

XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ
КРИСТАЛОГРАФСКОГ
ДРУШТВА

• •

Изводи
радова

27th CONFERENCE OF
SERBIAN
CRYSTALLOGRAPHIC
SOCIETY

• •

Book of
Abstracts

16 - 17. септембар,
2021.
Крагујевац, Србија



SERBIAN
CRYSTALLOGRAPHIC
SOCIETY

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**27th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

**Крагујевац – Kragujevac
2021.**

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Изводи радова**

**27th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Abstracts**

Издавач - Publisher:

– Српско кристалографско друштво
Ђушина 7, 11000 Београд, Србија, тел. 011-3336-701
– Serbian Crystallographic Society
Đušina 7, 11 000 Belgrade, Serbia, phone: +381 11 3336 701

За издавача – For the publisher:

Марија Станић – Marija Stanić

Уредник – Editor:

Верица Јевтић – Verica Jevtić

Технички уредник – Technical editor:

Маја Ђукић – Maja Đukić

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

The publication is financially supported by Ministry of Education, Science and Technological development, Republic of Serbia

© Српско кристалографско друштво – Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-6009-085-2

ISSN 0354-5741

Штампа – Printing:

Природно-математички факултет, Радоја Домановића 12, Крагујевац, Србија
Faculty of Science, Radoje Domanović 12, Kragujevac, Serbia

Тираж – Copies: 50

Крагујевац – Kragujevac
2021.

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**27th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:

др Љиљана Караповић, РГФ Београд / dr Ljiljana Karanović, FMG Belgrade
др Тамара Тодоровић, ХФ Београд / dr Tamara Todorović, FC Belgrade
др Марко Родић, ПМФ Нови Сад / dr Marko Rodić, FS Novi Sad
др Душан Вељковић, ХФ Београд / dr Dušan Veljković, FC Belgrade
др Оливера Клисуринић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, FS Novi Sad
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, FTM Belgrade
др Горан Богдановић, ИИН „ВИНЧА“ / dr Goran Bogdanović, INS "Vinča"
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, FMG Belgrade
др Братислав Антић, ИИН „ВИНЧА“ / dr Bratislav Antić, INN "Vinča"
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, FC Belgrade
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Andđelković, FC Belgrade
др Срђан Ракић, ПМФ Нови Сад / dr Srđan Rakić, FS Novi Sad
др Наташа Јовић Орсини, ИИН „ВИНЧА“ / dr Nataša Jović Orsini, INS "Vinča"
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, FTM Belgrade

ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZATION COMMITTEE:

др Верица Јевтић, ПМФ Крагујевац / dr Verica Jevtić, FS Kragujevac
др Гордана Радић, ФМН Крагујевац / dr Gordana Radić, FMS Kragujevac
др Анича Глођовић, ПМФ Крагујевац / dr Anica Glodović, FS Kragujevac
др Андрија Ђирић, ПМФ Крагујевац / dr Andrija Čirić, FS Kragujevac
др Марина Ђендић Серафиновић, ПМФ Крагујевац / dr Marina Ćendić Serafinović,
FS Kragujevac
др Марија Ристић, ПМФ Крагујевац / dr Marija Ristić, FS Kragujevac
др Емина Mrкалић, ИИТ Крагујевац / dr Emina Mrkalić, IIT Kragujevac
др Данијела Стојковић, ИИТ Крагујевац / dr Danijela Stojković, IIT Kragujevac
др Едина Авдoviћ, ИИТ Крагујевац / dr Edina Avdović, IIT Kragujevac
др Маја Ђукић, ПМФ Крагујевац / dr Maja Đukić, FS Kragujevac
Сандра Јовићић Милић, ПМФ Крагујевац / Sandra Jovićić Milić, FS Kragujevac
Ђорђе Петровић, ПМФ Крагујевац / Đorđe Petrović, FS Kragujevac
Маријана Касаловић, ПМФ Крагујевац / Marijana Kasalović, FS Kragujevac
Марко Радовановић, ПМФ Крагујевац / Marko Radovanović, FS Kragujevac
Игњат Филиповић, ПМФ Крагујевац / Ignjat Filipović, FS Kragujevac

