

XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ  
КРИСТАЛОГРАФСКОГ  
ДРУШТВА



Изводи  
радова

27<sup>th</sup> 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**

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

**Abstracts**

**Крагујевац – Kragujevac**  
**2021.**

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**  
**Изводи радова**

**27<sup>th</sup> 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**

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

**НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:**

др Љиљана Карановић, 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 Велковић, ХФ Београд / dr Dušan Veljković, FC Belgrade  
др Оливера Клисурић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, FS Novi Sad  
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, FTM Belgrade  
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА” / dr Goran Bogdanović, INS "Vinča"  
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, FMG Belgrade  
др Братислав Антић, ИНН „ВИНЧА” / dr Bratislav Antić, INN "Vinča"  
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, FC Belgrade  
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Anđelković, FC Belgrade  
др Срђан Ракић, ПМФ Нови Сад / dr Srđan Rakić, FS Novi Sad  
др Наташа Јовић Орсини, ИНН „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 Аница Глођовић, ПМФ Крагујевац / dr Anica Glidović, FS Kragujevac  
др Андрија Ћирић, ПМФ Крагујевац / dr Andrija Ćirić, FS Kragujevac  
др Марина Ћендић Серафиновић, ПМФ Крагујевац / dr Marina Ćendić Serafinović, FS Kragujevac  
др Марија Ристић, ПМФ Крагујевац / dr Marija Ristić, FS Kragujevac  
др Емина Мркалић, ИИТ Крагујевац / dr Emina Mrkalić, ИТ Кragujevac  
др Данијела Стојковић, ИИТ Крагујевац / dr Danijela Stojković, ИТ Кragujevac  
др Едина Авдовић, ИИТ Крагујевац / dr Edina Avdović, ИТ Кragujevac  
др Маја Ђукић, ПМФ Крагујевац / dr Маја Đukić, FS Kragujevac  
Сандра Јовичић Милић, ПМФ Крагујевац / Sandra Jovičić 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

## ОРГАНИЗАТОРИ



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

## CINK-ORTOTITANAT SA ANTIBAKTERIJSKIM SVOJSTVIMA

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

<sup>a</sup> Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11000 Beograd, Srbija; <sup>b</sup> Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11000 Beograd, Srbija; <sup>c</sup> Institut za multidisciplinarna istraživanja, Univerzitet u Beogradu, Kneza Višeslava 1a, 11030 Beograd, Srbija  
e-mail: nmilojkovic@tmf.bg.ac.rs

Kontaminacija bakterijama je poslednjih godina postala problem na globalnom nivou zbog čega se javila potreba za novim antibakterijskim agensima. Stabilni titan-dioksid i cink-oksidi pokazuju antibakterijsku aktivnost te se smatraju pogodnim materijalima i zbog njihove netoksičnosti i niske cene [1, 2].

Cilj ovog rada bio je dobijanje novog materijala na bazi ZnO i TiO<sub>2</sub> sa antibakterijskim svojstvima. U tu svrhu, titan(IV)-butoksid (25 mol.%) rastvoren je u vodenom rastvoru cink-acetata (75 mol.%), nakon čega je dodavan amonijak dok vrednost pH nije iznosila 8,5. Polovina dobijenog rastvora je hidrotermalno tretirana 12 h na 120 °C, zatim sušena 20 h na 100 °C i kalcinisana 1 h na 500 (uzorak H-ZnTi-500) i 800 °C (uzorak H-ZnTi-800). Druga polovina dobijenog rastvora bila je direktno sušena i kalcinisana pod istim uslovima (uzorci ZnTi-500 i ZnTi-800).

Na osnovu XRD rezultata, fazni sastav i veličina kristalita izračunati su u Powder Cell programu, dok su parametri jedinične ćelije i dužine veza dobijeni Ritveldovim utičnjavanjem pomoću FullProf/Winplotr programskog paketa. Termogravimetrijskom analizom nekalciniranih uzoraka određena je temperatura kalcinacije. Antibakterijska aktivnost dobijenih prahova ispitana je prema dva soja bakterija: Gram-pozitivnoj *S. aureus* ATCC 25923 i Gram-negativnoj *E. coli* DSM 498.

