**РЕЦЕНЗИЯ**

**от доц. д-р Румяна Янкова, катедра "Неорганична и аналитична химия" при Университет "Проф. д-р Асен Златаров" - Бургас**

на дисертационен труд за научната степен „доктор на науките", представен от 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"

Определена съм за член на Научното жури съгласно заповед № РД-16-100/27.09.2019 г. на Ректора на ШУ. На проведеното първо заседание на Научното жури на 03.10.2019 г. бях избрана за рецензент. Всички материали по дисертацията получих на електронен носител.

**1. Биографична справка**

Д-р Христомир Йорданов Христов е роден през 1958 год. в гр. Шумен. Завършва Физико-химическия факултет на Московския Институт по стоманата и сплавите със специалност „Физико-химически изследвания на металургичните процеси" през 1984 год. с отличен успех. Започва работа в Шуменски Университет „Еп. Константин Преславски"- Катедра по Химия като хоноруван асистент по Обща и неорганична химия и научен сътрудник (05/1984 - 12/1987), след което работи около година в Изследователски Институт „Електрон" – Шумен като Инженер Химик-Технолог. През 1993 год., след редовна докторантура в Института по Обща и Неорганична Химия на БАН, защитава дисертация на тема "Образуване на смесени кристали между двойни соли от карналитов тип" под ръководството на проф. дхн Христо Баларев от "Лаборатория по Неорганични Соли" (ЛАНС). Следва работа в ИОНХ-БАН 1993 – 1999 год. като научен сътрудник.

Д-р Христов е специализирал и работил в периода 1993 – 2015 год. като пост-докторант или гостуващ учен в редица изследователски центрове и университети от Русия (Института по Обща и Неорганична Химия „Курнаков", Руска Академия на Науките, Москва, 1993-1995), Германия (Технически Университет, Фрайберг, Германия; 1995 – 1996 г.), Япония (Университета на Чиба, Катедрата по Химия, Факултет по Наука, Япония; 1998-1999 г.). В САЩ работи като учен изследовател (постоянна позиция) в Университета на Калифорния, Сан Диего (Univ. California, San Diego, UCSD), Департамент по Химия и Биохимия в периода от 1999 до 2012 г. До 2009 е в Групата по химично и геохимично моделиране – световен лидер в областта на разработването на световната термодинамична база от данни за природни флуидни системи, а от 2009 до 2012 г. д-р Христов е изследовател в научната група по Атмосферна Химия на Нобеловия лауреат по химия за 1995 г. проф. Марио Молина. През 2011 е гост-лектор в Щатския университет San Marcos в Калифорния (САЩ), като води курс по Гео-Еко Науки. В периода на работа като изследовател в Университета в Сан Диего (UCSD) (от 1999 до 2012

г.) д-р Христов получава изключително научно признание. По предложение на Университета Американското правителство го удостоява със звание Изключителен Професор/Изследовател на САЩ (Outstanding US Professor/Researcher) (2007 г). През 2008-2009 г. е поканен като гостуващ учен по програмата за „Изключителни Изследователи“ на Френското геологическо дружество-French Geological Survey-BRGM. Като основател и единствен собственик на консултантска компания GeoEco Consulting 2010, ситуирана в Сан Диего, е изпълнявал редица проекти и обучавал изследователи за научни организации от Канада, Япония и Франция. Научните проекти, по които е работил в периода 1999 – 2016 год. са финансирани от Американската Научна Фондация (NSF-USA), Департамента по Енергия (DOE-USA), Калифорнийската Комисия по Енергия (CA-USA), Калифорнийския университет Сан Диего (UCSD), Френското геологическо дружество (BRGM), Технологичен иновационен център Албърта (AITF-Канада), Канадската (NWMO-Canada) и Френската (ANDRA) организации за обезвреждане на ядрени отпадъци, както и задачи финансирани от индустрията (Mitsubishi Chemicals – Japan). През тези повече от 25 години извън България опита в международното научно сътрудничество на проф. Христов се допълва и от 24 краткосрочни специализации и покани за гост-лектор в Университета в Сан Диего в Калифорния (САЩ), Френското геологическо дружество, Руската академия на науките, Френската академия на науките (CNRS), Технологичен институт в Нагоя (Япония), Университет Ritsumeikan (Япония), ИОНХ-БАН и много други.