ОРГАНИЗATORИ



СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY



ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
FACULTY OF SCIENCE
UNIVERSITY OF Kragujevac

ПОКРОВИТЕЉ



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

FOTOKATALITIČKA RAZGRADNJA BOJE RO16 POMOĆU HIDROTERMALNO SINTETISANIH KOMPOZITA CeO₂/ZnO

B. Simović ^a, G. Branković ^a, A. Dapčević ^b

^a Institut za multidisciplinarna istraživanja, Univerzitet u Beogradu, Kneza Višeslava 1, 11030 Beograd, Srbija; ^b Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11120 Beograd, Srbija
e-mail: bojanasimovic@imsi.bg.ac.rs

Cink-oksid je poznati fotokatalizator koji se uglavnom koristi za razgradnju organskih zagađujućih suspstanci u vodi uz pomoć vešačke ili sunčeve svetlosti [1, 2]. S druge strane, modifikovanje poluprovodnog fotokatalizatora drugim oksidima može poboljšati fotokatalitičku aktivnost usled sinergijskog efekta pojedinačnih oksida u smislu povećanja adsorpcije i širenja oblasti mogućih talasnih dužina za apsorpciju svetlosti.

Da bi se odredio optimalan sadržaj CeO₂ za najbolju fotokatalitičku aktivnost ZnO, voden rastvor Zn(NO₃)₂ sa različitim sadržajem Ce(NO₃)₃ (0; 2,5; 5 i 10 mol.%) tretiran je hidrotermalnim postupkom na 180 °C tokom 18 h u prisustvu NH₃(aq). Dobijeni uzorci ispirani su destilovanom vodom i etanolom, centrifugirani i sušeni na 105 °C tokom 3 h. Strukturalna, mikrostrukturalna, optička i fotokatalitička svojstva dobijenih prahova ispitana su rendgenskom difrakcijom praha (XRPD), skenirajućom elektronskom mikroskopijom (FESEM), transmisionom elektronskom mikroskopijom (TEM) i UV-Vis spektroskopijom. Fotokatalitička aktivnost dobijenih kompozita ispitana je na tekstilnoj azo-boji reaktivno narandžasta 16 (RO16, od engl. Reactive Orange 16) i upoređena je sa jednofaznim ZnO.

XRPD rezultati su pokazali da je jednofazni ZnO (heksagonalna struktura vircita, prostorna grupa *P63mc*) dobijen u sintezi bez Ce(NO₃)₃. Ako je sadržaj Ce(NO₃)₃ bio 2,5; 5 ili 10 mol.%, dobijeni uzorci sadržali su smešu ZnO i CeO₂ (struktura fluorita, prostorna grupa *Fm* $\bar{3}$ *m*). Izračunati fazni sastavi proizvoda dobro odgovaraju polaznim sastavima, čime je potvrđeno nastajanje kompozita CeO₂/ZnO sa različitim molarnim odnosima. Kako se sadržaj CeO₂ povećavao primećeno je blago smanjenje zapremine jedinične celije ZnO, sa 47,950(4) Å³ za jednofazni ZnO na 47,726(4) Å³ za 10% CeO₂/ZnO, zbog blagog smanjenja parametara jedinične celije: *a* od 3,2566(1) do 3,2519(1) Å i *c* od 5,2206(4) do 5,2114(4) Å, redom. Krajnji fazni sastav, kao i nenarušena vircitna struktura ZnO ukazali su da je CeO₂ raspoređen po površini ZnO, što su potvrdili FESEM i TEM. Mikroskopski rezultati su pokazali da je veličina sfernih kristalita CeO₂ bila 5 ± 1 nm, dok je ZnO imao bimodalnu raspodelu veličine kristalita od 5 nm do 4 µm. Stoga morfologija ZnO praha varira od izduženih nanozrna do mikrostapića koji dalje grade 3-D morfologiju nalik mašnama. Kompozit 5%CeO₂/ZnO je pokazao najbolju fotokatalitičku aktivnost razgradivši RO16 za 180 minuta. Nanokompoziti CeO₂/ZnO sa 2,5 i 10 mol.% CeO₂ pokazali su sličnu fotoaktivnost kao nemodifikovani ZnO. Može se zaključiti da optimalan sadržaj CeO₂ iznosi 5 mol.%.

