

## СТАНОВИЩЕ

от проф. д-р **АЛБЕНА ДЕЧЕВА-ЧАКЪРОВА**, член на научното жури  
относно дисертационния труд на докторантката на самостоятелна подготовка към

**Института по обща и неорганична химия-БАН**

**АНТОНИНА ПЕТРОВА КОВАЧЕВА**

на тема: **„Природни и моделни водни системи - експериментално изследване,  
термодинамично моделиране и практическо приложение”**

представен за придобиване на образователната и научна степен **„доктор”**

по научна специалност 4.2 „Химически науки” (Неорганична химия)

с научни ръководители: проф. д-р **Диана Рабаджиева**

доц. д-р **Стефка Тепавичарова**

Докторантката **Антонина Петрова Ковачева** е зачислена на самостоятелна подготовка към Института по обща и неорганична химия-БАН по професионално направление 4.2 Химически науки (неорганична химия) на 01.07.2019 г. и отчислена с право на защита до 5 години, считано от 01.07.2022 г. Темата на дисертационния труд е **„Природни и моделни водни системи - експериментално изследване, термодинамично моделиране и практическо приложение”**. Представеният дисертационен труд се състои от **170** страници, съдържа **22** фигури, **27** таблици и са цитирани **340** литературни източници.

Термодинамичното моделиране на химични процеси във водно-солеви системи е средство за интерпретиране, прогнозиране и изучаване поведението на системите по отношение на редица техни свойства, като напр. комплексообразуване, разтворимост и кристализация/утаяване. Математическите уравнения, на които то се основава, свързват термодинамичните величини, описващи системата, и позволяват бързо и точно да се анализират голям брой взаимно свързани фактори и едновременно протичащи процеси. Затова термодинамичното моделиране намира приложение за бързо и ефективно решаване на практически задачи, отнасящи се до екологични и до технологични проблеми в сложни водни системи.

**Цел** на настоящата дисертация е прилагане на подбрани математически модели, базиращи се на принципите на химичната термодинамика, за прогнозиране, изчисляване и оценяване на химични форми на токсични метали и на химични равновесия на макрокомпонентите в електролитни многокомпонентни водни разтвори – природни води с различна соленост и моделни водни почвени разтвори за решаване на практически казуси.

За постигане на посочената цел са поставени следните **задачи**: създаване на входяща база данни за термодинамични моделирания чрез експериментални аналитични изследвания на повърхностни води, почви и водни почвени екстракти, различаващи се по йонна сила и степен на замърсяване, от защитени и от индустриално замърсени райони; приложение на различни модели за термодинамично моделиране разпределението на химичните форми на преходните „метали-микрокомпоненти“ и практическо приложение на получените резултати от моделирането.

Литературният обзор е обширен (цитирани са общо **340** литературни източника) и демонстрира добрата информираност на докторантката, задълбочените ѝ познания по темата и способността ѝ да борави критично с научната литература и факти.

Обектите на изследване са природни води с висока йонна сила от “Поморийското езеро” и почвени и водни проби с ниска йонна сила от районите „Мъглиж“, „Раднево“ и „Бобов дол“. Всички те са подложени на термодинамично моделиране, като при моделните почвени разтвори се изследва връзката *химични форми–фитоаккумуляция*. Изследвани са и химични равновесия в наситени разтвори от морски тип с практическо приложение за получаване на  $MgCO_3 \cdot 3H_2O$  от морски луги.

**Основни приноси** на настоящия дисертационен труд са доказване на приложимостта на три математически модела, базиращи се на термодинамичен подход за изчисляване на химични форми на елементите в повърхностни природни води и в моделни водни почвени разтвори. Чрез изследване на почви, водни почвени екстракти и растителност в три различни по характер на замърсявания райони е изследвана връзката *химична форма – фитоаккумуляция*, за която в литературата данните са ограничени. На базата на изчислени полета на кристализация на стабилни и метастабилни соли в четирикомпонентните карбонатни системи от морски тип  $Na^+$ ,  $Mg^{2+}/Cl^-$ ,  $CO_3^{2-}/H_2O$  и  $Na^+$ ,  $Mg^{2+}/SO_4^{2-}$ ,  $CO_3^{2-}/H_2O$ , както и на техните кристалохимични разглеждания, е разработена технология за получаване на едрокристален  $MgCO_3 \cdot 3H_2O$  от морски луги, доказана чрез лабораторни и пилотни експерименти

Получените резултати са подредени прегледно, използвана е подходяща графична визуализация за тяхното представяне. Описаните в дисертацията изследвания са проведени на високо научно ниво, подробно и изчерпателно, което убедително демонстрира изследователските качества на докторантката.

**Антонина Ковачева** е съавтор в общо три научни публикации, всичките от които с висок импакт фактор и квартали, едната съответно с **Q2 (20 точки)** и другите две с **Q1 (с по 25 точки)**. **Общата сума е 70 точки при необходими 30.** В двете от публикациите с квартал **Q1** докторантката е първи автор, което доказва съществен ѝ принос направените изследвания. Върху първата статия има забелязани два цитата, а върху втората и третата – пет и седем съответно, което доказва, че публикуваните резултати вече са получили международен отзвук. Части от дисертационния труд са докладвани на научни форуми в страната и чужбина – общо **7 участия**. Съдържанието на публикациите и автореферата съответства на основните положения и приноси на дисертационния труд. По същество нямам никакви критични забележки към качествата на дисертацията.

В заключение считам, че е извършено задълбочено научно изследване върху една изключително перспективна тематика. Освен от съдържанието и оформянето на самата дисертация, много добро впечатление имам и от докладването на докторантката на предзащитата на дисертационния ѝ труд. На поставените въпроси отговаряше точно и ясно, с което демонстрираше познанията си върху проблематиката. Държа да подчертая, че изобщо не се съмнявам във факта за личната заслуга на докторантката **Антонина Ковачева** в изработването и получаването на резултатите по дисертационния ѝ труд.

Дисертационният труд на докторантката **Антонина Ковачева съдържа научни, научно-приложни и приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката и отговарят на всички изисквания** на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ) и Правилника за прилагане на ЗРАСРБ. Поради гореизложеното, убедено давам своята **положителна оценка** за проведеното изследване, представено от рецензираните по-горе дисертационен труд, автореферат, постигнати резултати и приноси, и предлагам на почитаемото научно жури да присъди образователната и научна степен „**доктор**” на **Антонина Петрова Ковачева** в област на висше образование: **4. Природни науки, математика и информатика**, професионално направление **4.2. Химически науки**, научна специалност **4.2. Химически науки (Неорганична химия)**.

10.07.2024 г.

Подпис:

Проф. д-р Албена Дечева-Чакърва