

С Т А Н О В И Щ Е

относно защита на дисертационен труд „Механизъм на анодно окисление на титан в етилен гликол–флуоридни електролити”

за придобиване на образователната и научна степен „доктор” по професионално направление 4.2 Химически науки (Физикохимия) към катедра „Физикохимия”, Департамент по химични науки на Химикотехнологичен и металургичен университет

докторант: инж. Мина Йорданова Станчева

изготвил становището: проф. дхн Дария Евгениева Владикова - член на научното жури.

Преглед на дисертационния труд и анализ на резултатите

Подбраната тематика на дисертационната работа касае един актуален както от приложен, така и от научен аспект въпрос – изследване анодното окисление на титан в електролит етиленгликол, в т.ч. и в началните стадии, за които липсва информация. Изследванията са проведени в широк диапазон от потенциали и концентрации на флуоридни йони и вода. В зависимост от структурата си, оксидните филми върху титан намират разнообразни технически приложения - за сензори, фотокатализатори, батерии, слънчеви клетки и др. Перспективен метод за тяхното формиране е анодното окисление на титан в подходящи електролити. Важно предимство на електрохимичния подход е получаването на филми с предварително зададени свойства, което изисква задълбочени познания за отделните етапи на процеса и за връзката между параметрите на електрохимичната кинетика и състава, структурата и електрофизичните свойства на получените филми. Въз основа на прецизен литературен обзор, който започва от първите изследвания (от 2009 г.), информиращи за създаването на оксидни организирани структури и анализа на по-нататъшни изследвания и резултати, е намерена зона, в която има „бели петна” и която определя основните задачи на дисертацията, които са решени оригинално, коректно и прецизно.

Началните стадии на окисление на титановата повърхност в зависимост от приложения потенциал и концентрацията на флуоридни йони са изследвани чрез теорията на функционала на плътността върху системата Ti/H_2O , като е охарактеризирана структурата в зависимост от потенциала (спрямо потенциала при нулев товар). Чрез умело комбиниране на електрохимични методи (волтамперометрия и импедансна спектроскопия) експериментално е изследвано влиянието на концентрацията на водата и флуоридните йони върху процесите на формиране на анодния оксиден филм, чийто химичен състав е определен чрез рентгенова фотоелектронна спектроскопия. Получените резултати са използвани и за оценка на достоверността на описанието на системата чрез обобщен количествен модел за системата метал/филм/електролит, разработен от научния ръководител проф. Божинов. Моделът е адаптиран и доразвит за случая на анодно окисление на титан. Предварителната работна хипотеза е изградена на базата на експерименталните резултати. Отлично впечатление прави

наборът от подходи за оценка на достоверността на модела с цел по-нататъшното му използване за получаване на оксидни филми с желана архитектура чрез анодно окисление на титан. Направена е оценка на адекватността на модела, последвана от количествено съпоставяне както на калкулирания по модела и измерения импеданс, така и на параметричните оценки с данни от литературата. Силен момент в работата е съпоставката на модела с експерименталните данни за химичния състав и дебелината на филма определени чрез рентгенова фотоелектронна спектроскопия. Получено е достатъчно добро количествено съответствие между два принципно различни метода (електрохимичен и физичен), които се провеждат при различни експериментални условия – *in situ* и *ex-situ*, което е стабилно доказателство за надеждността на модела и неговото бъдещо използване за определяне на експерименталните условия за получаване на слоеве с желана пореста структура, което определя и бъдещото приложение на резултатите от дисертацията.

Отлично впечатление прави комбинирането на квантовомеханично и електрохимично моделиране с оригинални експериментални техники – електрохимични и физични, мотивацията за тяхното провеждане, описанието им и обобщените изводи които се базират на резултатите получени от двата подхода. Всичко това показва, че при изготвяне на дисертацията докторантката е придобила отлична образователна и научна подготовка в различни зони, които изискват сериозна математическа и химическа подготовка. Експерименталната част е добре илюстрирана с фигури, които представят подробно получените резултати.

Характеристика и оценка на приносите

Основните приноси на дисертацията са стегнато и добре формулирани в 5 точки. Те биха могли да бъдат класифицирани като: “Доказване на съществени нови страни в съществуващи научни проблеми и обогатяване на съществуващи знания”. Висока оценка бих дала и на допълнителното описание на основните изводи, които ясно и коректно отразяват най-важните резултати, на базата на които са формулирани приносите.

Критични бележки и коментари

Нямам критични бележки и коментари. Имам два въпроса и една препоръка:

- Какво означава оптимизиране на параметрите на кристалографската плоскост на $Ti(0001)$ – става въпрос за „supercell“, или за нещо друго;
- Какъв е физическият смисъл на „повърхностна енергия на нарушаване на междумолекулните връзки при тяхното създаване”.

Бих препоръчала за в бъдеще: (i) за Боде плотовете да се използва по-голям мащаб и по-малко диаграми на един плот, за да може направените в текстова форма изводи да бъдат визуализирани на диаграмите, както и (ii) да се използва българският термин „пърестост“.

Работата е написана добре, на коректен технически и граматически език. Нормално е в текст от стотина страници да има и допуснати единични грешки и неточности, на които няма да се спирам.

Мнение за публикациите и лични впечатления

Резултатите от изследванията включени в дисертационния труд са представени в 3 публикации /две от тях в международни списания с импакт фактор/, като дисертантката е първият от двамата съавтори. Те са докладвани на 5 научни форума, което е повече от достатъчно за придобиване на образователната и научна степен „доктор“. Афторефератът напълно удовлетворява изискванията по чл. 11 ал. 5 на Правилника на ХТМУ.

Нямам лични впечатления от докторантката, но качеството на докторантурата, разнообразните и успешно приложени електрохимични и физични експериментални техники съчетани с квантовомеханично и електрохимично моделиране, ми дават основание да оценя високо квалификацията която инж. Станчева е придобила. Очевидна е нейната добра математическа подготовка, натрупана в предишни етапи от образованието и специализациите ѝ, което е допълнително доказателство за личния ѝ принос. Бих искала да поздравя и научния ръководител проф. Божинов за амбициозното и рисково формулиране на темата и за отличното ѝ изпълнение.

Заклучение

Дисертационният труд на маг. инж. Мина Йорданова Станчева представя една добре мотивирана актуална задача, която е разрешена успешно и има своите оригинални научни и научно-приложни приноси. Работата е написана компетентно, което показва, че инж. Станчева е изпълнила образователните и научни критерии поставени пред една докторантура. Обемът на работата и публикациите са напълно достатъчни за защита. Гореизложеното ми дава основание с пълна убеденост да предложа на Научното жури към Катедра „Физикохимия“, Департамент по химични науки на Химикотехнологичен и металургичен университет да присъди научната и образователна степен “доктор” на маг. инж. Мина Йорданова Станчева.

3 септември 2013 г.

Изготвил становището:

/проф. дхн Дария Владикова/