- [1] B. Simović, A. Golubović, I. Veljković, D. Poleti, J. Zdravković, D. Mijin, A. Bjelajac, *Journal of the Serbian Chemical Society*, **79** (2014) 1433–1443.
[2] B. Simović, D. Poleti, A. Golubović, A. Matković, M. Šćepanović, B. Babić, G. Branković, *Processing and Application of Ceramics*, **11** (2017) 27–38.

PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF RO16 DYE USING HYDROTHERMALLY SYNTHESIZED CeO₂/ZnO COMPOSITES

B. Simović^a, G. Branković^a, A. Dapčević^b

^a Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Kneza Višeslava 1, 11030 Belgrade, Serbia; ^b Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11120 Belgrade, Serbia
e-mail: bojanasimovic@imsi.bg.ac.rs

Zinc oxide is a well-known photocatalyst mainly used to degrade organic water pollutants using artificial or sunlight [1, 2]. On the other hand, the modification of semiconductor photocatalysts by other oxides can improve their photocatalytic activity regarding synergistic effect of single oxides in the sense of increasing the adsorption and broadening region of possible wavelengths for light absorption.

In order to find the optimal CeO₂ content for the best photocatalytic activity of ZnO, the aqueous solution of Zn(NO₃)₂ with different Ce(NO₃)₃ content (0, 2.5, 5 and 10 mole%) was hydrothermally treated at 180 °C for 18 h in the presence of NH₃(aq). The obtained samples were rinsed out with distilled water and ethanol, centrifuged and dried at 105 °C for 3h. The structural, microstructural, optical and photocatalytic properties of resulting powders have been investigated by the XRPD, FESEM, TEM and UV-vis techniques. The photocatalytic activity of obtained composites was tested on the Reactive Orange 16 (RO16) textile azo dye and compared to the single-phase ZnO.

Based on XRPD results, the single-phase ZnO (hexagonal wurtzite structure, space group P63mc) was obtained without addition of Ce(NO₃)₃. If Ce(NO₃)₃ content was 2.5, 5 or 10 mole.%, the obtained samples consisted of ZnO and CeO₂ (fluorite structure, space group Fm $\overline{3}$ m) mixed phases. The calculated final phase compositions corresponded well with starting compositions, which confirmed the formation of CeO₂/ZnO composites with different molar ratios. As CeO₂ content increased, the slight decrease in ZnO unit cell volume, from 47.950(4) Å³ for single-phase ZnO to 47.726(4) Å³ for 10% CeO₂/ZnO, was noticed due to negligible decrease in unit cell parameters: *a* from 3.2566(1) to 3.2519(1) Å and *c* from 5.2206(4) to 5.2114(4) Å, respectively. The final phase compositions as well as preserved ZnO wurzite structure indicated that CeO₂ was distributed onto ZnO surface, which was confirmed by FESEM and TEM. The microscopic results showed that the size of spherical CeO₂ crystallites was 5 ± 1 nm, while ZnO had a bimodal distribution of the crystallite size from 5 nm to 4 µm. Hence the morphology of ZnO varies from elongated nanograins to microrods that further build a 3-D tie-like morphology. The 5% CeO₂/ZnO composite demonstrated the best photocatalytic activity by degrading RO16 for 180 minutes. CeO₂/ZnO composites with 2.5 and 10 mole.% CeO₂ showed similar photoactivity as unmodified ZnO. It could be concluded that the optimal CeO₂ content is 5 mole.%.

- [1] B. Simović, A. Golubović, I. Veljković, D. Poleti, J. Zdravković, D. Mijin, A. Bjelajac, *Journal of the Serbian Chemical Society*, **79** (2014) 1433–1443.
- [2] B. Simović, D. Poleti, A. Golubović, A. Matković, M. Šćepanović, B. Babić, G. Branković, *Processing and Application of Ceramics*, **11** (2017) 27–38.