

СИНТЕЗ И ИЗСЛЕДВАНЕ НА СВОЙСТВАТА НА СЕЛЕНИТИ НА f-ЕЛЕМЕНТИ

ПРОЕКТ 2017-ФРз-02

**Тема на проекта:**  
Синтез и изследване на свойствата на селенити на f-елементи.

**Ръководител:**  
доц. д-р инж. Милувка Станчева

**Работен колектив:**  
доц. д-р инж. Цв. Димитров, ас. Илиана Николова, доц. д-р Р. Янкова, Студенти: И. Иванова, М. Тодорова, И. Костова, М. Крумова, М. Стефанова, А. Атанасов, К. Халаджов, М. Йорданова.

**Адрес:** 7200 Разград, бул. "Апр. възстание" 47, Русенски университет "Ангел Кънчев"  
**Тел.:** 084 - 266 86  
**E-mail:** mstancheva@uni-ruse.bg

**Цел на проекта:**  
Синтезиране на селенити на f-елементи, като: церий, неодим, самарий, ербий, диспрозий и тяхното охарактеризиране.

**Основни задачи:**  
Разработване на методика за хидротермален синтез на селенити;  
Разработване методика за определяне на Ce(III), Nd(III), Sm(III), Er(III);  
Охарактеризиране на съединенията чрез рентгенографски, термогравиметрични и ИЧ спектроскопия;  
Пресмятане на молекулната и електронна структура с помощта на квантовохимични методи;  
Изследване кинетиката на дехидратация и разлагане в неизотермичен режим на нагряване.

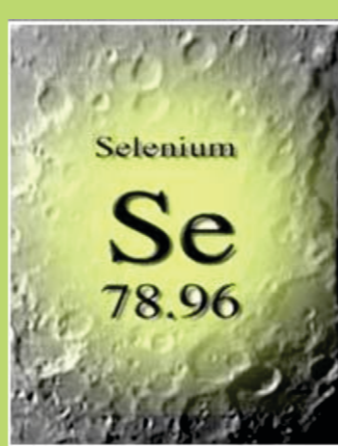
**Основни резултати:**  
Синтезиране на селенитите на Gd(III), Ce(III), Nd(III), Sm(III), Er(III);  
Разработана е методика за определяне на f-елементите;  
Получените съединения са охарактеризирани чрез рентгенографски, термогравиметрични и ИЧ спектроскопски анализи.

**Публикации:**  
Stancheva M., Ts. Dimitrov, Synthesis of ytterbium selenite and selenide, Eurasian Union of Scientists, Monthly scientific journal, 2017, №38, Chemical Sciences, 73-77, Impact Factor: 0,388 (2015)  
Mustafa Ю., Г. Байкушева-Димитрова, С. Гениева, Р. Янкова, М. Станчева, Определяне стандартните ентропии на образуване на селенити на рядкоземните елементи, Наука и технологии, т. VII, 2017, 66-70  
Гениева С., Г. Байкушева-Димитрова, Р. Янкова, М. Станчева, Цв. Димитров, Кинетика на термично разлагане на Ce<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·3H<sub>2</sub>O и Nd<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·5H<sub>2</sub>O, Научни трудове РУ "А.Кънчев", Русе, том 56, серия 10.1, 2017, ISBN ISSN 1311-3321.

**Други:**  
Йорданова М., М. Тодорова, Синтез и изследване на селенитите на гадолиния, Сборник доклади на студентска научна сесия на Русенски университет СНС'17, 2017, 124

АНОТАЦИЯ

ПРИНОСИ И РЕЗУЛТАТИ



1. Изучена е цялостно диаграмата на състоянието на системата Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub> - SeO<sub>2</sub> - H<sub>2</sub>O при 100°. В системата се образуват два селенита. Съставът им е установен по методите на Шрайнемакерс и чрез химичен, рентгенофазов и кристалооптичен методи.

2. Определени са кристалографските параметри на GdH(SeO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O.

3. Изследвана е термичната дисоциация на Gd<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·4H<sub>2</sub>O и GdH(SeO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O. Механизмът на термична деструкция е доказан чрез химичен анализ и рентгенофазов анализ.

