

Вх. № РД -08-120//04.02.2019 г.

Тема: ” Разработване и окомплектоване на термодинамична база от данни за природни геохимични системи”

Финансиране 1215.60 лв.

ЕКИП

Ръководител на проекта: 1. проф. д-р Христомир Христов	преподавател
Членове на колектива:	
2. ас. Станислав Дончев	преподавател, докторант*
3. Цветан Ценов, фак. № 1520150024, специалност Медицинска химия	студент, дипломант ^а
4. Калин Колев, фак. № 1520050005, специалност Педагогика на обучението по биология и химия	студент, дипломант ^а
5. Берна Христова, фак. № 1822130051, специалност Екологична химия -Дипломант Магистърска степен	студент, дипломант ^б
6. Камелия Първанова, фак. № 1822130006, специалност Екологична химия Дипломант Магистърска степен	студент, дипломант ^б
7. Ирина Атанасова, фак. № 1822130029, специалност Екологична химия- Дипломант Магистърска степен	студент, дипломант ^б
8. ас. Нина Иванова	преподавател, Медицински Университет Плевен, докторант*

* свободна докторантура (зачислен през юни, 2019) , докторска програма „Неорганична Химия”

^азащитил успешно дипломант Бакалавърска степен (сесия Юли, 2019) с научен ръководител проф. Христомир Христов и научен консултант ас. Станислав Дончев

^бзащитил успешно дипломант Магистърска степен (сесия Юли, 2019) с научен ръководител проф. Христомир Христов и научен консултант ас. Станислав Дончев

Обща характеристика на проекта

Целта на проекта е разработване на компютърни високо-точни, всеобхватни, и широко – приложими термодинамични модели, базирани на уравненията на Питцер, за предвиждане свойствата и химичното равновесие във електролитни системи, които контролират редица важни химични, геохимични и атмосферни процеси в околната среда, както и допринасят за значителното оптимизиране на индустриални процеси и технологии. Ще бъдат конструирани нови компютърни модели за бинерни, тройни и многокомпонентни природни и индустриални системи със стабилно състояние на преситените разтвори, и респективно със метастабилна кристализация на твърдите фази.

В работната програма са включени и експериментални изследвания по определяне на разтворимостите на бромидни минерали в системата $\text{NH}_4\text{Br}-\text{CaBr}_2-\text{H}_2\text{O}$ в температурния интервал от $T = 298.15 \text{ K}$ до $T = 323.15 \text{ K}$

ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ

А) В сътрудничество с колегите от BRGM (Fr) са конструирани нови модели без концентрационни ограничения за всички Радио-Нуклеидни системи за които са достъпни експериментални данни за активностите, а именно за $\text{La}(\text{NO}_3)_3-\text{H}_2\text{O}$, и всички

Лантанидни метали: $\text{Ce}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Pr}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Nd}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Pm}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Sm}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Tb}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Dy}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Ho}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Er}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Tm}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Yb}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Lu}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$ (Виж Guignot et al., 2019). Работата по този BRGM (Fr) – ШУ проект продължи с разработването на равновесни модели за системата $\text{UO}_2\text{-K-Ca-Mg-NO}_3\text{-H}_2\text{O}$ при 25°C (Lassin et al., 2019).

Б) Разработени са и много точни нови модели за 15 бинерни нитратни системи от различен тип : 1-1 ($\text{HNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{LiNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NaNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{KNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{CsNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, and $\text{NH}_4\text{NO}_3\text{-H}_2\text{O}$), 2-1 ($\text{Mg}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$, and $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$), and 3-1 ($\text{Cr}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$ and $\text{Al}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$), 4-1($\text{Th}(\text{NO}_3)_4\text{-H}_2\text{O}$) (Donchev and Christov, 2019; Христов и съавтори, 2019).

В) В друга работа (Христов и съавтори, 2019б) са представени термодинамични модели за твърдо-течно фазово равновесие в 11 силно концентрирани Цезиеви бинерни и смесени разтвори.

Г) Проведени са и експериментални изследвания по определяне на разтворимостите на бромидни минерали в системата $\text{NH}_4\text{Br-CaBr}_2\text{-H}_2\text{O}$ при $T = (298.15 \text{ and } 323.15) \text{ K}$ (Donchev et al. (2019))

ПУБЛИКАЦИИ ПО ПРОЕКТА

В издания с импакт фактор (Web of Science) и/или импакт ранг (Scopus);

1. Sylvain Guignot^{1,*}, Arnault Lassin¹, **Christomir Christov**², Adeline Lach¹, Laurent André^{1,3}, Pierre Henocq⁴, Modelling the osmotic and activity coefficients of lanthanide nitrate aqueous solutions at 298.15 K from low molalities to (super) saturation, *Journal of Chemical & Engineering Data*, (2019) 64, 1, 345-359 (DOI: 10.1021/acs.jced.8b00859) (Q1=25 p.).
2. **Stanislav Donchev**, Ismail Ismailov, Ivailo Parushev, **Christomir Christov**, Solubility in the $\text{NH}_4\text{Br-CaBr}_2\text{-H}_2\text{O}$ system at $T = (298.15 \text{ and } 323.15) \text{ K}$, *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences (RGPBCS)* (2019) vol. 10, No. 5, pp. 83-88 (Q3=15 p.).

