

Technická 3058/10
616 00 Brno
Česká republika

Prof. RNDr. Libuše Trnková, CSc.
trnkova@vut.cz
<https://www.ute.fekt.vut.cz/>

Oponentský posudek na habilitační práci

Autor: *Mgr. Táňa Sebechlebská, Ph.D.*, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Slovensko

Název práce: **Aditivna výroba elektrochemických systémov: *in situ* charakterizácia a aplikácie**

Oponent: *Prof. RNDr. Libuše Trnková, CSc.*, Ústav elektrotechnologie, FEKT, VUT Brno, Česká republika

Aktuálnost tématu

Předložená habilitační práce (HP) doktorky Táni Sebechlebské se zabývá aktuální a dynamicky se rozvíjející oblastí aditivní výroby (Additive Manufacturing – AM) elektrochemických systémů a představuje významný příspěvek k rozvoji moderní elektrochemie, fyzikální chemie a materiálového inženýrství. Práce zahrnuje jak návrh a realizaci funkčních 3D tištěných elektrochemických komponent, tak jejich experimentální charakterizaci a pokročilé numerické modelování, čímž vytváří ucelený a metodologicky konzistentní celek.

Téma HP je významně aktuální, neboť aditivní výroba, zejména ve formě 3D tisku, v posledních dvou až třech desetiletích pronikla do celé řady oborů. Uplatnění nachází všude tam, kde přináší výhody z hlediska nákladové efektivity, flexibility návrhu a rychlosti výroby. Výrazný rozmach lze pozorovat v průmyslové i spotřební výrobě, v medicíně (včetně stomatologie), v dopravě, stavebnictví i ve výzkumných aplikacích. Právě do této oblasti nepochybně patří také výzkum elektrochemických systémů.

Elektrické vodivé kompozity využívané v 3D tištěných komponentech představují velmi atraktivní výzkumnou a aplikační doménu. Nacházejí uplatnění v oblasti senzorů a biosenzorů, baterií, superkondenzátorů, mikrofluidních systémů a různých elektrochemických zařízení. Perspektivy dalšího vývoje v této oblasti jsou rozsáhlé a slibné. Vyžadují úzkou integraci materiálových věd, fyziky, fyzikální chemie, elektrochemie a biochemie, neboť klíčovými výzvami zůstává: (i) predikce vlastností materiálů a zařízení pomocí modelování a simulací (multiscale modeling), (ii) hlubší porozumění chemickým a fyzikálním procesům probíhajících během samotného tisku i během následného zpracování, včetně aktivace elektrodových povrchů, (iii) schopnost překonávat materiálová, elektrochemická a biochemická omezení, (iv) zavedení mezinárodních standardů a certifikačních postupů a (v) škálování laboratorních řešení do průmyslové praxe.

Význam dosažených výsledků a jejich vědecký přínos pro rozvoj vědního oboru

Cílem HP je poskytnout nejen přehled aktuálního stavu dynamicky se rozvíjející oblasti aplikace 3D tisku v elektrochemii (včetně zcela elektrochemicky funkčních aditivně

vyráběných komponent), ale především systematicky prezentovat jejich návrh, výrobu, charakterizaci a praktické využití. Nedílnou součástí těchto aplikací je rovněž matematické modelování elektrochemických komponent, které umožňuje hlubší porozumění probíhajícím elektrochemickým procesům. Právě v tomto směru lze spatřovat mimořádný vědecko-výzkumný potenciál práce, neboť detailní a sofistikovaný vhled do mechanismů elektrochemických dějů umožňuje optimalizaci celého procesu a přispívá k jeho zjednodušení, zrychlení a dlouhodobé stabilizaci.

Práce přesvědčivě ukazuje význam synergického propojení experimentálního „hardwarového“ přístupu s pokročilými „softwarovými“ nástroji v oblasti modelového testování. Kvalita, správnost a jasná interpretace dosažených výsledků zajišťuje jejich vysokou využitelnost jak pro další rozvoj oboru, tak pro navazující výzkumné aktivity.

Pro představení typické technologie 3D tisku elektrod, elektrodových komponent, elektrochemických a spektro-elektrochemických cel, včetně cel pro zkoumání chemických i elektrochemických reakcí habilitační práce vychází z CAD (Computer-Aided Design), který umožňuje model s přesnými tvary, rozměry a také s požadovanými vlastnostmi. Nejčastěji používaná metoda taveného nanášení (FDM – Fused Deposition Modelling) zde umožňuje kombinaci termoplastických polymerních matric (zejména kyselina polymléčná – PLA) s vodivými plnivý (různé alotropické formy uhlíku, především uhlíkové nanotrubičky – CNT) za účelem tvorby vodivého kompozitního materiálu.