4. Получените съединения са с доказана висока чистота. Те могат да послужат, като изходни вещества за получаването на съответните селенити, които се използват като полупроводници, за микротроре и препарати за борба срещу вредители в растениевъдството.

5. Чрез утаяване във водни разтвори са получени цериев и неодимов селенит с химичен състав Ce<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·3H<sub>2</sub>O и Nd<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·5H<sub>2</sub>O, които са охарактеризирани чрез термогравиметричен анализ.

6. На база термогравиметричните криви от термичния анализ е направено кинетично охарактеризиране на дехидратацията и разлагането на Ce<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·3H<sub>2</sub>O и Nd<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·5H<sub>2</sub>O чрез осем изчислителни процедури. Механизмът на изследваната реакция зависи от вида на функцията g(t) и не се повлиява от прилагания метод.

7. Изчислени са стандартните ентропии на синтезираните селенити от типа Ln<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>, където Ln = Sc, Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, по четири предложени метода. Определена е средноаритметичната стойност на S<sub>298</sub><sup>0</sup> за всяко съединение.

8. Създадена е технология за синтезиране на селенити на f-елементите.



PROJECT 2017-FRz-02

**Project title:**  
Synthesis and investigation of the selenite properties of f-elements.

**Project director:**  
Assoc. Prof. Eng. Miluvka Stancheva PhD

**Project team:**  
Assoc. Prof. Eng. Ts. Dimitrov PhD, Asst. Iliana Nikolova, Assoc. Prof. R. Yankova PhD  
Students: I. Ivanova, M. Todorova, I. Kostova, M. Krumova, M. Stefanova, A. Atanasov, K. Haladzhov, M. Yordanova

**Address:** RU - Branch Razgrad, 47 Aprilsko vastanie boul., 7200 Razgrad, Bulgaria  
**Phone:** +359 84 - 266 086  
**E-mail:** mstancheva@uni-ruse.bg

**Project objective:**  
Synthesizing selenites of f elements like: cerium, neodymium, samarium, erbium, dysprosium and their characterization

**Main activities:**  
Developing a method for hydrothermal synthesis of selenites;  
Developing a method for determination of Ce(III), Nd(III), Sm(III), Er(III);  
Characterization of compounds through radiographic, thermogravimetric and infrared spectroscopy;  
Calculation of molecular and electronic structure by using quantum-chemical methods;  
Research on dehydration kinetics and decomposition in non-isothermal regime of heating

**Main outcomes:**  
Selenites of Ce(III), Nd(III), Sm(III), Er(III) have synthesized;  
A method for determining f-elements has been developed;  
The compounds obtained are characterized through radiographic, thermogravimetric and infrared spectroscopic analyses.

**Publications:**  
Stancheva M., Ts. Dimitrov, Synthesis of ytterbium selenite and selenide, Eurasian Union of Scientists, Monthly scientific journal, 73-77, 2017, №38, Chemical Sciences, Impact Factor: 0,388 (2015)  
Mustafa Y., Baykushova-Dimitrova S., Genieva S., Yankova R., Stancheva M., Determination of standard entropies on selenite formation of rare earth elements, Science and technologies, vol. VII, 2017, 66-70  
Svetlana Genieva, Ginka Baikushova-Dimitrova, Romyana Yankova, Miluvka Stancheva, Tsvetan Dimitrov, Kinetics of thermal decomposition of Ce<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·3H<sub>2</sub>O and Nd<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·5H<sub>2</sub>O, Proceedings University of Ruse "Angel Kanchev", vol. 56, book 10.1, 2017.

**Others:**  
Yordanova M., Todorova M., Synthesis and investigation of gadolinium selenites, Proceedings of the Student Scientific Session of the University of Ruse SNS'17, 2017, 124

ИЗОТЕРМА НА РАЗТВОРИМОСТ НА СИСТЕМАТА Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SeO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O ПРИ 100°C.