Статия в списание с SJR (SCOPUS)

3. **Stanislav Donchev**, **Christomir Christov**, Not concentration restricted computer models for predicting solution properties and solid-liquid equilibrium in binary and mixing nitrate systems. Part I: Binary systems of the type 1-1, In *Proceedings of Applied Modeling in Economics, Finance and Social Sciences (AMEFSS 2019)*, Sozopol, 2019 (SJR=10 p.), **under review**

Статия в нереферуемо научно издание

4. **Nina Ivanova**, Angelina Stoyanova, **Christomir Christov**, Albena Bachvarova-Nedelcheva, SYNTHESIS AND DETOXIFICATION ACTIVITY OF MODIFIED WITH CERIUM AND BORON TITANIUM DIOXIDE (in Bulgarian), In *Proceedings of XVII National Conference with International Participation "Natural Sciences 2019"*, (2019), pp. 12-19.

Участие с доклад/постер в Научен форум

1. **Christomir Christov**, THERMODYNAMIC CHEMICAL EQUILIBRIUM MODELS FOR NATURAL SYSTEMS: THEORY AND PRACTICE, *Spring Scientific Session FMI– 2019, Section UNITE*, Fac. Mathematics and Informatics, Sofia University, 16 March, 2019.
2. **Stanislav Donchev**, Tsvetan Tsenov, Ismail Ismailov, Ivailo Parushev, **Christomir Christov**, Solubility in $\text{NH}_4\text{Br-CaBr}_2\text{-H}_2\text{O}$ system at $T = (298.15 \text{ and } 323.15) \text{ K}$, 7th

- Student scientific conference “Ecology and Environment, 20.04. 2019, Shumen University “ K. Preslavski”, Shumen, Bulgaria, poster
3. **Stanislav Donchev**, Berna Hristova, Kameliya Parvanova, Irina Atanasova, **Christomir Christov**, Pitzer approach based models for nitrate binary systems of the type 1-1 ($\text{HNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{LiNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NaNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{KNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{CsNO}_3\text{-H}_2\text{O}$, and $\text{NH}_4\text{NO}_3\text{-H}_2\text{O}$), 2-1 ($\text{Mg}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$, and $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$), and 3-1 ($\text{Cr}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$ and $\text{Al}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$) up to very high concentration at 298.15 K, 7th Student scientific conference “Ecology and Environment, 20.04. 2019, Shumen University “ K. Preslavski”, Shumen, Bulgaria, oral presentation
 4. **Станислав Дончев**, Цветан Ценов, Калин Колев, **Христомир Христов**, Термодинамични модели за твърдо-течно фазово равновесие в силно концентрирани Цезиеви бинерни и смесени разтвори, VII Национална Научна Студентска Конференция “От Атома до Космоса”, 17-18 Май, 2019, Шуменски Университет, Шумен, България-устен доклад.
 5. **Stanislav Donchev**, **Christomir Christov**, Development of advanced and comprehensive chemical thermodynamic database for nuclear waste treatment and storage. Part I: Computer models for predicting properties and solid-liquid equilibrium in binary and mixing nitrate systems, Applied Modeling in Economics, Finance and Social Sciences (AMEFSS 2019), Sozopol, 28 June to 2 July 2019, oral presentation
 6. A. Lassin, S. Guignot, A. Lach, L. André, B. Made, P. Henocq, **C. Christov**, Modelling of the solution properties and the solution-solid equilibria in the $\text{UO}_2\text{-K-Ca-Mg-NO}_3\text{-H}_2\text{O}$ chemical system at 25°C, ABC-Salt (V): Actinide Brine Chemistry in a Salt-Based Repository, June, 2019, Karlsruhe, Germany, poster
 7. **Станислав Дончев**, **Христомир Христов**, Основи на геохимичното моделиране, 17та Научна конференция на Геолого- Географски Факултет (ГГФ) на СУ, 20-22 Септ., 2019, Созопол- устен доклад.
 8. **Stanislav Donchev**, Ivailo Parushev, Ismail Ismailov, **Christomir Christov**, Solubility in $\text{LiBr-CaBr}_2\text{-H}_2\text{O}$ system at $T = (308.15 \text{ and } 323.15) \text{ K}$, XVII National Conference with International Participation “Natural Sciences 2019”, 4.10.2019-5.10.2019, Shumen, Bulgaria, **poster**.
 9. **Nina Ivanova**, Angelina Stoyanova, **Christomir Christov**, Albena Bachvarova-Nedelcheva, SYNTHESIS AND DETOXIFICATION ACTIVITY OF MODIFIED WITH CERIUM AND BORON TITANIUM DIOXIDE, XVII National Conference with International Participation “Natural Sciences 2019”, 4.10.2019-5.10.2019, Shumen, Bulgaria, oral presentation.
 10. **Stanislav Donchev**, Tsvetan Tsenov, **Christomir Christov**, Thermodynamic Phase Equilibrium Models for Cesium Binary and Mixed Systems, XVII National Conference with International Participation “Natural Sciences 2019”, 4.10.2019-5.10.2019, Shumen, Bulgaria, oral presentation.
 11. **Stanislav Donchev**, **Christomir Christov** (2019) Development of accurate chemical thermodynamic database for geochemical storage of nuclear waste. Part II. Computer models for predicting properties and solid-liquid equilibrium in nitrate binary 2-1 ($\text{Mg}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$, $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$, and $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2\text{-H}_2\text{O}$), and 3-1 ($\text{Cr}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$ and $\text{Al}(\text{NO}_3)_3\text{-H}_2\text{O}$) systems up to very high concentration at 298.15 K, National Conference with International Participation “Geography, Regional Development, and Tourism”, 25-26 Oct., 2019, Shumen, Bulgaria, **oral presentation**.

