

GAČR 2025: Willi Pabst a jeho tým zpřesňují metody určování skelné fáze v materiálech

11.3.2025 - | Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Jak byste v několika větách popsal/a laikovi o čem váš projekt je a proč je důležitý?

Jak vyplývá z názvu, jedná se o projekt, jehož středem zájmu je určení skelné fáze, přesněji řečeno amorfní fáze, primárně jejího množství, ale také jejího složení, v silikátové keramice a v žáromateriálech. Nejdůležitější metoda k tomuto účelu je rentgenová difrakce (XRD), která se běžně používá pro charakterizaci krystalických fází. Kvantitativní určení obsahu skelné fáze pomocí XRD je mnohem složitější než u krystalických fází a domnívám se, že mnoho autorů, kteří nekriticky spoléhají na učebnicové postupy, ji nedělá dost přesně na to, aby se daly tyto výsledky používat v dalších výpočtech, konkrétně pro predikci vlastností (u nás především elastických a termofyzikálních), což je našim hlavním cílem. Pokud toto není zaručeno, je údaj o skelné fázi pouze optické zkrášlení článků, ale v podstatě nepoužitelné, stejně jako tomografický 3D obraz mikrostruktury má v podstatě pouze estetickou hodnotu, pokud nejste schopni na jeho základě predikovat efektivní vlastnosti daného materiálu. Tento fakt je naznačen v druhé polovině názvu projektu.

Co vás inspirovalo k výběru tématu? Byla to konkrétní výzva, kterou jste chtěli řešit, nebo spíše přirozené pokračování vaší dosavadní práce?

Je to pokračování dosavadní práce. Lze dokonce říct, že se jedná v jistém smyslu o poslední kousek v puzzle, který nám v této konkrétní oblasti našeho výzkumu ještě chybí. V rámci tohoto výzkumu jsme nejdříve (před více než 20 lety) kriticky pročešali literaturu o analytických predikcích efektivních vlastností, kde jsme našli spoustu zcela zásadních chyb ve vědecké tradici a běžné výuce, což je pak pro studenty zbytečný balast. Pak jsme se intenzivně zabývali obrazovou analýzou na základě stereologie, která je samozřejmě nezbytná pro kvantitativní charakterizaci mikrostruktury (včetně tomografických 3D obrázků). V posledních 10 letech jsme se navíc intenzivně věnovali numerickému modelování, tj. predikci efektivních vlastností materiálů v případech, kdy analytická řešení nejsou k dispozici. Jediné, na co jsme se dosud spoléhali, byla fázová analýza. To musíte chápat v tom smyslu, že někde se musí začít, tzn. jako pracovní hypotéza. Teď chceme i tuto naši dosavadní pracovní hypotézu ověřit trochu hlouběji a podívat se na to, do jaké míry lze fázové analýze od jiných autorů nebo z jiných pracovišť opravdu věřit i kvantitativně. Nepochybují o tom, že objevíme spoustu nesrovnalostí i v dnešní literatuře a doufám, že se nám podaří i v této oblasti poukázat na chyby a bourat některé mýty ve vědecké tradici. Zatím se nám to mnohokrát podařilo v oblastech, do kterých jsme se podívali trochu hlouběji.

Co je hlavním cílem vašeho výzkumu?

Hlavním cílem našeho výzkumu (pokud zde mluvíme výlučně o tomto projektu) je, za použití vícemetodového přístupu, tj. kombinací různých metod a výpočtů (jakých, to zatím neprozradím), postavit určení skelné fáze na tak pevné základy, že může opravdu sloužit k predikci vlastností materiálů, které obsahují vedle krystalických fází právě také skelnou fázi. Pokud se to podaří, objeví se poznatky tohoto projektu samozřejmě také ve výuce, kde považuji za důležité studentům sdělit, že ne vše, co se dozví z učebnic a z impaktovaných časopisů, je správné. Jsem přesvědčen, že nejlepší studenti – a o ně by mělo jít na univerzitě především – to dokáží ocenit.

Co myslíte, že porotu zaujalo nejvíce?

Nemám tušení. Snad pouze to, že jsem sestavil tým, který se skládá kromě ze zkušených matadorů (Eva Gregorová, Petr Bezdička) z opravdu špičkových doktorandů a post-doců, kteří se řadí k nejlepším na VŠCHT. V tomto grantu jsou klíčovými členy především Petra Šimonová a Lucie Kotrbová (vedle tak zvučných jmen v oboru jaká jsou Tereza Unger Uhlířová, Vojtěch Nečina a Soňa Hříbalová, nositelka stipendia Fulbright-Masaryk).

Přinese projekt nějaké konkrétní aplikace nebo technologie?