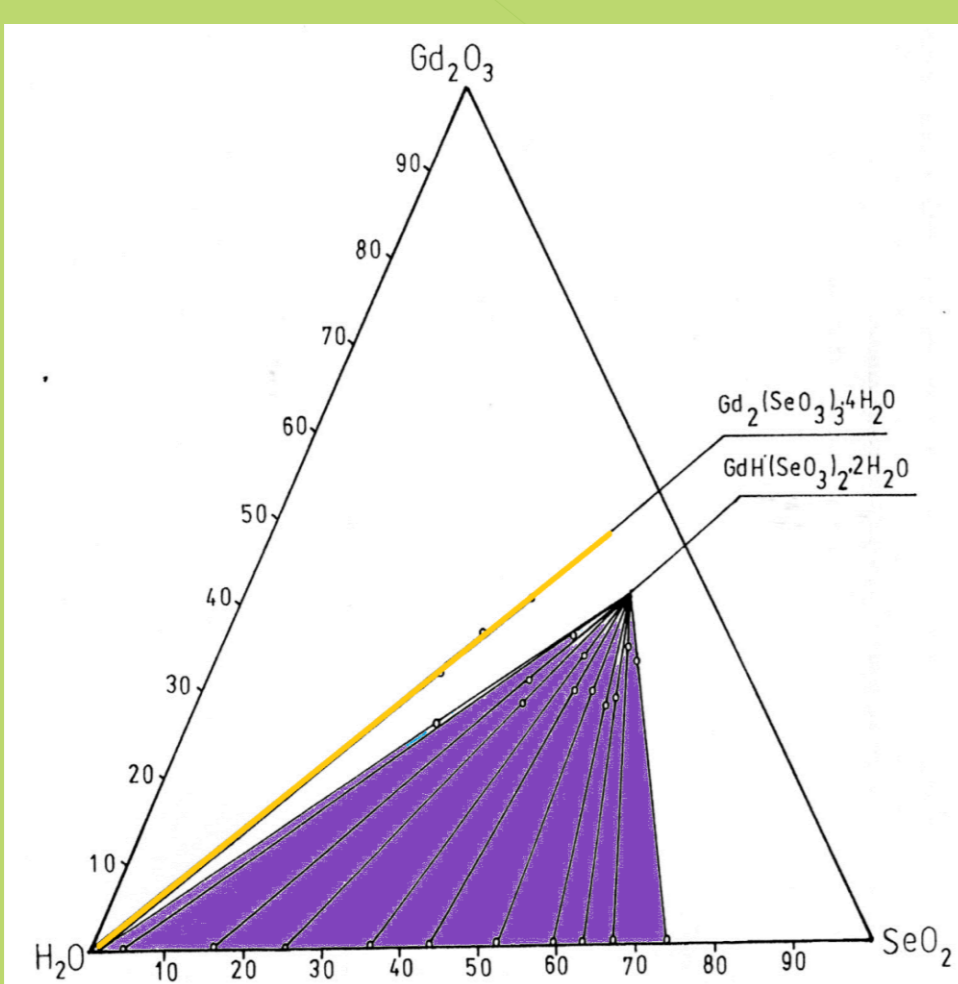
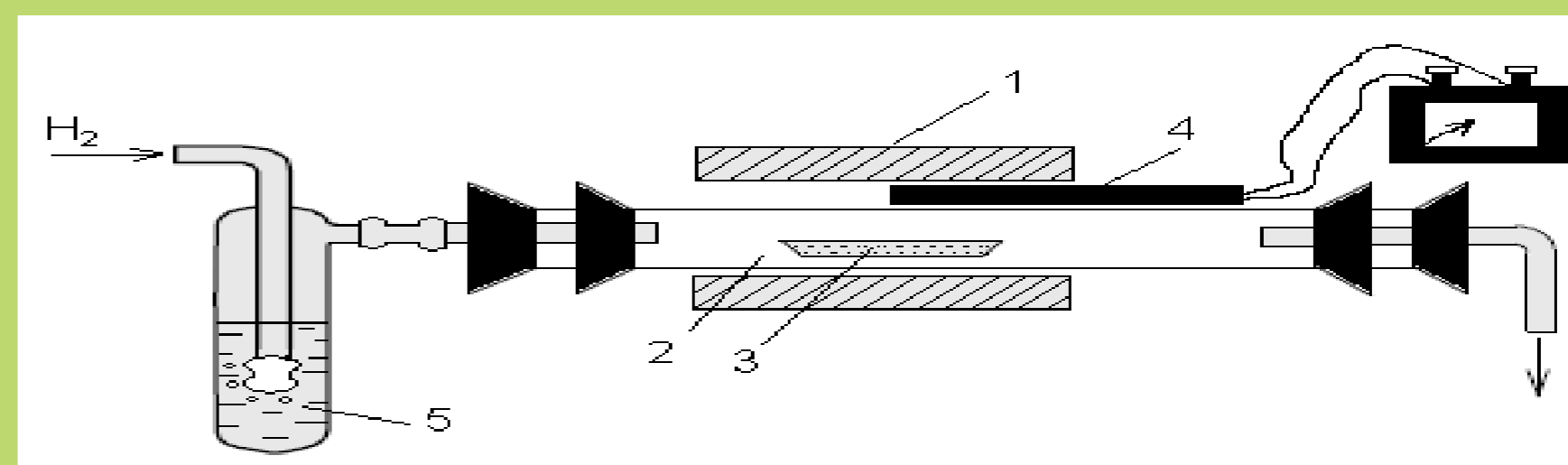