Полезни модели

През 2019 15 модела за смесени М(III) -системи описани в *Acta Scientifica Naturalis* (2018, 2019) са директно внедрени в световната база от термодинамични данни на Френското Геологично Общество (BRGM) &ANDRA, и Astrophysics Data System (ADS)

http://adsabs.harvard.edu/cgi-bin/nph-abs_connect

[SAO/NASA Astrophysics Data System \(ADS\) High Energy Astrophysics Division at the Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics](http://adsabs.harvard.edu/cgi-bin/nph-basic_connect?qsearch=Christomir+Christov&version=1)

http://adsabs.harvard.edu/cgi-bin/nph-basic_connect?qsearch=Christomir+Christov&version=1

1. Laurent André, **Christomir Christov**, Arnault Lassin, and Mohamed Azaroual, Thermodynamic model for solution behavior and solid-liquid equilibrium in Na-Al(III)-Fe(III)-Cr(III)-Cl-H₂O system at 25°C, *Acta Scientifica Naturalis* (2018) Vol 5, No 1, Pages 6-16. Ref. no. : 30860 (18LAG)
- 2 Laurent André, **Christomir Christov**, Arnault Lassin, and Mohamed Azaroual, A thermodynamic model for solution behavior and solid-liquid equilibrium in Na-K-Mg-Ca-Al(III)-Fe(III)-Cr(III)-Cl-H₂O system from low to very high concentration at 25°C, *Acta Scientifica Naturalis* (2019)

През 2019 модели за 5 бинерни и 10 смесени нитратни системи описани в J. Chem. Eng. Data (2018) са директно внедрени в световната база от термодинамични данни на Френското Геологично Общество (BRGM), ANDRA и JESS (JOINT EXPERT SPECIATION SYSTEM)

JESS - JOINT EXPERT SPECIATION SYSTEM

(http://jess.murdoch.edu.au/jess_home.htm)

AUTWWW (Version 8.6u) JESS copyright (C) 1985-2017

Licensee : Webmaster, Murdoch University, Australia

Located "Christov C"

<http://jess.murdoch.edu.au/autnam.shtml>

J. Chem. Eng. Data, 2018, 63, 787

Author: Lach A; Andre L; Guignot S; Christov C; Henocq P; Lassin A

Heading: A Pitzer Parametrization To Predict Solution Properties and Salt Solubility in the H-Na-K-Ca-Mg-NO₃-H₂O System at 298.15 K

Keyword: Calcium; Magnesium; Brines; Nitrate; Sodium; Potassium; Pitzer Equations / Modelling; Solubility

End page: 800

Data no.: 0 Summary: >File PEC

ЗАБЕЛЯЗАНИ ЦИТИРАНИЯ (SCOPUS, WofSci) за 2019 на С. Christov
26 публикации са цитирани 74 пъти (73 в WebSci)

ПРЕЗ 2019 г. СА ИЗГОТВЕНИ 7 (СЕДЕМ) РЕЦЕНЗИИ ЗА НАУЧНИТЕ

СПИСАНИЯ: *Acta Scientifica Naturalis*, *The Journal of Chemical Thermodynamics*, *Fluid Phase Equilibria*