Vědecký přínos výzkumné práce dr. Táni Sebechlebské je zásadní z několika hledisek. Jedním z klíčových aspektů je její experimentálně orientovaný, inovativní přístup k využití CAD-navržených modelových zařízení, které jsou výhodná nejen z ekonomického hlediska, ale především z pohledu možnosti vytvářet optimální struktury (geometrie, tvar, včetně prostorové mikroarchitektury). Tento přístup je zároveň propojen s pokročilými modelovými popisy elektrochemických experimentů, které nacházejí své přirozené vyústění v numerických simulacích realizovaných v prostředí softwaru COMSOL. Integrace experimentální a simulační roviny představuje významný metodologický přínos práce a výrazně posiluje její vědecký dopad i dlouhodobý přínos pro rozvoj oboru.

Publikační výstupy, formální úroveň a odborné zhodnocení

Dr. Táňa Sebechlebská ve svém habilitačním spisu představuje kromě úvodního krátkého přehledu (30 stran) celkem devět klíčových prací z období posledních šesti let; u sedmi z nich je korespondujícím autorem. Práce byly publikovány ve významných vědeckých časopisech (Q1 a Q2, IF od 3,5 do 6,7) a jsou důkazem pečlivé a sofistikované vědecké práce v oblasti fyziky, fyzikální chemie a elektrochemie. Zvolený přístup k řešení jednotlivých problémů a jejich zasazení do širšího odborného kontextu snese bezesporu mezinárodní srovnání.

HP je zpracována přehledně a logicky, přičemž její formální a jazyková úroveň je velmi vysoká. Za jistý nedostatek lze považovat skutečnost, že v úvodní části mohl být věnován větší prostor podrobnějšímu popisu prostředí CAD (Computer-Aided Design) a zejména numerickému modelování elektrochemických procesů realizovanému v softwaru COMSOL Multiphysics a také numerické simulaci založené na metodě konečných prvků (Finite Element Method, FEM). Na základě zkušeností s habilitačními a doktorskými disertačními pracemi by bylo rovněž přínosné doplnit každou publikaci krátkým úvodním (např. jednostránkovým) doprovodným textem. Ten by shrnoval záměr a hlavní cíle práce, diskutoval úskalí jejich naplnění, postupy

optimalizace a zároveň by naznačil možné směry dalšího výzkumu, včetně nových a perspektivních myšlenek. Tyto připomínky však nijak nesnižují celkovou kvalitu práce, která si i přes uvedené dílčí výhrady udržuje velmi vysokou odbornou úroveň a přináší řadu významných výsledků v rámci několika platform. Vedle elektroanalytické platformy, zahrnující nové technologie, postupy aktivace 3D tištěných elektrodových materiálů a návrh, výrobu i testování elektrochemických a spektroelektrochemických cel HP výrazně rozvíjí fyzikálně-chemickou platformu. Ta je reprezentována kinetickými a termodynamickými modely, popisem transportních jevů a matematickým modelováním elektrochemických systémů. Zvláštní pozornost si zaslouží rozsáhlá a detailně zpracovaná elektrochemická platforma, zaměřená na mezifázový přenos náboje, modelové popisy elektrochemických rozhraní a analýzu vlivu různých typů okrajových podmínek. Obdivuhodná je zejména schopnost autorky konstruovat a interpretovat výpočetní modely určené k simulaci procesů mezifázového přenosu náboje, simulovat komplexní elektrochemické děje a v neposlední řadě řešit i propojené elektrochemicko-chemické systémy, jakým je například reakce mezi hydrazinem a oxidem uhlíčitým zahrnující objemovou chemickou reakci.

Výsledky výzkumu dr. Táni Sebechlebské jsou jednoznačně přínosem pro:

- 1) další výzkum na bázi molekulární elektrochemie, elektrochemie v nanoměřítku, technické elektrochemie, elektrochemických senzorů;
- 2) aplikace v mikrofluidice a katalyzátorové chemii;
- 3) vývoj nových materiálů pro elektrochemické a spektroelektrochemické komponenty (cely, elektrody, drobné součástky), flexibilní inovace;
- 4) výrobu materiálů s požadovaným tvarem (i složitým) a geometrií (přizpůsobivým designem) popř. s požadovaným povrchem;
- 5) integraci 3D tištěných senzorů, do inteligentních (smart) systémů, ať je to diagnostika nebo monitoring;
- 6) automatizaci a robotizaci.

