

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**

**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**28<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**Abstracts**

Чачак – Шаќак  
2023.

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ  
КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**Издавач:**

Српско кристалографско друштво,  
Ђушина 7, 11000 Београд,  
тел./факс: 2635-217

**За издавача:**

Тамара Тодоровић

**Уредник:**

Бождар Чобелјић

**Технички уредник:**

Предраг Ристић

Издавање ове публикације омогућено је  
финансијском помоћи Министарства  
науке, технолошког развоја и иновација  
Републике Србије

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-6-7  
ISSN 0354-5741

Штампа:  
НАУЧНА КМД д.о.о.  
Гочка 9/8  
11000 Београд

Тираж: 50

Београд  
2023

**28<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE SERBIAN  
CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**Abstracts**

**Publisher:**

Serbian Crystallographic Society,  
Đušina 7, 11000 Belgrade, Serbia,  
phone/fax: 381-11-2635-217

**For the publisher:**

Tamara Todorović

**Editor:**

Božidar Čobeljić

**Technical editor:**

Predrag Ristić

This publication is financially supported by  
The Ministry of Science, Technological  
Development and Innovation of the Republic of  
Serbia

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-6-7  
ISSN 0354-5741

Printing:  
NAUČNA KMD d.o.o.  
Gočka 9/8  
11000 Belgrade

Copies: 50

Belgrade  
2023



СРПСКО  
КРИСТАЛОГРАФСКО  
ДРУШТВО



SERBIAN  
CRYSTALLOGRAPHIC  
SOCIETY

## XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

## 28<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

### Научни одбор:

др Љиљана Карановић, РГФ, Београд  
др Катарина Анђелковић, ХФ, Београд  
др Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад  
др Јелена Роган, ТМФ, Београд  
др Горан Богдановић, „ВИНЧА”, Београд  
др Мирјана Милић, „ВИНЧА”, Београд  
др Александар Кременовић, РГФ, Београд  
др Андријана Жекић, ФФ, Београд  
др Марко Родић, ПМФ, Нови Сад  
др Душан Вељковић, ХФ, Београд  
др Верица Јевтић, ПМФ, Крагујевац  
др Александра Дапчевић, ТМФ, Београд  
др Сабина Ковач, РГФ, Београд  
др Божидар Чобелић, ХФ, Београд  
др Маја Ђукић, ПМФ, Крагујевац  
др Душанка Радановић, ИХТМ, Београд  
др Предраг Дабић, РГФ, Београд  
др Тамара Тодоровић, ХФ, Београд  
др Наташа Јовић Орсини, „ВИНЧА”,  
Београд

### Организациони одбор:

Тамара Тодоровић, ХФ, Београд  
Божидар Чобелић, ХФ, Београд  
Катарина Анђелковић, ХФ, Београд  
Предраг Ристић, ХФ, Београд  
Мима Јевтовић, ИЦХФ, Београд  
Невена Стевановић, ХФ, Београд  
Драгана Митић, ИЦХФ, Београд  
Јована Арашков, ХФ, Београд  
Сања Коканов, ХФ, Београд  
Андреј Миливојац, ИЦХФ, Београд

### Scientific Committee:

Dr Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade  
Dr Katarina Anđelković, HF, Belgrade  
Dr Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
Dr Jelena Rogan, TMF, Belgrade  
Dr Goran Bogdanović, „VINČA”, Belgrade  
Dr Mirjana Milić, „VINČA”, Belgrade  
Dr Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade  
Dr Andrijana Žekić, FF, Belgrade  
Dr Marko Rodić, PMF, Novi Sad  
Dr Dušan Veljković, HF, Belgrade  
Dr Verica Jevtić, PMF, Kragujevac  
Dr Aleksandra Dapčević, TMF, Belgrade  
Dr Sabina Kovač, RGF, Belgrade  
Dr Božidar Čobeljić, HF, Belgrade  
Dr Maja Đukić, PMF, Kragujevac  
Dr Dušanka Radanović, IHTM, Belgrade  
Dr Predrag Dabić, RGF, Belgrade  
Dr Tamara Todorović, HF, Belgrade  
Dr Nataša Jović Orsini, „VINČA”, Belgrade

