

Názov práce: **Štúdium speciácie vo vodných roztokoch pomocou spektroskopických metód**

Autor: Jakub Kuba

Odbor: Jaderně chemické inženýrství

Druh práce: Bakalárska práca

Vedúci práce: Mgr. Aleš Vetešník, Ph.D., Katedra jaderné chemie,
FJFI ČVUT v Praze, Centum pro radiochemii a radiační chemii

Konzultant: Ing. Mgr. Jakub Višňák, Katedra jaderné chemie,
FJFI ČVUT v Praze

Abstrakt: Práca sa zaoberá štúdiom speciácie uranyl sulfátových komplexov a určení ich konštant stability, na základe použitia spektroskopických metód. Metodika určenia týchto konštant spočívala vo vykonaní štyroch sérií spektrálnych meraní. Jednotlivé kroky spektrálnych sérií boli pripravované titračne, vždy z predchádzajúceho kroku spektrálnej série. Z dôvodu, že uranylový ión udáva žltú farbu roztoku, bola ako inštrumentálne vhodná metóda vybraná spektrometria v UV/VIS oblasti. Tento výber bol podložený aj dostatkom literatúry a článkov zaoberajúcich sa podobným alebo rovnakým problémom a metodikou. V týchto publikáciách boli konštanty stability nami študovaných spécií určené v značnom rozptylom. Je tomu tak z dôvodu vysokej závislosti určenia týchto konštant na experimentálnych podmienkach.

Ďalším z cieľov práce bolo štúdium vplyvu času na výstupný signál. Metodika spočívala v meraní spektier po rôznych dobách od pridania titračného činidla. Výsledkom bolo, že táto doba nemá preukázateľný vplyv na výstupný signál. Tento záver bol formulovaný na základe integrovaných signálov jednotlivých spektrálnych sérií.

Druhým cieľom bolo overenie hypotézy o zmene dentátnosti komplexov - ich degradácii v čase. V rámci nami sledovanej doby 5 dní sme túto zmenu nepozorovali. Na formulovanie tohto záveru bola použitá metodika merania vybraných krokov dvoch spektrálnych sérií po niekoľkých dňoch od ich prípravy. Na základe dát získaných pri týchto meraniach bolo taktiež sledované, či čas od prídavku titračného činidla po naplnenie kyviet je dostatočný na ustanovenie chemickej rovnováhy, čo bolo potvrdené. Práca má taktiež teoretický význam, pretože v nej boli zhromaždené a ucelené poznatky pojednávajúce o chémii uránu, spektrometrii a základoch faktorovej analýzy.

Kľúčové slová: Uranyl; Sulfát; Spektroskopia, UV / VIS; Faktorová analýza

Title: **Study of speciation in aqueous solutions by the means of spectroscopic methods**

Author: Jakub Kuba

Field of study: Nuclear Chemical Engineering

Type of thesis: Bachelor degree project

Supervisor: Mgr. Aleš Vetešník, Ph.D.
Department of Nuclear Chemistry, FNSPE, CTU in Prague

Consultant: Ing. Mgr. Jakub Višňák
Department of Nuclear Chemistry, FNSPE, CTU in Prague

Abstract: This project concerns the study of speciation of uranyl sulfate complexes and their stability constant determination, based on the use of the spectroscopic methods. The Determination of these constants revolves around the execution of four spectral measurements series. The preparation of the individual steps of spectral series was performed on the basis of titration, allways from the previous step of the spectral sequence. The UV/VIS spectroscopy method was chosen due to the fact that the uranyl ion provides yellow color of the solution. This method was also chosen because of the fact, that there is sufficient ammount of literature concerning this topic. In these publications, the constants of stability were determined in rather large range due to the fact, that the values of constants depend highly on the experimental conditions.

Another goal of this project was the study of infulence of time on output signal. Method in this study was based on the use of different time periods that pased since the addition of sulfate, until the filling of spectroscopic cells. This experiment showed that there is no significant influence of time periods on output signals.

Another part of this project was trying to confirm the hypothesis concerning change in dentate-isomery of complexes - their degradation over time. In the range of 5 days this hypothesis was not confirmed. The conclusion was based on the measurement of chosen steps of two spectral series after several days since their preparation. Based on data obtained in these measurements we can declare that the time that passed since the addition of sulfate into solution until the filling of cells is sufficient for the establishment of chemical equilibrium.

This project has also theortical value, because it sums up knowledge about chemistry of uranium, spectroscopy and basics of factor analysis.

Keywords: Uranyl; Sulfate; Spektroskopy, UV / VIS; Factor analysis