Р Е Ц Е Н З И Я

от проф. д.м.н. Николай Иванов Янков

на дисертационен труд за научната степен **„доктор на науките"**
с автор: **проф. д-р Христомир Йорданов Христов**,
на тема „Химично и геохимично моделиране: Теория и практика"
област на висше образование: 4. Природни науки, математика и информатика,
професионално направление: **4.2. Химически науки** (Неорганична химия),
ФПН при Шуменски университет „Епископ К. Преславски",
катедра „Химия"

1. Общо описание на представените материали във връзка с изпълнението на нормативната уредба

Съгласно заповед № РД-16-100/27.09.2019 г. на Ректора на ШУ съм определен за член на Научното жури, а на проведеното първо заседание на 03.10.2019 г. бях изпран за рецензент и получих материалите във връзка с десертацията на електронен носител.

Във връзка с изпълнението на чл. 35 от Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ) и правилника прилагането му (ППЗРАСРБ), на база на представените документи бе установено наличието на:

- справка от НАЦИД за диплома № 23005 от 25.03.1994 г. за образователна и научна степен „доктор" (в изпълнение на чл. 12, ал. 1 от ЗРАСРБ). От справката се вижда, че ОНС „доктор" придобита от дисертанта е в професионално направление „4.2. Химически науки", научна специалност: „Химия" и е на тема „Образуване на смесени кристали между двойни соли от карналитов тип";
- справка по изпълнение на минималните национални изисквания по чл. 2б, ал. 2 и 3 от ЗРАСРБ (в изпълнение на чл. 12, ал. 3 от ЗРАСРБ);
- считам, че е изпълнено изискването на чл. 12, ал. 5 от ЗРАСРБ, т.е. дисертационният труд е подготвен самостоятелно и не повтаря буквално темата и значителна част от съдържанието на дисертацията по ОНС „доктор";
- налице е дисертационен труд (в изпълнение на чл. 12, ал. 2 от ЗРАСРБ), автореферат (48 стр.), „curriculum vitae" на български и английски език, списък

с публикациите на дисертанта, справка за научните приноси на дисертацията и списък с цитиранията на публикациите;

- считам, че е изпълнено изискването на чл. 12, ал. 4 от ЗРАСРБ и дисертационния труд съдържа теоретични обобщения и решения на големи научни и научноприложни проблеми, които съответстват на съвременните постижения и представляват значителен и оригинален принос в науката.

2. Изпълнение на минималните национални изисквания

Приемам за верни данните в справката за изпълнението на минималните национални изисквания както следва:

- Групи А и Б: ОНС „доктор” и дисертационен труд за „доктор на науките”;
- Група Г: над 905 т. от 49 научни статии с импакт фактор или имапкт-ранг (при изискуеми 100 т.);
- Група Д: над 1000 цитирания по данни на Web Of Science (WOS), приблизително 2000 т. (при изискуеми 100 т.).

3. Представяне на дисертационния труд

Дисертационния труд се състои от увод и 3 глави, с общ обем от 127 стр. и накратко съдържа:

- Увод, в който са формулирани целите и задачите на дисертацията, както и актуалността и значимостта на научната проблематика (с. 6-9);
- Анализ на състоянието на изследванията по проблема, въведение в проблемите на атмосферната химия, поведението на Al в природни флуидни системи и програмите за геохимично съхранение на ядрени отпадъци (с. 9-19);
- Научна методология на изследванията: подход на Питцер за междуйонно взаимодействие в електролитни системи, подходи за подбор и определяне на моделните параметри за бинерните системи и моделна технология за определяне параметрите на смесване и термодинамичните характеристики на кристализиращите твърди фази (с. 19-33);
- Получени резултати (с. 36-99):
  - Експериментални лабораторни изследвания;
  - Моделни изследвания:

- ◇ модел за стабилно и метастабилно равновесие в разширената морска система и неговото приложение;
- ◇ термодинамичен модел за геохимичното поведение на Al(III), Fe(II,III), Cr (III) в природните води;
- ◇ разработени модели с потенциално директно приложение в индустрията;
- ◇ валидиране на моделите за бинерни и многокомпонентни системи с кристализация на стехиометрични твърди фази;
- ◇ модели за системи с кристализация на нестехиометрични твърди фази. Термодинамични характеристики на твърди разтвори (смесени кристали) от различен тип;
- ◇ непубликувани напълно параметеризирани модели за природни флуиди.

- Научни приноси и приложения (с. 100-127).

4. Цели и задачи на дисертационния труд

Основните цели на дисертацията са:

- разработването на фрагментарни модели, работещи с ограничен брой моделни параметри;
- създаването на всеобхватни и точни pH-концентрация-температура вариращи, добре валидирани и термодинамично-обосновани модели за стабилно и метастабилно фазово равновесие в природни и индустриални системи с особена важност за екологията и индустрията;
- разработване на модели на базата на подхода на Питцер за междуйонно взаимодействие;
- разработване на модели разглеждащи кристализацията на твърди фази от наситените бинерни и тройни разтвори.