### Organizing Committee:

Tamara Todorović, HF, Belgrade  
Božidar Čobeljić, HF, Belgrade  
Katarina Anđelković, HF, Belgrade  
Predrag Ristić, HF, Belgrade  
Mima Jevtović, ICHF, Belgrade  
Nevena Stevanović, HF, Belgrade  
Dragana Mitić, ICHF, Belgrade  
Jovana Araškov, HF, Belgrade  
Sanja Kokanov, HF, Belgrade  
Andrej Milivojac, ICHF, Belgrade

## ОРГАНИЗАТОРИ / ORGANIZERS



СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY



УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ – ХЕМИЈСКИ  
ФАКУЛТЕТ  
UNIVERSITY OF BELGRADE – FACULTY OF  
CHEMISTRY

## СПОНЗОР / SPONSOR



МИНИСТАРСТВО НАУКЕ, ТЕХНОЛОШКОГ РАЗВОЈА  
И ИНОВАЦИЈА РЕПУБЛИКЕ СРБИЈЕ  
MINISTRY OF SCIENCE, TECHNOLOGICAL  
DEVELOPMENT AND INNOVATION OF THE REPUBLIC  
OF SERBIA

<b><u>М. Милојевић, А. Жекић, П. Дабић, Б. Вучетић, Б. Максимовић</u></b> УТИЦАЈ ОБРТНОГ МАГНЕТНОГ ПОЉА НА ДЕРАЦЕМИЗАЦИЈУ КРИСТАЛА НАТРИЈУМ-ХЛОРАТА.....	22
<b><u>М. Milojević, A. Žekić, P. Dabić, B. Vučetić, B. Maksimović</u></b> INFLUENCE OF A ROTATING MAGNETIC FIELD ON THE DERACEMIZATION OF SODIUM CHLORATE CRYSTALS.....	23
<b><u>Н. Милојковић, Б. Симовић, М. Жунић, А. Дапчевић</u></b> УТИЦАЈ ДОПАНАТА НА СТРУКТУРУ АНАТАСА.....	24
<b><u>N. Milojković, B. Simović, M. Žunić, A. Dapčević</u></b> EFFECT OF DOPANTS ON ANATASE STRUCTURE .....	25
<b><u>Б. В. Пантовић, Т. П. Андрејевић, Д. П. Ашанин, Н. Љ. Стевановић, В. Р. Марковић, Б. Ђ. Глишић</u></b> КРИСТАЛНА СТРУКТУРА СРЕБРО(I) КОМПЛЕКСА СА N-МЕТИЛФЕНОТИАЗИНОМ.....	26
<b><u>B. V. Pantović, T. P. Andrejević, D. P. Ašanin, N. Lj. Stevanović, V. R. Marković, B. Đ. Glišić</u></b> CRYSTAL STRUCTURE OF A SILVER(I) COMPLEX WITH N-METHYLPHENOTHIAZINE .....	27
<b><u>Н. Д. Радновић, М. Г. Богдановић, С. Хауес, М. В. Родић</u></b> СИНТЕЗА И СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА Co(II) СА БИС(4-КАРБОКСИ-БЕНЗИЛ)АМОНИЈУМ-ХЛОРИДОМ И ПИРАЗИНОМ.....	28
<b><u>N. D. Radnović, M. G. Bogdanović, C. Hawes, M. V. Rodić</u></b> SYNTHESIS AND STRUCTURE OF Co(II) COMPLEX WITH BIS(4-CARBOXY-BENZYL)AMMONIUM CHLORIDE AND PYRAZINE .....	29
<b><u>М. В. Родић, В. Раичевић, В. М. Леовац, Н. Д. Банић</u></b> КРИСТАЛНА СТРУКТУРА Z-СЕМИКАРБАЗОНА МЕТИЛ ПИРУВАТА .....	30
<b><u>M. V. Rodić, V. Raičević, V. M. Leovac, N. D. Banić</u></b> CRYSTAL STRUCTURE OF Z-METHYL PYRUVATE SEMICARBAZONE .....	31
<b><u>И. П. Филиповић, М. Д. Радовановић, М. Б. Ђукић, О. Р. Клисурић, Д. Љ. Стојковић, М. С. Ристић, З. Д. Матовић</u></b> СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА [Rh <sub>2</sub> (CH <sub>3</sub> COO) <sub>4</sub> (N-BuIm)] КОМПЛЕКСА .....	32
<b><u>I. P. Filipović, M. D. Radovanović, M. B. Đukić, O. R. Klisurić, D. Lj. Stojković, M. S. Ristić, Z. D. Matović</u></b> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF [Rh <sub>2</sub> (CH <sub>3</sub> COO) <sub>4</sub> (N-BuIm)] COMPLEX .....	33

