

СТАНОВИЩЕ

от

проф. д-р Екатерина Николаева Жечева

от Института по обща и неорганична химия -БАН

върху дисертационен труд на тема

“Механизъм на анодно окисление на титан в етиленгликол - флуоридни електролити”

представен за придобиване на образователната и научна степен „доктор”

по направление 4.2 Химически науки (физикохимия)

от маг. инж. **Мина Йорданова Станчова**

редовен докторант към катедра Физикохимия, ХТМУ-София

Дисертационният труд на инж. Мина Станчова съдържа данни от квантовохимични и експериментални изследвания върху анодното окисление на титан в съдържащи флуоридни йони етиленгликолови електролити. Темата на дисертацията е актуална и важна, тъй като чрез анодно окисление на титан могат да се получат нанопорьозни оксидни филми, намиращи разнообразно приложение като сензори, фотокатализатори, соларни клетки, батерии и др. Вникването в механизма на електрохимичния процес дава възможност за целенасоченото получаване на наноструктури с подходяща за различните нужди морфология.

Литературният обзор обхваща 127 източника и включва литературни данни за приложението на анодните оксидни филми върху титан, методите за получаването им, електронните им свойства, както и развитите моделни представи за растежа им. Прави впечатление добрата литературна осведоменост на дисертантката и нейната способност да анализира наличните в литературата данни. Целите на дисертацията са ясно формулирани.

Като експериментални електрохимични методи за получаването и охарактерирането на титановите оксидни филми докторантката е използвала волтаметрия и импедансна спектроскопия. Химичният състав на филмите е определен чрез рентгенова фотоелектронна спектроскопия. За изучаване на началните етапи на окисление системата $\text{Ti}/\text{H}_2\text{O}$ е моделирана квантовохимично. Тази комбинация от експериментални и квантовохимични методи е много удачно подбрана и дава отговор на поставените в дисертацията цели. Едновременно с това използването на тези

различаващи се по своя принцип методи е дало възможност да бъде изпълнена образователната програма на дисертацията.

Основните приноси на дисертационния труд на Мина Станчева са както следва:

- Чрез теорията на функционала на плътността е моделирана системата $\text{Ti}/\text{H}_2\text{O}$ при различни потенциали. Оценена е енергията на адсорбция и са определени адсорбционните форми върху повърхността на титана.

- Експериментално е изследвано влиянието на съдържанието на флуорид и вода в електролит етиленгликол в широк диапазон от концентрации върху образуването на титановия оксиден слой при различни потенциали. Определен е химичният състав на слоя (титанови йони в различни степени на окисление, флуоридни и хидроксилни йони) в зависимост от условията на формирането му.

- Предложен е кинетичен модел за описание на процеса на анодно окисление на титан в съдържащ флуорид етиленгликолов електролит. Моделът количествено представя резултатите от експерименталните електрохимични изследвания в целия интервал от потенциали и концентрации на водата и флуорида. Резултатите за химичния състав и дебелината на оксидния слой, изчислени по модела, са в добро съответствие с данните от фотоелектронната спектроскопия. Определени са кинетичните и транспортни параметри по модела при различните условия.

Като цяло дисертацията е много добре написана по отношение на яснота и аргументация. Получените резултати са надеждни и задълбочено интерпретирани. Впечатлението е, че дисертантката е с добри познания в областта на физикохимията на изследваните системи.

Резултати от дисертацията са включени в три публикувани работи. Две от работите са в специализираните международните списания с импакт фактор *Electrochimica Acta* и *Journal of Solid State Electrochemistry*, което само по себе си е доказателство за качеството на проведените изследвания, а третата работа е публикувана в издаваната у нас поредица *Nanoscience and Nanotechnology*. Освен това изследванията са докладвани на пет научни форума, два от които в чужбина.

Принципни възражения върху изследванията в дисертацията нямам. Препоръката ми е при бъдещето публикуване на резултатите от квантовохимичното моделиране на системата $\text{Ti}/\text{H}_2\text{O}$ те да бъдат по-детайлно коментирани въз основа на наличните в литературата квантовохимични данни в тази област.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представеният дисертационен труд по своята значимост, научните приноси и наукометрични показатели отговаря на изискванията в Правилника на ХТМУ-София за присъждане на научната степен "доктор". Въз основа на това предлагам на Почитаемото научно жури да присъди на маг. инж. Мина Станчова образователната и научна степен "доктор" по направление 4.2 Химически науки (физикохимия), за което ще гласувам с пълна убеденост.

Изготвил становището: *Е. Жечева*
(проф. д-р Е. Жечева)

Дата: 2.09.2013 г