Главните задачи, върху които е съсредоточена дисертацията са параметризиране, валидиране и приложение на комплексни модели за:

- комплексна многокомпонентна морска система H^+-Li^+-Na^+-K^+-NH_4^+-Rb^+-Cs^+-Be^{2+}-Mg^{2+}-Ca^{2+}-Sr^{2+}-Ba^{2+}-F^--Cl^--Br^--I^--OH^--HSO_4^--SO_4^{2-}-HCO_3^--CO_3^{2-}-CO_2(gas)-H_2O. Чрез термодинамична база от данни (ТДБД) за разширената морска система и компютърен модел за морската система може да бъде

направена оценка на втечняващото поведение на морските аеозоли в атмосферата и тяхното влияние върху радиационните атмосферни характеристики, глобалното затопляне и климатичните промени;

- разработване на ТДБД за разширената морска система чрез параметризиране на комплексен модел описващ коректно геохимичното поведение на M(III) (M=Al, Fe, Cr) и Fe(II) – минералите, както и на силициевите минерали в морски тип среда, и като функция на състава и pH на средата и температурата;
- разработване на редица концентрационно разширени модели, включващи зоната на суперпреситените разтвори за F^-, Cl^-, Br^-, I^-, OH^-, ClO_4-, NO_3-, H_2PO_4-, PO_4-, SO_4- и SeO_4 – бинерните системи на металните катиони от групи от IA до VA на периодичната система, както и радиоактивните метали (някои лантаниди и някои актиниди) при стандартна температура (25°C);
- обобщаване на резултати за системи с кристализация на нестехиометрични твърди фази, и изчисляване на базата на подхода на Питцер на термодинамични характеристики на твърди разтвори (смесени кристали) от различен тип.

5. Научно и научно-приложни приноси на дисертационния труд

Приносите в дисертацията могат да се систематизират накратко така:

При създаването на относително точни и надеждни модели на сложни и динамични природни системи се изискват значителни познания от различни области на науката – химия, физика, физикохимия, както и компютърните науки. Авторът успява да разработи модели, отчитащи възможните течни и твърди компоненти и равновесните реакции и тяхната динамика, при различни колебания в температурата, налягането, pH и състава на разтворите.

За отчитане на асоциационните ефекти при високи концентрации се прилага нова разширена версия на модела на Питцер – подход включващ 4 моделни параметъра $\beta^{(0)}, \beta^{(1)}, \beta^{(2)}$ и C^{φ}. Чрез този подход са разработени модели, които коректно описват поведението на разтвори от типа на $CaCl_2$-H_2O и $FeCl_3$-H_2O и имащи различна стехиометрия: 1-1, 1-2, 2-1, 3-1 и 3-2. Ако използвания изчислителен код за определяне на бинерните параметри не позволява вариране на параметрите α_1 и α_2 и не е възможно прилагането на разширен подход, то авторът предлага въвеждането в моделите на реакции на комплексообразуване в разтворите.

По мое мнение, избраната методология и методика на изследване са в съответствие с поставената цел и задачи на дисертационния труд. Авторът успява да реши

голяма част от поставените в дисертационния труд задачи. При изчисляването на различните параметри на моделите, които са разгледани в дисертацията, са използвани събраните и анализирани емпирични данни, които са както принос на самия автор, така и са дело на други учени, работещи в това направление. Авторът отбелязва, че проведените от него експериментални лабораторни изследвания не са обект на анализ и обобщение в дисертацията, а получените експериментални данни са използвани при последващото параметризиране и валидиране на равновесните модели.

При използването на източници на други автори, проф. Христов коректно и точно цитира чуждите трудове. Считам, че са използвани и цитирани представителен брой автори, работещи по тематиката на дисертацията.

6. Автореферат

Авторефератът има обем от 48 стр. и напълно съответства на изискванията на нормативните актове. Считам, че авторефератът правилно отразява основните положения и приносите на дисертационния труд.

7. Публикации по дисертационния труд

В автореферата има списък от общо 59 авторски публикации, свързани с темата на дисертационния труд. Не приемам за правилно включването на дисертацията за ОНС „доктор” в списъка с публикации по дисертацията. От останалите 58 публикации, 49 са с импакт-фактор и/или импакт-ранг, като в Q1 са 11, в Q2 – 19, в Q3 – 12 и в Q4 – 7. Най-голям брой от публикациите са в научния журнал Journal of Chemical Thermodynamics (16 бр.) следван от CALPHAD-Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (9 бр.).

8. Въздействие на дисертационния труд

Справката в WebOfScience показва общо 1179 цитирания и h-index 22. За отбелязване е публикацията с N. Moller [48] с 169 цитирания според Google Scholar. Тази внушителна научна продукция на автора и забелязаните цитирания са убедително и категорично доказателство, че резултатите от дисертационния труд са станали достояние на широката научна общност и са послужили за значителен напредък на световната наука.

9. Оценка на личния принос на кандидата

Добро впечатление прави фактът, че повече от половината от представените ста-

тии са самостоятелни. Сред останалите статии броят на съавторите е както следва: с 1 съавтор: 4 бр., с 2: 7 бр., с 3: 13 бр., с 4: 1 бр. и с 5: 2 бр. Считам за равностойно участието на проф. Хр. Христов в публикациите в съавторство.

10. Критични бележки и въпроси по дисертационния труд

Добре би било, ако към документите по дисертацията бяха приложени и авторските статии, включени в труда който се оценява, както се процедира при повечето защити на дисертации. Това би било улеснение за журито. Също така на места са останали непреведени от английски на български език пасажи (например на стр. 106) или изречения.

Въпроси по дисертационния труд нямам.

11. Заключение

Като се вземе предвид гореизложеното и фактът, че кандидатът удовлетворява всички необходими изисквания на ЗРАСРБ, ППЗРАСРБ и правилника на ШУ, предлагам на научното жури да гласува положително и проф. д-р Христомир Йорданов Христов да получи научната степен **„доктор на науките”** по професионално направление: **4.2. Химически науки**, научна специалност „Неорганична химия”.

Шумен, 10.10.2019 г. **Член на научното жури**:

/проф. д.м.н. Николай Янков/