Ръководител е и на проект и научен екип по програмата на МОН за „Завръщане на Български учени работещи в чуждестранни университети” (2009-2013 г.) с БО-ИОНХ - БАН. За изключителната си работа като изследовател и ръководител на научни проекти през 2012 г. биографията на д-р Христов е включена в юбилейното 50$^{то}$ издание на престижния сборник „Кой кой е в света”. От Април 2016 г. е Професор по Теоретична Химия в Шуменски Университет „Еп. К. Преславски”, Факултет по природни науки, катедра Химия. Според представените документи д-р Христов продължава своята изключително активна и продуктивна научна и проектна дейност и като преподавател в Шуменския Университет.

Не познавам лично кандидата, но съм в близък контакт с мои бивши колеги от катедрата по Неорганична Химия в Университет “Проф. д-р Асен Златаров” (доц. д-р Т. Ойкова, Д. Барков, Д. Михов), които са работили много активно с д-р Христов в периода 1994-1999 г. по експериментални и теоретични изследвания на селенатни системи. Колегите са с отлични впечатления от неговата работа като изследовател и колега.

**2. Представени материали във връзка с изпълнението на нормативната уредба**

В съответствие с чл. 35 от Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ) и правилника прилагането му (ППЗРАСРБ), са представени всички необходими документи:

- справка от НАЦИД за диплома за образователна и научна степен „доктор” в професионално направление 4.2 Химически науки, научна специалност „Химия”;

- справка по изпълнение на минималните национални изисквания;

- дисертационен труд (Дисертационният труд е подготвен самостоятелно и не повтаря буквално темата и значителна част от съдържанието на дисертацията по ОНС „доктор“. Дисертационният труд съдържа теоретични обобщения и решения на големи научни и научно-приложни проблеми, които съответстват на съвременните постижения и представляват значителен и оригинален принос в науката – изискване на ЗРАСРБ.);

- автореферат (48 стр.) на български и английски език;

- професионална автобиография на български и английски (curriculum vitae) език;

- списък с публикациите на дисертанта;

- справка за научните приноси на дисертацията;

-списък с цитиранията на публикациите.

**3. Наукометрични показатели. Изпълнение на минималните национални изисквания за „доктор на науките”.**

Проф. д-р Христомир Христов успешно е преминал процедурата по регистрация в Регистъра за академични длъжности и дисертации в НАЦИД за академичната длъжност „Професор” (при изискуем минимален брой точки = 600), без това да е изискване по настоящия конкурс за Доктор на Науките.

Съгласно данните в представените материали и справката по данни от световните бази от данни (Web Of Science (WOS), Scopus, Google Scholar (GS) и Research Gate (RG)), точките на докторанта значително надхвърлят (около 10 пъти) изискуемите точки съгласно минималните национални изисквания за „доктор на науките” в направление 4.2 Химически Науки, а именно: общ брой точки = 350, от които се изискват 150 т. за ОНС „доктор” (докладвана в справката) и дисертационен труд за „доктор на науките”, 100 т. от Научни публикации (Група Г) и 100 т. от цитати и внедрени „полезни модели“ (група Д).

Съгласно получения документ „списък с публикациите“, WOS, Scopus, GS, и RG д-р Христов (като Christomir Christov или C. Christov) е автор на *87 научни публикации* в международни списания (*34 самостоятелни публикации*), от които *68 с импакт фактор* и *30 самостоятелни публикации с импакт факт*ор при сумарен импакт фактор ≈ *140*; Индивидуален импакт фактор: ≈ *98*; $Q_{total}$ ≈ 1450 точки, от които 41 статии с Q1 (> 1000 т.). В допълнение д-р Христов има *71 участия* с доклади в международни научни конференции и *24 участия* като персонално поканен лектор в специално организирани семинарни сесии и работни срещи в топ-изследователски центрове и организации. За последните 5 години (2015-9/2019) той има 15 публикации в международни списания и в сборници от конференции и участва с 21 доклада на международни научни конференции.

Съгласно „списъка от публикации“ и автореферата автора участва в конкурса с 59 публикации, като публикациите включени в дисертацията за получаването на ОНС

„доктор“ (номер А1, А2, А5, А6, А7 и А8 от списъка от публикации), са извън темата на дисертацията и не са разглеждани в този труд.

Група Д: По данни на Web Of Science (WOS): 1181 цитирания от 59 научни статии с импакт фактор, приблизително 2360 т.; по данни на Google Scholar и Research Gate > 1400 цитирания от 66 научни статии, т.е. приблизително 2800 т.