Díky předkládané habilitační práci jsem měla možnost seznámit se s řadou velmi zajímavých a podnětných poznatků, které jsou nejen odborně přínosné, ale i didakticky inspirativní. Přestože všechny zahrnuté publikace prošly standardním recenzním řízením a byly publikovány ve vysoce impaktovaných mezinárodních časopisech, ráda bych v rámci odborné diskuse vyslechla názor autorky na vybranou část výzkumu:

- 1) Z výzkumu PLA-CB elektrod vyplývá, že mezi aktivačním napětím a dobou aktivace neexistuje jednoduchý lineární vztah, ale že dochází k optimální aktivaci, která se projevuje nárůstem proudových maxim i_{pa} a i_{pc} při určité hodnotě aktivačního potenciálu a času aktivace. Zároveň je pozorován výrazný rozdíl v chování systému s PLA-CB a PLA-CNT elektrodou. Jak si tento trend vysvětlujete? Jaké procesy během elektrochemické aktivace konkrétně probíhají?
- 2) Pojem elektricky vodivý kompozit se obvykle vztahuje k polymerní matici s vodivým plnivem, u níž po překročení tzv. perkolačního prahu vzniká spojitá vodivá síť. Lze ve Vašem případě aktivačního procesu o perkolaci vůbec hovořit, nebo se jedná o zcela odlišný mechanismus zvyšování vodivosti?
- 3) Každá technologie a výrobní postup s sebou nese nejen problémy, ale i nové výzvy. Přestože FDM tisk je spojen s nízkou povrchovou vodivostí, slabší adhezí vrstev,

heterogenitou a výraznou anizotropií materiálu, je reprodukovatelnost elektrochemických signálů překvapivě dobrá. Čemu tuto skutečnost přisuzujete? Hraje klíčovou roli elektrochemická aktivace povrchu, tepelné zpracování, nebo jiné post-procesové postupy?

- 4) Existuje podle Vašeho názoru polymerní materiál vhodný pro přípravu spektro-elektrochemicky transparentní cely pomocí 3D tisku, který by umožnil obejít se bez použití křemenných okének?
- 5) Pro testování elektrochemického setu a 3D tištěných elektrod byla nejčastěji používána rutheniová redoxní sonda, konkrétně acetylacetonát ruthenitý $\text{Ru}(\text{acac})_3$. Ani ve vodném prostředí nebyl využit standardní systém $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$. Mělo toto rozhodnutí konkrétní důvod? Pokud to souvisí s rozdílným chováním komplexů typu *inner sphere* a *outer sphere*, jaký je Váš názor na toto klasické rozdělení?
- 6) V numerických simulacích v softwaru COMSOL je výpočetní oblast rozdělena na doménu $\partial\Omega_E$ (oblast elektrod s probíhající elektrodovou reakcí) a $\partial\Omega_W$ (oblast bez reakce). Jaký je důvod tohoto rozdělení? Navíc, u tužkové grafitové elektrody, která je elektroaktivní po celé své délce, postačuje pouze 2D model?
- 7) Pokud byste na základě svých zkušeností měla porovnat typy okrajových podmínek (Dirichlet, Neumann a Robin), který přístup považujete za nejvhodnější pro popis migračních procesů v elektrochemických systémech?
- 8) Numerická simulace metodou konečných prvků (Finite Element Method, FEM) je často prezentována jako nástroj pro optimalizaci návrhů a úsporu času. Na druhou stranu je výpočetní náročnost propojených nelineárních diferenciálních rovnic značná. Jak tuto zdánlivou rozpornost vnímáte? Existuje v této oblasti návaznost nebo potenciální propojení s metodami strojového učení, například s neuronovými sítěmi?
- 9) Kterých výsledků své dosavadní práce si nejvíce ceníte? Případně, co Vás během Vašeho výzkumu nejvíce překvapilo?

Habilitační práce dokládá odbornou vyzrálост autorky, její schopnost formulovat a řešit komplexní výzkumné problémy a dlouhodobě rozvíjet interdisciplinární výzkumné téma na mezinárodní úrovni. Na základě kladného hodnocení habilitační práce a předpokládám i na základě zapojení se uchazečky do pedagogického procesu (což z HP není možné zjistit a neznám přesná kritéria univerzity), doporučuji habilitační komisi i Vědecké radě PrF UK v Bratislavě jmenovat Mgr. Táňu Sebechlebskou Ph.D. docentem v oboru fyzikální chemie.

V Brně, dne 22. 01. 2026

.....

Libuše Trnková