní vody během procesu čištění.

Nedílnou součástí technologie ochrany životního prostředí je i odpadový management. V současnosti příliš mnoho odpadu končí na skládkách, takže cílem v této oblasti by měla být jeho maximální recyklace a znovuvyužití. Jedním z důležitých předpokladů je zde důkladné a důsledné třídění odpadu produkovaného v domácnostech, které se rozvíjí, ale k dokonalosti má ještě daleko. Není to totiž pouze otázka technického charakteru, neboli umístění příslušných kontejnerů na vhodné místo, ale je zapotřebí aby obyvatelstvo akceptovalo nutnost roztříděný odpad do těchto kontejnerů ukládat. Je to tedy otázka výchovy (nesprávně označované jako ekologická), a v této oblasti jsou ještě značné rezervy. Například v Německu ekologická výchova začíná už v mateřských školkách, a pak pokračuje v průběhu celého vzdělávacího systému [46], což ve spojení s proslulou německou precizností přináší ovoce, zatímco v našich podmínkách tento aspekt má ještě daleko k dokonalosti.

Ve vzdělávacím procesu by se výše uvedené aspekty měly odrazit zejména ve zdůraznění ekologického aspektu, a to ve všech oborech na FCH VUT v Brně, kde by měly být zohledněny zásady zelené chemie, případně zelené analytické chemie, přičemž by se vzhledem k charakteru pracoviště nemuselo jednat jen o pouhou aplikaci těchto zásad. V oblasti odpadového managementu by bylo žádoucí celofakultně vést k důslednému dodržování odpadové hierarchie ve formě: Předcházení → minimalizace → znovuvyužití → recyklace/kompostování → energetické využití → skládkování.

Zdůraznění aspektu nových technologií by se mělo odrazit ve výuce na ÚCHTOŽP, a to zejména průběžnou modernizací přednášek, ale hlavně praktických cvičení. Zde by stálo za úvahu kromě aktualizace laboratorních úloh a témat výpočtových cvičení zařadit i úlohy prováděné přímo v předmětných zařízeních – ať již na úpravkách pitných vod nebo na čistírnách odpadních vod.

Poměrně důležitou aplikací v oblasti ochrany životního prostředí jsou i remediační technologie, které se v ČR v podstatě využívají až v posledních dvou desetiletích a slouží převážně k odstranění starých ekologických zátěží. Jejich zařazení do výuky by bylo rovněž namístě, neboť v této oblasti lze očekávat postupně se zvyšující zájem o odborníky.

## 6 CITOVANÁ LITERATURA

- [1] Lovelock J.E.: *Gaia - the World as Living Organism*. New Scientist, 1986, vol. 112, pp. 25-28.
- [2] Lovelock J.E.: *Gaia as seen through atmosphere*. Atmospheric Environment, 1972, vol. 6, pp. 579-&.
- [3] Firket J.: *Fog along the Meuse Valley*. Trans Faraday Soc, 1936, vol. 32, pp. 1192-1197.
- [4] Tucker R.R.: *Smoke prevention in St. Louis*. Ind Eng Chem, 1941, vol. 33, pp. 836-839.
- [5] Mills C.A. Donora Smog Held Near Catastrophe; Expert Asserts Slightly Higher Concentration Would Have Depopulated Community. The New York Times. Cincinnati 1948.
- [6] Davis D.L., Bell M.L., Fletcher T.: *A look back at the London smog of 1952 and the half century since*. Environmental Health Perspectives, 2002, vol. 110, pp. A734-A735.
- [7] Aksulu N.M.: *Die Feldpostbriefe Karl v. Zinglers aus dem Ersten Weltkrieg*. Nobilitas, Zeitschrift für deutsche Adelsforschung, 1915, vol. 9, pp. 55-69.
- [8] Chowdhury S., Alhooshani K., Karanfil T.: *Disinfection byproducts in swimming pool: Occurrences, implications and future needs*. Water Research, 2014, vol. 53, pp. 68-109.
- [9] Schmidt H., Schultz G.: *Über Diphenylbasen*. Annalen Chem, 1881, vol. 207, pp. 338-344.
- [10] Dobson S., van Esch G.J. ed.: *Polychlorinated biphenyls and terphenyls*. Geneva: World Health Organization, 1993 pp
- [11] Jensen S.: *Report of a new chemical hazard*. New Scientist, 1966, vol. 32, pp. 612.
- [12] Thompson J.J.: *Rays of Positive Electricity and their Application to Chemical Analysis*. London: Longmans, Green and Co. Ltd., 1913s.
- [13] McLafferty F.W., Tureček F.: *Interpretation of mass spectra*. Sausalito, CA, USA: University Science Books, 1993s.
- [14] James A.T., Martin A.J.P.: *Gas-liquid partition chromatography - a technique for the analysis of volatile materials*. Analytical Chemistry, 1952, vol. 24, pp. 1522-1522.
- [15] Holmes J.C., Morrell F.A.: *Oscillographic Mass Spectrometric Monitoring of Gas Chromatography*. Applied Spectroscopy, 1957, vol. 11, pp. 86-87.
- [16] Finnigan R.: *GC/MS/Computer system: Myth or reality?* Analytical Chemistry, 1970, vol. 42, pp. 169A.
- [17] Rook J.J.: *Formation of Haloforms During Chlorination of Natural Waters*. Water Treatment and Examination, 1974, vol. 23, pp. 234-243.
- [18] EPA U. U.S. Environmental Protection Agency, Draft Analytical Report - New Orleans Area Water Supply Study, EPA-906/10-74-002, 1974.
- [19] Keith L.H., Garrison A.W., Allen F.R., Carter M.H., Floyd T.L., Pope J.D., Thruston A.D.J.: In: Keith LD, editor. Identification and Analysis of Organic Pollutants in Water. Ann Arbor, MI 1976. p. 329-373.
- [20] Hunt D.F., Shabanowitz J., Harvey T.M., Coates M.: *Scheme for the direct analysis of organics in the environment by tandem mass spectrometry*. Analytical Chemistry, 1985, vol. 57, pp. 525-537.