Jednofazni kubni Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> (ICSD#162392, prostorna grupa *Fd3m*) dobijen je jedino u slučaju ZnTi-800, dok je u ostale tri sinteze Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> bio većinska faza. Pored Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub>, uzorci H-ZnTi-500 i ZnTi-500 sadržali su 22 i 4 mas.% ZnO (ICSD#26170) redno, dok je u uzorku H-ZnTi-800 pronađeno 7 mas.% ZnO i 5 mas.% Zn<sub>2</sub>Ti<sub>3</sub>O<sub>8</sub> (ICSD#083525). Parametar *a* svih dobijenih Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> pokazao se nezavisnim od samog procesa sinteze, a dobijene vrednosti su približno iste: 8,4465(3) za H-ZnTi-500, 8,4604(2) za ZnTi-500, 8,4564(2) za H-ZnTi-800 i 8,4565(2) Å za ZnTi-800. U strukturi kubnog Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> postoje dva katjonska mesta: tetraedarski koordinirani Zn u 0,0,0, i oktaedarski koordinirani Zn i Ti koji dele položaj 5/8,5/8,5/8. Dužine veza Zn–O i Zn/Ti–O su takođe nezavisne od uslova sinteze. Na 500 °C dobijeni su nanokristalni Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> (veličina kristalita iznosila je 26 i 71 nm za H-ZnTi-500 i ZnTi-500, respektivno) dok su mikrokristalni Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> nastali na 800 °C (veličina kristalita prelazila je 110 nm). Od svih uzoraka, ZnTi-500 je pokazao najbolju antibakterijsku aktivnost dostignuvši visoki stepen redukcije broja bakterijskih kolonija: 87,6 % *E. coli* DSM 498 i 63,4 % *S. aureus* ATCC 25923. To se može pripisati činjenici da je u ovom slučaju dobijen gotovo jednofazni Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> sa dovoljno malom veličinom kristalita.

[1] A. Sirelkhatim et al., *Nano-Micro Letters*, **7** (2015) 219–242.

[2] T. Matsunaga et al., *FEMS Microbiology Letters*, **29** (1985) 211–214.

## ANTIBACTERIAL ZINC ORTHOTITANATE

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

<sup>a</sup> Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Innovation Center of the Faculty Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Kneza Višeslava 1a, 11030 Belgrade, Serbia

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

In recent years bacterial contamination has become a significant problem of the global environment causing the necessity for novel antibacterial agents. Stable, non-toxic and low cost zinc oxide and titanium dioxide are considered as suitable antibacterial materials [1, 2].

The aim of this work was to find a new antibacterial material based on both, ZnO and TiO<sub>2</sub>. Therefore, titanium(IV) butoxide (25 mole%) was dissolved in a water solution of zinc acetate (75 mole%) after which the ammonia was added until pH was adjusted to 8.5. Half of the obtained solution was hydrothermally treated for 12 h at 120 °C, dried for 20 h at 100 °C and then calcined at 500 (sample H-ZnTi-500) and 800 °C (sample H-ZnTi-800) for 1 h. The other half of obtained solution was directly dried and calcined under the same conditions (samples ZnTi-500 and ZnTi-800).

Base on XRD data for obtained powders, the phase composition and crystallite size were calculated in Powder Cell software while unit cell parameters and bond distances were obtained by Rietveld refinement using FullProf software in Winplotr environment. TG analysis of uncalcined samples was used to determine temperature of calcination. Antibacterial properties of obtained powders were examined towards Gram-positive *S. aureus* ATCC 25923 and Gram-negative *E. coli* DSM 498 bacteria.

The single-phase cubic Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> phase (ICSD#162392, space group  $Fd\bar{3}m$ ) was obtained in the case of ZnTi-800 while, for three other samples, the Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> is found to be a predominant phase. Beside Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> samples H-ZnTi-500 and ZnTi-500 contained 22 and 4 wt.% of ZnO (ICSD#26170) respectively, while H-ZnTi-800 had 7 wt.% of ZnO and 5 wt.% of Zn<sub>2</sub>Ti<sub>3</sub>O<sub>8</sub> (ICSD#083525). The *a*-parameter of all obtained Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> was independent of synthetic procedure having following values: 8.4465(3) for H-ZnTi-500, 8.4604(2) for ZnTi-500, 8.4564(2) for H-ZnTi-800 and 8.4565(2) Å for ZnTi-800. Two cation sites can be found in cubic Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub>: tetrahedrally coordinated Zn at 0,0,0 and octahedral site at 5/8,5/8,5/8 shared between Zn and Ti. The Zn–O and Zn/Ti–O bond distances were also independent of synthesis. The nanocrystalline Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> phases were obtained at 500 °C (crystallite size for H-ZnTi-500 and ZnTi-500 were 26 and 71 nm respectively), and microcrystalline ones at 800 °C (the crystallite size exceeded 110 nm). Among all samples, the ZnTi-500 demonstrated the best antibacterial activity reaching high reduction in the number of bacteria cells: 87.6 % of *E. coli* DSM 498 and 63.4 % of *S. aureus* ATCC 25923. This could be explained by the fact that almost pure Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> phase was obtained with sufficiently small crystallites.

[1] A. Sirelkhatim et al., *Nano-Micro Letters*, **7** (2015) 219–242.

[2] T. Matsunaga et al., *FEMS Microbiology Letters*, **29** (1985) 211–214.