Jak se to vezme. Aplikace a technologie přicházejí a odcházejí. Přímé aplikace v oblasti energetiky nebo obrany státu neočekávejte. V dnešní době končící globalizace je navíc důležité provádět tento skutečně relevantní aplikovaný výzkum mimo projekty, které si vyžadují víc a víc „otevřené vědy“. V tomto projektu se proto držím původního poslání grantové agentury, kterým je základní výzkum. Tento projekt je pro mě především příležitostí pronikat poněkud hlouběji do oblasti, která mě jako vystudovaného mineraloga a krystalografa přirozeně zajímá. Bezprostředně budeme postupy vypracované v tomto projektu GAČR aplikovat pro materiály, které v současnosti systematicky zkoumáme v rámci projektu OP JAK MATUR, tzn. žárovzdorné materiály pro ukládání tepelné energie. Doufám ale, že budeme mít štěstí (jako u většiny předchozích projektů) a objevíme něco zásadního. Snad dokážeme navrhnout alternativní nebo doplňující postupy, které jsou více méně univerzálně aplikovatelné a mohou se pak stát součástí moderního výzkumu a modernizované výuky v této oblasti. Mou nadějí je tedy, že metodika vypracovaná v tomto projektu bude mít tak univerzální charakter, že může sloužit všem vědcům a inženýrům, kteří potřebují skutečně seriózní a spolehlivé kvantitativní informace o obsahu skelné fáze.

V čem je váš projekt unikátní?

Možná komplexnost našeho projektu. Na světě je mnoha skupin, které se zabývají rentgenovou difrakcí a určením skelné fáze. To je fajn, a od nich se budeme samozřejmě také učit. Nicméně, domnívám se, že málo skupin na světě dělá tak komplexní výzkum, že využívá získané výsledky určení skelné fáze k predikci efektivních vlastností vícefázových materiálů. Právě v tomto kontextu by se měly tyto výsledky ale osvědčit. Unikátnost projektu rozhodně není v oblasti přístrojů. Na unikátní přístroje nemáme bohužel peníze. Tento projekt je proto výlučně založen na kritickém myšlení, na know-how se špetkou odvahy a na pracovitosti členů týmu. Metodika vypracovaná v tomto projektu má být tak obecná, že je aplikovatelná pro každého vědce a inženýra zabývajících se rentgenovou difrakcí, bez ohledu na to, zda pracuje na synchrotronu nebo na nejlevnějším laboratorním difraktometru. Zároveň má upozornit vědce a inženýry zabývajících se predikcí vlastností na to, že skelná fáze může mít rozhodující vliv.

S kým na projektu spolupracujete?

S jedním z největších českých expertů v oblasti rentgenové difrakce, Petrem Bezdičkou (UACH, AVČR). Cením se jeho nadšení, pečlivosti a ochoty vyzkoušet nové věci.

Jaké překážky nebo výzvy očekáváte během realizace projektu? Máte už strategii, jak je překonat?

Je to bezesporu projekt plný výzev a potenciálních překážek. Základní strategie je taková, že začneme u jednoduchých, dvoufázových, soustav a postupně se dopracujeme k složitějším, vícefázovým. Nemohu samozřejmě předem slíbit úplně nové objevy, ale jsem optimistický, že posuneme spolehlivost výsledků XRD v této oblasti o něco dál, což pomůže pak všem. Jedině odchod klíčových členů týmu, především doktorandek Petry Šimonové nebo Lucie Kotrbové, může být pro projekt fatální, protože popravdě řečeno, průměrný doktorand, který si pouze osvojil vědeckou tradici a zavedené postupy, by tuto práci těžko zvládl. K tomu patří nejen pečlivost ale i kritické

myšlení, což je důvod, proč jsem nikdy nevzal doktoranda, kterého neznám od bakalářského studia. Kdo tuhle průpravu nemá, těžko by se orientoval v takovém projektu. To se nedá dohnat, na to žádnou strategii nemám.

Co vám dělá na projektu největší radost?

To, že mohu dát příležitost svým doktorandkám Petře Šimonové a Lucii Kotrbové a prokázat jejich schopnosti, kterých si velice vážím. Nikdy jsem neměl lepší tým. Projekt samotný je pro mě jako vystudovaného mineraloga / krystalografa samozřejmě srdcovou záležitostí. Vracím se ke kořenům. Zatím jsem na to nikdy neměl čas, ale to je asi vedlejší.

Co by teoreticky mělo navazovat na váš výzkum až projekt skončí?

Pokud se nám podaří vypracovat spolehlivý postup k určení skelné fáze ve vícefázových materiálech, popř. navrhnout nové postupy, pak bychom novou metodologii pochopitelně aplikovali v budoucnu na všechny naše materiály v následujících projektech. Podobně jsme to dělali s obecně platnými výsledky u všech našich předchozích projektů (nové analytické predikce, nové numerické predikce, nové postupy v obrazové analýze atd.), které dnes standardně používáme v našem výzkumu (právě protože jsou obecně platné, a ne pouze pro jeden specifický materiál). Připomínám, že se jedná v této oblasti pro nás o poslední kousek do puzzle. Tzn. pokud budeme schopni spolehlivěji určit obsah a složení skelné fáze (vedle krystalických fází), budeme schopni ještě lépe predikovat např. elastické vlastnosti a tepelnou vodivost na základě fázového složení a mikrostruktury (včetně pórovitosti). Předpokládám, že výsledky projektu budou pak i součástí výuky mého magisterského předmětu Charakterizace částic a mikrostruktur. Podle mého názoru je důležité, aby si studenti z přednášek odnesli to, že u nás se naučí něco, co se jinde nedozví.

<https://www.vscht.cz/popularizace/rozhovory/willi-pabst-gacr-2025>