*Н-фактор:* Google Scholar: Н-фактор = 25 (Н-фактор за самостоятелни публикации = 19); i10 index = 51; за последните 5 години > 570 цитата; от 2014 > 650 цитата; Н-фактор = 15 и i10 index = 22; Web of Science (59 публикации в профила): Н- фактор = 22; Scopus (46 публикации в 2 профила): Н-фактор = 20.

Показателите на д-р Христов в Research Gate (Изследователски портал) също са впечатляващи: Научен интерес > 900; Четения (reads) > 14 000; Последователи: 380.

Трябва да се отбележи, че една голяма част от получените от проф. Христов моделни параметри са директно внедрени (без изменения) в най-мощните световни бази от термодинамични данни. Всички тези разработени от него модели (>500) имат значителен принос в изграждане на базата от данни на International Committee on Data for Science and Technology (CODATA), National Institute of Standards and Technology (NIST), NASA, Joint Expert Speciation System (JESS), International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) и др. Термодинамичните модели за по-вече от 200 разтвора и твърди фази са използвани при разработването на правителствени стратегии за геохимично съхранение и обезвреждане на ядрените отпадъци на САЩ (“data.ypf” thermodynamic database of Yucca Mountain Project), на Европейския съюз (THEREDA-THermodynamic REference DAtabase) и Канада (NWMO-Nuclear Waste Management Organization). Редица модели са внедрени в много Питцер — тип модели на други научни групи за решаването на геохимични и екологични проблеми, а именно в базата от данни на USGS (US Geological Survey), US DOE (US Department of Energy), BRGM (French Geological Survey), China Academy Sciences, AIFT (Alberta Innovations Future Technology, Canada), Nuclear Energy Agency (NEA) (thermodynamic database of Selenium), INIS (International Nuclear Information System) и др.. Съгласно представената справка „Цитати Термодинамични Данни” проф. Христов е цитиран повече от 330 пъти в посочените световни бази от данни. Тези изключително важни за световната наука цитирания и директно внедрени в най-широко използваните световни бази от данни модели (>500) не се отчитат в базите на Web Of Science (WOS), GS, или Scopus.

**4. Дисертационен труд**

***Основната цел*** на дисертацията е 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. Моделите са разработени на базата на подхода на Питцер за междуйонно взаимодействие.

Дисертационният труд се състои от увод и 3 глави, с общ обем от 127 стр. и съдържа 12 таблици и 42 фигури. Библиографията се състои от 127 литературни източника, като всички са на латиница. Дисертацията включва следните основни параграфи:

- ***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***: а) въведение в проблемите на атмосферната химия; б) поведението на Al в природни флуидни системи; в) програмите за геохимично съхранение на ядрени отпадъци (с. 9-19).

- ***Научна методология на изследванията*** (с. 19-33): а) подход на Питцер за междуйонно взаимодействие в електролитни системи; б) подходи за подбор и определяне на моделните параметри за бинерните системи; в) моделна технология за определяне параметрите на смесване; г) определяне на термодинамичните характеристики на кристализиращите твърди фази от наситените и преситените бинерни, тройни и многокомпонентни разтвори.

- ***Получени резултати*** (с. 36-99):

*Експериментални лабораторни изследвания*

Изследователската работа на д-р Христов включва различни експериментални изследвания на разтвори и твърди фази, анализ на фазови равновесия в дву-, три- и многокомпонентни системи с физични, химични и аналитични методи (синтез, охарактеризиране с химичен анализ, рентгеноструктурен анализ, диференциална сканираща калориметрия, термодинамични изследвания на електролитни разтвори с използване на изопиестичен метод за определяне на данни за активностите, съ-кристализация на двойни соли и др.), изследвания последователността на кристализация чрез метода на протонната спектроскопия (XPS). Получените експериментални данни са използвани при последващото параметризиране на равновесните модели. Проведените спектроскопски изследвания (XPS) са използвани за валидиране на модела за разширената морска система. Проведените от д-р Христов и съавтори експериментални лабораторни изследвания не са обект на анализ и обобщение в дисертацията.

*Моделни изследвания*

Разработването на термодинамичните модели от д-р Христов се базират на полуемпиричните уравнения в модела на Питцер и на подхода за твърдо-течно равновесие на групата по химично моделиране на Калифорнийския Университет (UCSD). Чрез тези способи и с използване на експериментални данни (получени и налични в литературата) са генерирани нови термодинамични данни и функции необходими за параметризирането на модели, и позволяващи изчисляване с висока точност на термодинамичната активност на разтворителя и разтвореното вещество и твърдо-течното равновесие в природни флуиди.