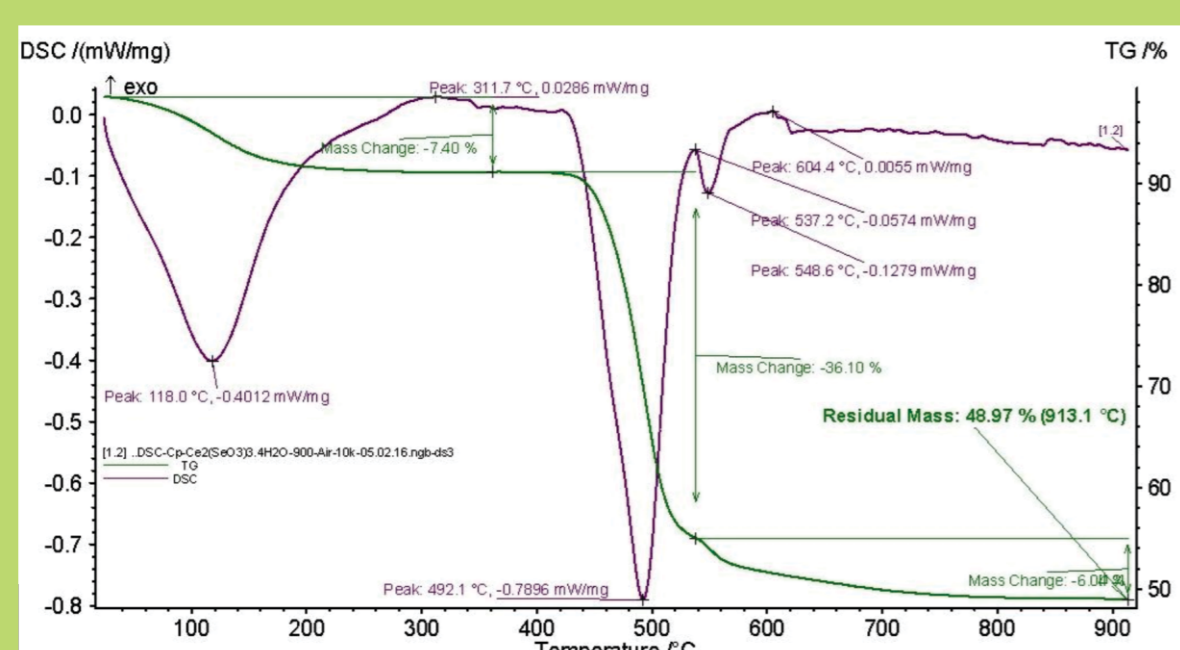


