

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Петя Василева Генчева

назначена за член на научно жури за защита на докторска дисертация със заповед № Р-ОХ-99 / 13.03.2018 г. на Ректора на Химикотехнологичен и Металургичен Университет, София.

Относно: Дисертационен труд на тема: „Моделиране на оксидни филми върху конструктивни материали във високотемпературни електролити” разработен от инж. **Аюб Алами** от Факултета по химични технологии, катедра „Физикохимия” при ХТМУ и представен за придобиване на образователната и научна степен **ДОКТОР** по научна специалност **4.2 „Химически науки (Физикохимия)”**.

1. Актуалност и значимост на разработения научен проблем, цел и задачи на дисертационния труд.

Представеният за становище дисертационен труд е посветен на моделиране на оксидни филми върху конструктивни материали във високотемпературни електролити. В литературния обзор на настоящия дисертационен труд е разгледан световният опит, като е проследено влиянието на воднохимичния режим върху състава и структурата на оксидните филми, представени са съвременните модели на растежа на оксидните слоеве и разтварянето на метал през слоя. Обърнато е внимание върху способността на моделите да прогнозира по количествен начин растежа и еволюцията на структурата на филмите.

Поставените цели на дисертационния труд са усъвършенстване на модела на смесена проводимост, чрез разработване на нов подход към количественото описание на растежа и състава на външния, отложен слой и на преходния слой между границата сплав/вътрешен слой и обема на сплава. Заложено е разработване на изчислителна процедура за оценка на кинетични и транспортни параметри, чрез количествено сравняване на уравненията на модела с експериментални данни за състава на оксидните филми в дълбочина и провеждане на анализ на чувствителност на процедурата по отношение на основните параметри. Усъвършенстваният модел е приложен за количествена интерпретация на влиянието на разтворен сулфат и водород върху електричните и електрохимичните свойства на оксидните слоеве, получени върху стомана 316 в чиста вода при висока температура. Получени са оценки на кинетични и транспортни параметри, чрез количествено сравняване на уравненията на модела с ex-situ експериментални данни за състава на оксидните филми в дълбочина и in-situ електрохимични импедансни спектри.

2. Характеристика на изследването, представено в дисертационния труд

Инженер Алами е направил прецизен преглед на модела на смесена проводимост (MCM), обобщени са процесите на растеж на оксид и разтваряне на метал през него. Представени са математически модели на растеж и състав на вътрешния, външния отложен слой и на преходния слой в металния субстрат. В експерименталната част от дисертационния труд е изследван механизма на растеж на външния слой, чрез количествено сравняване на уравненията на модела с експериментални профили на оксиди в дълбочина, получени чрез XPS - анализ. Проведено е изследване на чувствителността на модела по отношение на ключовите параметри, влияещи върху кинетиката на растеж и еволюцията на състава на вътрешния и външния слой – скоростни константи на междуфазовите граници, интензитет на електричното поле и коефициенти на дифузия на точкови дефекти. Приложена е новата версия на модела, като са изследвани кинетичните и транспортни параметри на два типа оксиди – филм, върху образци от неръждаема стомана 304 и никелова сплав 690, формирани в условия на водно-химичен режим в първи и втори контур на ядрени централи тип PWR. С помощта на създадения нов модел, дисертантът е успял да определи ключови параметри, определящи растежа на вътрешния слой, свързани

с генериране и транспорт на хромни катионни ваканции и интензитетът на електричното поле. Определена е и дебелината и състава на външния слой, чрез оценяване скоростта на генериране и транспорт на междувъзлови катиони и транспорт на кислород по ваканционен механизъм и внедряването му на границата външен слой / електролит.