Описаните в дисертацията моделни изследвания включват: а) модел за стабилно и метастабилно равновесие в разширената морска система и неговото приложение; б) термодинамичен модел за геохимичното поведение на Al(III), Fe(II,III), Cr (III) в

природните води; в) разработени модели с потенциално директно приложение в индустрията; г) валидиране на моделите за бинерни и многокомпонентни системи с кристализация на стехиометрични твърди фази; д) модели за системи с кристализация на нестехиометрични твърди фази и определяне на термодинамични характеристики на твърди разтвори от различен тип; е) непубликувани напълно параметеризирани модели за природни флуиди.

***- Научни приноси***

Богатият опит и квалификация на д-р Христов в теоретичните и експериментални изследвания му дават възможност да прилага подхода на моделиране към различни системи в индустрията, геологията и околната среда. Например за оценка на преноса и образуването на минерални натрупвания при добива на природен газ, нефт и геотермална енергия, дизайн и оценка на стратегията за съхраняване на ядрени и кисели минни отпадъци, за пречистване на води и киселинни дъждове, за изследване на химичното поведение на хидротермалните минерални води и използването на геотермалната енергия, за оптимизиране на технологията на производство на минерални морски ресурси, като Литиеви, Магнезиеви, Бромидни, Алуминиеви и Хромни минерали.

В научната работа на д-р Христов могат да се откроят следните основни приноси: 1) Разработване на нови подходи за изчисляване на параметри на междуйонно взаимодействие в бинерни и смесени системи, както и 2) на нови моделни технологии за определяне на термодинамични характеристики на равновесните твърди фази. Разработените точни модели са използвани за прогнозиране на определени термодинамични свойства на различен тип системи, за критично еволюиране коректността на получени експериментални данни в много области на химичните изследвания и дават теоретично описание за равновесието в природните системи. Така напр. компютърния модел за разширената морска система е приложен, за да бъде направена оценка на втечняващото поведение на морските аерозоли в атмосферата и тяхното влияние върху радиационните атмосферни характеристики, глобалното затопляне и климатичните промени.

**5. Експертна дейност**

Проф. Христов е рецензент от > 25 години за > 25 научни списания, вкл.: *Geochimica Cosmochimica Acta, CALPHAD (CALculation of PHAase Diagrams), J. Chem. Thermodynamics, J. Solution Chem., Fluid Phase Equilibria, J. Chem. & Engineering Data, J. Hazardous Materials, Separation and Purification Technology, Environmental Science and Technology, Thermochimica Acta, Bulgarian Chem. Communications, и др.* От 1994 г. до сега е рецензирал повече от 200 публикации, изпратени за печат. За изключителен принос за издигане качеството на научните списания и по предложение на редакторите на списанията *CALPHAD, J. Chem.Thermodynamics, Fluid Phase Equilibria* научното издателство *ELSEVIER* издава на д-р Христов сертификат за Топ Рецензент на 2011 година

(TOP REVIEWER 2011) и Outstanding Reviewer (Изключителен Рецензент) (2015 -2018). Получил е сертификат за Outstanding Reviewer и от American Chemical Society Journals (2015).

От 2015 е член на експертния съвет на Европейския Съюз (EU) по еволюиране и оценка на Научни Проекти по Програмата Хоризонт 20/20 в научни направления 1) Химия и 2) Околна среда (Environment).

**6. Критични бележки**

В част от документите има смесване на български и английски език, което е могло да бъде избегнато.

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Проф. Христов притежава задълбочени фундаментални познания в Общата-, Неорганичната-, Теоретичната-, Гео- и Физико- Химията, както и в Приложната Математика и Компютърните науки, богат професионален опит и добри комуникационни и организационни умения, придобити по време на съвместната научноизследователска работа с колеги от различни водещи в световен мащаб научни институции в 7 държави по света, ръководството на научни проекти, както и работата му като университетски преподавател и лектор. Всичко казано до тук ми дава основание на основата на анализа на представените от проф. д-р Христомир Христов документи (указани в ЗРАСРБ и правилника на ШУ), дисертация и научни трудове, тяхната значимост, съдържащите се в тях научни, научно-приложни и методически приноси, и имайки предвид и разработените от него научно-приложни проекти, убедено да предложа на почитаемото Научно жури да подкрепи неговата кандидатура за получаване на научната степен „доктор на науките” по професионално направление: 4.2 Химически науки, научна специалност „Неорганична химия”.

20. 11. 2019 г. Рецензент:

доц. д-р Румяна Янкова