- [21] Alexandrov M.L., Gall L.N., Krasnov V.N., Nikolaev V.I., Pavlenko V.A., Shkurov V.A.: *Ion extraction form solutions at atmospheric pressure - a method for mass-spectrometric analysis of bioorganic substances*. Dokl Akad Nauk SSSR, 1984, vol. 277, pp. 379-384.
- [22] Yamashita M., Fenn J.B.: *Electrospray ion-source - another variation on the free-jet theme*. Journal of Physical Chemistry, 1984, vol. 88, pp. 4451-4459.
- [23] Fenn J.B., Mann M., Meng C.K., Wong S.F., Whitehouse C.M.: *Electrospray Ionization for Mass-Spectrometry of Large Biomolecules*. Science, 1989, vol. 246, pp. 64-71.
- [24] Carroll D.I., Dzidic I., Stillwell R.N., Haegele K.D., Horning E.C.: *Atmospheric Pressure Ionization Mass Spectrometry: Corona Discharge Ion Source for Use in Liquid Chromatograph - Mass Spectrometer - Computer Analytical System*. Analytical Chemistry, 1975, vol. 47, pp. 2369.
- [25] Robb D.B., Covey T.R., Bruins A.P.: *Atmospheric pressure photoionisation: An ionization method for liquid chromatography-mass spectrometry*. Analytical Chemistry, 2000, vol. 72, pp. 3653-3659.
- [26] Shotyky W., Krachler M.: *Contamination of bottled waters with antimony leaching from polyethylene terephthalate (PET) increases upon storage*. Environmental Science & Technology, 2007, vol. 41, pp. 1560-1563.
- [27] Sax L.: *Polyethylene terephthalate may yield endocrine disruptors*. Environmental Health Perspectives, 2010, vol. 118, pp. 445-448.
- [28] Ghasemzadeh G., Momenpour M., Omid F., Hosseini M.R., Ahani M., Barzegari A.: *Applications of nanomaterials in water treatment and environmental remediation*. Frontiers of Environmental Science & Engineering, 2014, vol. 8, pp. 471-482.
- [29] Benn T.M., Westerhoff P.: *Nanoparticle silver released into water from commercially available sock fabrics*. Environmental Science & Technology, 2008, vol. 42, pp. 4133-4139.
- [30] Geiss O., Cascio C., Gilliland D., Franchini F., Barrero-Moreno J.: *Size and mass determination of silver nanoparticles in an aqueous matrix using asymmetric flow field flow fractionation coupled to inductively coupled plasma mass spectrometer and ultraviolet-visible detectors*. Journal of Chromatography A, 2013, vol. 1321, pp. 100-108.
- [31] Lange F.T., Scheurer M., Brauch H.-J.: *Artificial sweeteners-a recently recognized class of emerging environmental contaminants: a review*. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2012, vol. 403, pp. 2503-2518.
- [32] Daughton C.G., Ternes T.A.: *Pharmaceuticals and personal care products in the environment: agents of subtle change?* Environ Health Perspect, 1999, vol. 107 Suppl 6, pp. 907-938.
- [33] Trapido M., Epold I., Bolobajev J., Dulova N.: *Emerging micropollutants in water/wastewater: growing demand on removal technologies*. Environmental Science and Pollution Research, 2014, vol. 21, pp. 12217-12222.
- [34] Lindberg R.H., Ostman M., Olofsson U., Grabic R., Fick J.: *Occurrence and behaviour of 105 active pharmaceutical ingredients in sewage waters of a municipal sewer collection system*. Water Research, 2014, vol. 58, pp. 221-229.
- [35] Smutná M., Hejsková Pekárková M., Čáslavský J., Vávrová M.: *Determination of the presence of phosphodiesterase inhibitors in municipal wastewater*. EMEC15 - The 15th European Meeting on Environmental Chemistry, Brno:Brno University of Technology, pp.

