

вх. № РД-08-124/03.02.2020 г. Тема: „РАЗРАБОТВАНЕ И
ОКОМПЛЕКТОВАНЕ НА ТЕРМОДИНАМИЧНА БАЗА ОТ ДАННИ ЗА
ПРИРОДНИ ГЕОХИМИЧНИ СИСТЕМИ“

Финансиране 1347,58 лв.

ЕКИП

Име, презиме, фамилия (длъжност и научна степен)	Позиция
Ръководител на проекта:	
1. Проф. д.х.н Христов Христомир Йорданов	Преподавател в ШУ
Членове на колектива:	
2. Ас. Дончев Станислав Андреев	Преподавател в ШУ (до 1/7/2020) и докторант по докторска програма „Неорганична Химия” – ФПН, ШУ
3. Ас. Иванова Нина Кирилова	Преподавател в МУ Плевен и докторант по докторска програма „Неорганична Химия” – ФПН, ШУ
4. Ценов Цветан Василев	Студент, магистърска степен, специалност Екологична химия, фак. № 1922130015, дипломиран 07/2020

ОСНОВНИ РЕЗУЛТАТИ

На базата на добре-валидирана методология (Christov (1994-2018)), базирана изцяло на стандартния подход на Питцер са конструирани нови модели без концентрационни ограничения за: 8 Цезиеви и 8 Рубидиеви бинерни ($CsX-H_2O$; $X=F, Cl, Br, I, NO_3, \dots$; $RbX-H_2O$; $X=F, Cl, Br, I$) NO_3, \dots) системи и са определени важни термодинамични характеристики на кристализиращите от наситените разтвори 16 Цезиеви и Рубидиеви твърди фази; 6 Флуоридни бинерни системи и са определени важни термодинамични характеристики на кристализиращите от наситените разтвори 4 Флуоридни твърди фази; 15 нитратни бинерни системи и са определени важни термодинамични характеристики на кристализиращите от наситените разтвори 14 нитратни твърди фази; в сътрудничество с колегите от BRGM (Френското Геологично Общество) Dr. A. Lassin, Dr. L. Andre, and Dr. A. Lauch са разработени модели за 17 смесени нитратни системи от типа $La(NO_3)_3-Ce(NO_3)_3-H_2O$. Разработените нови модели за Цезиеви, Рубидиеви и нитратни системи са от изключителна важност за оценка и оптимизиране на стратегиите за третиране и геохимично съхранение на ядрените отпадъци. Проведени са експериментални изследвания по определяне на разтворимостите на минерали в бинерни и смесени електролитни разтвори. Проведени са изследвания за системата $LiBr-CaBr_2-H_2O$ при 25 и 50°C. Получените експериментални данни ще бъдат използвани при последващото параметризиране и валидиране на равновесните модели.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ПРОЕКТА

1. Stanislav Donchev, Nidelina Petkova, Christomir Christov, Computer models for predicting solution properties and solid-liquid equilibrium in binary fluoride systems,

- Innovativity in Modeling and Analytics Journal of Research (ISSN 2534-9619), vol. 5, pp.24-35 (2020)
2. Stanislav Donchev, Christomir Christov, Development of Accurate Chemical Thermodynamic Database for Geochemical Storage of Nuclear Waste. Part I: Models for Predicting Solution Properties and Solid-Liquid Equilibrium in Binary Nitrate Systems of the Type 1-1, Ecologia Balkanica (Q4), in press.
 3. Christomir Christov, Thermodynamic models for solid-liquid equilibrium of aluminum, and aluminum-silicate minerals in natural fluids. Current state and perspectives, Review of the Bulgarian Geological Society (National Conference with international participation "GEOSCIENCES 2020"; ISSN 0007-3938), vol. 81, part 3, 2020, p. 69–71 (Web of Science)

Научни публикации в Сборници с доклади от научни конференции:

1. 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", (2020) pp. 9-16.
2. Stanislav Donchev, Nidelina Petkova, Christomir Christov, Computer models for predicting solution properties and solid-liquid equilibrium in binary fluoride systems, In proceedings of Applied Modeling in Economics, Finance and Social Sciences, Sozopol, Bulgaria, July, 2020
3. Станислав Дончев, Христомир Христов, Химично и геохимично моделиране. Термодинамични компютърни модели за бинерни флуоридни системи, (Chemical and geochemical modeling. Thermodynamic computer models for binary fluoride systems), Сборник с доклади от Докторантски семинар на Геолого-Географски Факултет (ГГФ) на Софийски Университет, Созопол, Септ., 2020
4. Христомир Христов, Въздействие на морските атмосферни аерозоли върху климата в крайбрежните зони, Сборник с доклади от НАУЧНА КОНФЕРЕНЦИЯ ТУРИЗЪМ, ОБРАЗОВАНИЕ, БИЗНЕС, УНИВЕРСИТЕТ "ПРОФ. Д-Р АСЕН ЗЛАТАРОВ" – БУРГАС, (ISBN 978-619-7125-74-0), pp. 144-151 (2020)
5. Stanislav A. Donchev, Tsvetan V. Tsenov, Christomir I. Christov, Thermodynamic models for solution behavior and solid-liquid equilibrium in rubidium binary systems from low to very high concentration at 25°C (Термодинамични модели за поведението на разтворите и твърдо-течното фазово равновесие в рубидиеви бинерни системи от ниски до много високи концентрации при 25°C), Сборник с доклади от НАУЧНА КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНО УЧАСТИЕ МАТТЕХ 2020, ШУМЕНСКИ УНИВЕРСИТЕТ „ЕПИСКОП КОНСТАНТИН ПРЕСЛАВСКИ“, ОКТОМВРИ 2020, , pp. 57-74 (2020).
6. Stanislav Donchev, Nina Ivanova, Christomir Christov, Solid-liquid phase equilibrium in LiBr-CaBr₂-H₂O system at (35 and 50)°C (Твърдо-течно фазово равновесие в системата LiBr-CaBr₂-H₂O при (35 и 50)°C), Сборник с доклади от 18-та Национална конференция с международно участие „Природни науки’ 2020“ Октомври 2020 г., pp. 7-11 (2020).
7. Христомир Христов, ТЕРМОДИНАМИЧНИ МОДЕЛИ ЗА ТВЪРДО-ТЕЧНО-ГАЗ СТАБИЛНО И МЕТАСТАБИЛНО РАВНОВЕСИЕ В ПРИРОДНИ И ИНДУСТРИАЛНИ ФЛУИДИ, Сборник с доклади на „Юбилейна Научна Сесия посветена на 100-годишнината от Рождението на акад. Георги Близнаков“ (2020), pp. 172-173.

8. Christomir Christov, Thermodynamic Equilibrium Models of Geochemical Systems: Models for Deliquescence of Sea Salt Aerosols in Wet Atmosphere , In proceedings of International Geographic Conference Geo Dekade 2020-2030, 24-26 November, Sofia University, pp. 43-45