## УТИЦАЈ ДОПАНАТА НА СТРУКТУРУ АНАТАСА

**Н. Милојковић<sup>а</sup>, Б. Симовић<sup>б</sup>, М. Жунић<sup>б</sup>, А. Дапчевић<sup>а</sup>**

<sup>а</sup> Универзитет у Београду - Технолошко-металуришки факултет, Карнегијева 4, Београд; <sup>б</sup> Универзитет у Београду - Институт за мултидисциплинарна истраживања, Кнеза Вишеслава 1, Београд  
e-mail: nmiljkovic@tmf.bg.ac.rs

Degussa P-25 је фотокатализатор на бази титан(IV)-оксида, који се најчешће користи у индустрији.  $\text{TiO}_2$  се јавља у три полиморфне модификације: тетрагоналним анатасу ( $I4_1/amd$ ) и рутилу ( $P4_2/mnt$ ) и ромбичном брукиту ( $Pbca$ ). Анатас и брукит, као метастабилне фазе, приликом загревања прелазе у рутил. Циљ овог истраживања је испитивање утицаја различитих допаната на фазни прелаз анатаса у рутил као и на фотокаталитичка својства. Узорци  $\text{TiO}_2\text{-}M$  ( $M = \text{Cu}, \text{Mn}$  и  $\text{V}$ ), који садрже 5 at.% допанта, припремљени су термохемијском реакцијом на 700 °C током 3 h између хомогенизованих прахова анатаса и одговарајућих оксида ( $\text{CuO}$ ,  $\text{MnO}_2$  и  $\text{V}_2\text{O}_5$ ). Ради поређења, прах чистог анатаса је термички третиран под истим условима. Помоћу ТГ/ДТ анализе дефинисани су услови термичког третмана, док су добијени узорци окарактерисани рендгенском дифракцијом на поликристалном материјалу да би се одредио фазни састав, параметри јединичних ћелија и величина кристалита. У случају недопираног анатаса настало је свега 3 mas.% рутила, 26 и 76 mas.% рутила добијено је у  $\text{TiO}_2\text{-Mn}$  и  $\text{TiO}_2\text{-V}$ , редом, док се потпуни фазни прелаз анатас–рутил одиграо у  $\text{TiO}_2\text{-Cu}$ . Ово значи да присуство допанта убрзава фазну трансформацију. Најмања количина рутила у  $\text{TiO}_2\text{-Mn}$  може се објаснити изовалентним  $\text{Ti}^{4+}$  и  $\text{Mn}^{4+}$ , тј. да уградња  $\text{Mn}^{4+}$  у  $\text{TiO}_2$  није праћена настанком нових дефеката који представљају вучну силу за одигравање фазног прелаз, као што је то случај код  $\text{TiO}_2\text{-Cu}$ . Око 5 mas.% непрореаговалог  $\text{CuO}$  (готово почетна количина) заостало је у  $\text{TiO}_2\text{-Cu}$ , зато што се  $\text{Cu}^{2+}$ -јони теже уграђују у решетку  $\text{TiO}_2$  због већег радијуса  $\text{Cu}^{2+}$  у октаедарском окружењу (0,870 Å) од радијуса  $\text{Ti}^{4+}$  (0,745 Å), за разлику од мањих  $\text{Mn}^{4+}$  (0,670 Å) и  $\text{V}^{5+}$  (0,680 Å). Ипак, сигурно је мала количина  $\text{Cu}^{2+}$ -јона била неопходна како би иницирала фазни прелаз. Како у  $\text{TiO}_2\text{-Mn}$  и  $\text{TiO}_2\text{-V}$  нису присутни остаци полазних оксида, може се закључити да су се ови јони метала уградили у решетку анатаса. Међусобним поређењем параметара јединичне ћелије анатаса, уочено је скраћење дуж  $c$ -осе, што указује на скраћење дужина веза  $M\text{-O}_{\text{апикални}}$ . Израчуната величина кристалита (55–90 nm) показала је да су сви добијени узорци нанокристални, па ће њихова фотокаталитичка својства бити испитана.