Изследвано е влиянието на сулфатните йони и разтворения в топлоносителя водород върху състава, електричните и електрохимични свойства на оксидния слой, образуван върху неръждаема стомана AISI 316L(NG) в условия на чиста вода (основа на нормалния воднохимичен режим в реактори BWR) при висока температура. Дисертанта на база прецизна експериментална работа и научно обосновани анализи е определил, че изменението на състава на вътрешния бариерен подслой в дълбочина се дължи на неговото обогатяване с Cr. Защитните свойства на оксида, дебелина и отношението Cr / Fe във вътрешния подслой на оксида, формиран върху конструктивен материал в симулирани условия на корозионни пукнатини, може да се използва като мярка за податливостта на материала към корозионно напукване под напрежение. По-точното дефиниране на химичните условия в пукнатините, по-специално чрез поддържане на постоянна концентрация на разтворен водород, приближава симулираните водно-химични режими до реалните условия на инициране на корозионни пукнатини.

Усъвършенстваната версия на MCM направен в предоставената ми за становище дисертация, е способен да възпроизведе количествено, както in-situ електрохимични импедансни спектри, така и ex-situ резултати за дебелината и състава на оксида, получени чрез техники за повърхностен анализ. Моделът може да бъде използван, като електрохимичен модул в многомащабна симулация при иницирането на корозионни пукнатини.

3. Характеристика на научните и научно приложни приноси в дисертационния труд. Достоверност на материала.

Основните научни и научно-приложни приноси посочени в дисертационния труд разработен от инж. Алами са в прилагането на усъвършенствания модел на смесена проводимост, с който се създава възможност за ново количествено охарактеризиране на растежа на външния - отложен слой, като скоростоопределящ етап на процеса е реакцията на водата с междувъзловите катиони, транспортирани през вътрешния слой. Усъвършенствания модел позволява определяне на параметри, отговорни за растежа на вътрешния слой, свързани с генериране и транспорт на хромни катионни ваканции, обвързани с интензитета на електричното поле. Въз основа на усъвършенствания MCM, Алами е разработил изчислителна процедура, за количествено определяне дебелината и състава на оксида, потвърдени от методи за повърхностен анализ на оксидния филм. Обобщените и научно обосновани изследвания дават възможност, моделът да бъде приложен, като електрохимичен модул при изследвания за превенция появата на корозионни пукнатини, което е от особена важност за технологичните процеси в практиката.

Изброените приноси, прави представеното ми за становище изследване особено ценно поради пряката му връзка с конкретни практически проблеми имащи отношение към намаляването на проблемите с корозионните процеси в атомните електрически централи, а оттука и до увеличаване на икономическата ефективност на този отрасъл.

4. Оценка на публикациите по дисертацията и авторство

Списъкът на публикациите по дисертацията включва четири статии и доклади, публикувани в международни списания с импакт фактор и са свързани с тематиката на дисертационния труд. В публикуваните статии и доклади са разкрити основни изследвания на дисертационния труд, което дава възможност на заинтересованите специалисти да се запознаят с постигнатите резултати, а публикуването на материалите е основание да се признае тяхната значимост.

5. Литературна осведоменост и компетентност на докторанта

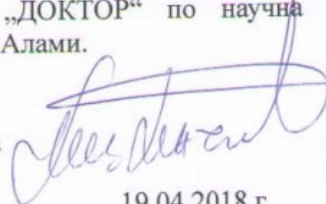
Като обобщение може да се каже, че докторанта е изучил из основи теорията и практиката на електрохимичните методи и механизми за нарастване на оксидни филми. Литературната осведоменост на автора, представена в дисертационния труд, еднозначно съобщава за прецизната работа на един съвременен изследовател, добре запознат с последните достижения в областта на науката.

6. Заключение

Предоставеният ми за становище дисертационен труд, отговаря по обем и количество на изискванията за докторска дисертация. Докторанта е постигнал целите на своето изследване. Получените в дисертационния труд резултати са отлична основа за бъдещи изследвания в областта на химическите науки.

Давам положителна оценка на дисертационния труд и призовавам научното жури да гласува за присъждане образователната и научна степен „ДОКТОР“ по научна специалност 4.2 „Химически науки (Физикохимия)“ на инж. Аюб Алами.

Доц. д-р Петя В. Генчева



19.04.2018 г.