СХЕМА НА РЕДУКЦИЯ

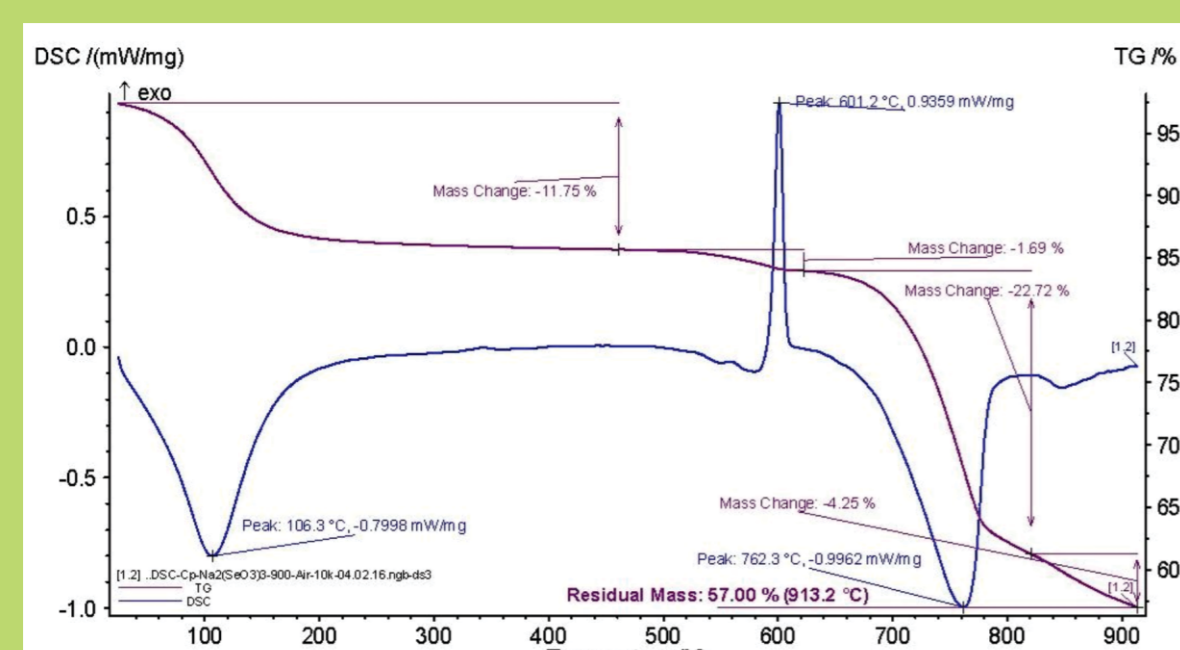


1- тръбна пещ, 2 - кварцова тръба, 3- ладийка, 4- нагревателя, 5- сушителя

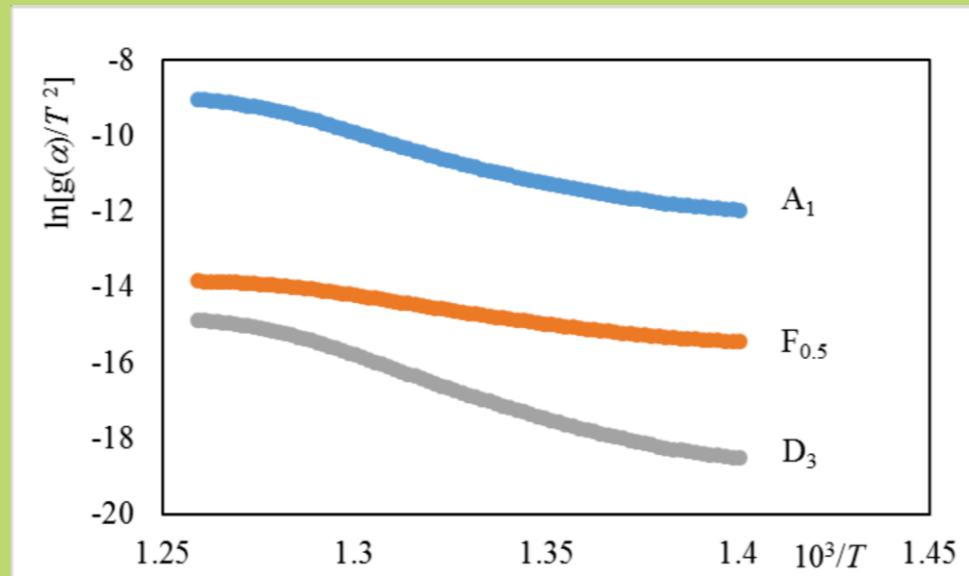
МЕХАНИЗЪМ НА ТЕРМИЧНА ДИСОЦИАЦИЯ НА GdH(SeO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·2H<sub>2</sub>O