- [36] Rimkus G.G.: *Polycyclic musk fragrances in the aquatic environment*. Toxicol Lett, 1999, vol. 111, pp. 37-56.
- [37] Swift K.A.D.: *Current Topics in Flavours and Fragrances*. Netherlands: Kluwer Academic Publishers, 1999s.
- [38] 3M. The science of organic fluorochemistry. In: 3M, editor.1999.
- [39] Moody C.A., Field J.A.: *Perfluorinated surfactants and the environmental implications of their use in fire-fighting foams*. Environmental Science & Technology, 2000, vol. 34, pp. 3864-3870.
- [40] Prevedouros K., Cousins I.T., Buck R.C., Korzeniowski S.H.: *Sources, fate and transport of perfluorocarboxylates*. Environmental Science & Technology, 2006, vol. 40, pp. 32-44.
- [41] Giesy J.P., Kannan K.: *Global distribution of perfluorooctane sulfonate in wildlife*. Environmental Science & Technology, 2001, vol. 35, pp. 1339-1342.
- [42] Strynar M.J., Lindstrom A.B.: *Perfluorinated compounds in house dust from Ohio and North Carolina, USA*. Environmental Science & Technology, 2008, vol. 42, pp. 3751-3756.
- [43] Kato K., Calafat A.M., Needham L.L.: *Polyfluoroalkyl chemicals in house dust*. Environmental Research, 2009, vol. 109, pp. 518-523.
- [44] Lian L., Yue E., Li J., Blatchley E.R., III: *Volatile Disinfection Byproducts Resulting from Chlorination of Uric Acid: Implications for Swimming Pools*. Environmental Science & Technology, 2014, vol. 48, pp. 3210-3217.
- [45] Richardson S.D., DeMarini D.M., Kogevinas M., Fernandez P., Marco E., Lourencetti C., Balleste C., Heederik D., Meliefste K., McKague A.B., Marcos R., Font-Ribera L., Grimalt J.O., Villanueva C.M.: *What's in the Pool? A Comprehensive Identification of Disinfection By-products and Assessment of Mutagenicity of Chlorinated and Brominated Swimming Pool Water*. Environmental Health Perspectives, 2010, vol. 118, pp. 1523-1530.
- [46] Schwarzbauer J. Environmental education during school attendance. Personal communication, 2012.

## **ABSTRAKT**

Předkládaná práce uvádí některé zajímavé události z historie týkající se stavu a vývoje životního prostředí a antropogenních aktivit, které se na těchto událostech podílely nebo je přímo způsobily, s cílem zdůraznit nezbytnost ekologického chování jedince i celé společnosti. V další části se věnuje jedné z nejdůležitějších analytických metod sloužících k poznání stavu životního prostředí – hmotnostní spektrometrii. Na to navazuje přehled problémů, které v současnosti vyvstávají k řešení v oblasti technologie ochrany životního prostředí a ke kterým analytická chemie musí poskytnout relevantní informace. V závěrečné části jsou pak prezentovány názory autora na budoucnost chemie a technologie ochrany životního prostředí, a to jak v oblasti výuky, tak i v praktických aplikacích.

## **ABSTRACT**

The presented work describes selected interesting events from the history of the state and development of the environment and anthropogenic activities that contributed to these events or directly caused them, in order to emphasize the importance of ecological behaviour of individuals and society. The next section deals with one of the most important analytical methods used to evaluate the state of the environment - mass spectrometry. This is followed by an overview of the problems that currently arise for solutions in environmental technology and analytical chemistry is expected to provide the relevant information in this field. The final section then presents the author's views on the future of chemistry and technology of environmental protection, both in teaching and in practical applications.