## EFFECT OF DOPANTS ON ANATASE STRUCTURE

**N. Milojković<sup>a</sup>, B. Simović<sup>b</sup>, M. Žunić<sup>b</sup>, A. Dapčević<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> University of Belgrade - Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> University of Belgrade - Institute for Multidisciplinary Research, Kneza Višeslava 1, Belgrade, Serbia

e-mail: nmilojkovic@tmf.bg.ac.rs

It is well known that TiO<sub>2</sub>-based Degussa P-25 is the mostly used commercial photocatalyst and that TiO<sub>2</sub> exists in three crystalline modifications: tetragonal anatase (*I4<sub>1</sub>/amd*) and rutile (*P4<sub>2</sub>/mnm*) and orthorhombic brookite (*Pbca*). On heating, anatase and brookite, as metastable phases, can be transformed to rutile. The aim of this work was to investigate the effect of different dopants on anatase-rutile phase transition and thus on their photocatalytic behavior. For that matter, samples TiO<sub>2</sub>-*M* (*M* = Cu, Mn and V) having 5 at.% of dopants were prepared by 30 minutes hand-mixing of anatase and corresponding oxide (CuO, MnO<sub>2</sub> and V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) powders in an agate mortar following by heat treatment at 700 °C for 3 h. The powder of pure anatase phase was also treated at same conditions. TG/DTA was used to define thermal treatment, and the obtained samples were characterized by powder XRD method in order to reach phase compositions, unit cell parameters and crystallite sizes. Since in the case of undoped anatase only 3 wt.% of rutile was formed, the presence of dopants accelerated phase transition: 26 and 76 wt.% of rutile was obtained beside anatase in TiO<sub>2</sub>-Mn and TiO<sub>2</sub>-V, respectively, while complete anatase to rutile phase transition occurred in TiO<sub>2</sub>-Cu. The least rutile quantity in TiO<sub>2</sub>-Mn is related to the isovalency of Ti<sup>4+</sup> and Mn<sup>4+</sup> meaning that the incorporation of Mn<sup>4+</sup> in TiO<sub>2</sub> is not followed by the formation of new defects, which are driving force for phase transition, as in the case of TiO<sub>2</sub>-Cu. About 5 wt.% of the unreacted CuO was found in TiO<sub>2</sub>-Cu, which is almost all introduced quantity of CuO. This can be related to the fact that the ionic radius of Cu<sup>2+</sup> for octahedral environment (0.870 Å) is larger than that of Ti<sup>4+</sup> (0.745 Å). As a result, Cu<sup>2+</sup> ions can hardly be incorporated in TiO<sub>2</sub> comparing to smaller Mn<sup>4+</sup> (0.670 Å) and V<sup>5+</sup> (0.680 Å) although a small amount of Cu<sup>2+</sup> surely was necessary to cause phase transition. Since no residues of initial oxides were found in TiO<sub>2</sub>-Mn and TiO<sub>2</sub>-V, it can be concluded that these metal ions were incorporated into anatase lattice. By comparing the calculated unit cell parameters of anatase mutually, the shrinkage along *c*-axis was revealed meaning the shortening of bond distances between *M*-O<sub>apical</sub>. The photocatalytic activity of all synthesized samples will be tested since nanocrystalline samples were obtained according to determined crystallite sizes (55–90 nm).