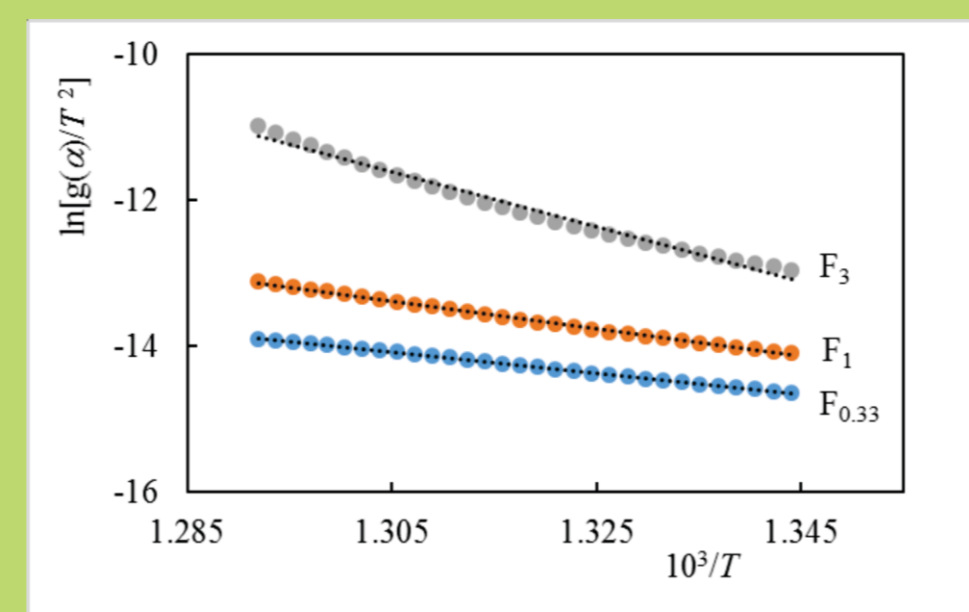
ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИ ДАННИ ЗА ТЕРМИЧНОТО РАЗЛАГАНЕ НА Ce<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·3H<sub>2</sub>O



ЕКСПЕРИМЕНТАЛНИ ДАННИ ЗА ТЕРМИЧНОТО РАЗЛАГАНЕ НА Nd<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·5H<sub>2</sub>O



Линейна зависимост по метода на Coats-Redfern (Уравнение 4) за различни кинетични модели на термично разлагане на Ce<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>



Зависимост на ln[g(t)/T^2] от 1/T за термичното разлагане на Ce<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>3</sub> по метода на WanJun при различни стойности на n за F<sub>n</sub> моделни кинетични уравнения

СТАНДАРТНИ ЕНТРОПИИ S<sub>298</sub><sup>0</sup> НА СЕЛЕНИТИ НА РЕДКОЗЕМНИТЕ ЕЛЕМЕНТИ

Методи за определяне на S <sub>298</sub> <sup>0</sup> , J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>				
Съединение	1	2	3	4
Sc <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	266.00	291.64	255.64	316.09
Y <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	286.60	313.72	285.30	335.35
La <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	305.80	341.96	307.35	350.41
Ce <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	321.00	365.22	307.79	350.41
Pr <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	335.80	370.29	308.08	350.41
Nd <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	321.40	373.22	309.28	351.25
Sm <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	325.00	365.68	311.43	352.91
Eu <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	323.60	361.18	311.98	352.91
Gd <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	332.40	371.54	313.76	354.59
Tb <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	343.00	371.54	314.32	354.59
Dy <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	342.80	364.44	315.48	355.43
Ho <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	345.20	372.84	316.26	356.27
Er <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	341.20	370.26	317.00	356.27
Tm <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	334.20	354.90	317.52	357.11
Yb <sub>2</sub> (SeO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	331.00	356.02	318.79	357.93