

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXV КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**25th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Бајина Башта – Вајина Вашта
2018.

XXV KONFERENCIJA SRPSKOG KRISTALOGRAFSKOG DRUŠTVA
Изводи радова

25th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Abstracts

Издавач - Publisher:

– Српско кристалографско друштво
Ђушина 7, 11000 Београд, Србија, тел./факс 2635-217
– Serbian Crystallographic Society
Ђушина 7, 11 000 Belgrade, Serbia, phone/fax: +381 11 2635 217

За издавача – For the publisher:

Слађана Новаковић – Slađana Novaković

Уредник – Editor:

Зоран Томић – Zoran Tomić

Технички уредник – Technical editor:

Зоран Томић – Zoran Tomić
Слађана Новаковић – Slađana Novaković

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 978-86-912959-4-3
ISSN 0354-5741

Штампа – Printing:

COPY CENTAR, Beograd

Тираж – Copies: 100
Београд – Belgrade
2018.

**XXV КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**25th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:

др Љиљана Карановић, РГФ Београд / dr Ljiljana Karanović, RGF Beograd
др Оливера Клисурић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, PMF Novi Sad
др Срећко Трифуновић, ПМФ Крагујевац / dr Srećko Trifunović, PMF Kragujevac
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, TMF Beograd
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА” / dr Goran Bogdanović, INN "Vinča"
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, RGF Beograd
др Наташа Јовић-Орсини, ИНН „ВИНЧА” / dr Nataša Jović-Orsini, INN "Vinča"
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, HF Beograd
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Anđelković, HF Beograd
др Срђан Ракић, ПМФ Нови Сад / dr Srđan Rakić, PMF Novi Sad
др Марин Тадић, ИНН „ВИНЧА” / dr Marin Tadić, INN "Vinča"
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, TMF Beograd
др Предраг Вулић, РГФ Београд / dr Predrag Vulić, RGF Beograd
др Тамара Тодоровић, ХФ Београд / dr Tamara Todorović, HF Beograd

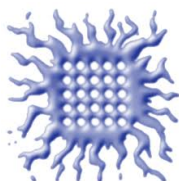
ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZATION COMMITTEE:

др Слађана Новаковић, ИНН "Винча" / dr Slađana Novaković, INN "Vinča"
др Зоран Томић, ИНН "Винча" / dr Zoran Tomić, INN "Vinča"
др Горан Богдановић, ИНН "Винча" / dr Goran Bogdanović, INN "Vinča"
др Мирјана Милић, ИНН "Винча" / dr Mirjana Milić, INN "Vinča"
др Наташа Јовић-Орсини, ИНН "Винча" / dr Nataša Jović-Orsini, INN "Vinča"
др Марко Родић, ПМФ Нови Сад / dr Marko Rodić, PMF Novi Sad
др Виолета Николић, ИНН "Винча" / dr Violeta Nikolić, INN "Vinča"

ОРГАНИЗАТОРИ / ORGANIZERS



СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY



ИНСТИТУТ ЗА НУКЛЕАРНЕ НАУКЕ "ВИНЧА"
УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
VINČA INSTITUTE OF NUCLEAR SCIENCES
UNIVERSITY OF BELGRADE

ПОКРОВИТЕЉИ / SPONSORS



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



МЕЂУНАРОДНА УНИЈА ЗА
КРИСТАЛОГРАФИЈУ
INTERNATIONAL UNION OF
CRYSTALLOGRAPHY

 **ROFA**
GOLDEN SPONSOR

FAZNI PRELAZ NANOSTRUKTURNOG TITAN-DIOKSIDA U SLOJEVITI TITANAT

B. Simović^a, A. Dapčević^b, J. Zdravković^c, G. Branković^a

^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; ^c Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11120 Beograd, Srbija
e-mail: bojanasimovic@imsi.bg.ac.rs

Ekološki nanomaterijali kao što su titan-dioksid i titanati često se koriste u industriji zbog njihovih izvanrednih svojstava: biološke i hemijske stabilnosti, fotokatalitičke aktivnosti, ekonomičnosti. Pored drugih postupaka, hidrotermalni proces postao je veoma važan metod za sintezu nanostrukturnih titan-dioksida i titanata.

U ovom radu, devet proizvoda dobijeno je variranjem eksperimentalnih uslova (6, 12 i 18 h na 110, 135 i 160 °C) hidrotermalnog tretmana polaznog nanoanatasa u alkalnoj sredini (5 mol dm⁻³ rastvora NaOH). Ispitana je mogućnost za dobijanje titanatne faze kao i uticaj različitih eksperimentalnih uslova na strukturna i mikrostrukturna svojstva dobijenih proizvoda.

Kao što je pokazano XRPD-om i TEM-om, čista titanatna faza nastaje nakon najintenzivnijeg hidrotermalnog tretmana, tačnije nakon 18 h na 160 °C. Kod ostalih osam proizvoda zaostaje određena količina anatasa, pri čemu se ona smanjuje sa porastom temperature i dužine trajanja hidrotermalnog tretmana. Naime, intenziviranje hidrotermalnog tretmana znatno povećava rastvorljivost TiO₂ dovodeći do promena u morfologiji od približno sfernih čestica anatasa do izduženih titanatnih nanopločica. Ovo je posledica raskidanja veza Ti–O–Ti i stvaranja novih veza Ti–O–Na ili Ti–OH pa samim tim i rast lamelarnih struktura, čime dolazi do transformacije nanočestica anatasa u titanatne nanopločice. Transformacija je potpuna nakon 18 h na 160 °C. Izračunati parametri jedinične ćelije ove titanatne faze $a = 18,188(6)$, $b = 3,7669(3)$ i $c = 2,9812(6)$ Å pokazuju blago izduženje duž a -ose u poređenju sa H₂Ti₂O₅·H₂O (PDF #47-0124). Ovo bi se moglo objasniti delimičnom jonskomizmenom Na⁺–H⁺. EDS i TG analizama dobijenog čistog titanata utvrđeno je da je njegova najverovatnija formula Na_{0,4}H_{1,6}Ti₂O₅·H₂O. FTIR i TG analize pokazale su da nanopločice Na_{0,4}H_{1,6}Ti₂O₅·H₂O apsorbuju vodu po površini te su potvrdile higroskopnu prirodu ovog titanata. Međutim, HRTEM/SAED je pokazao smanjenje međuslojnog rastojanja duž a -ose zbog dehidratacije usled vakuuma i elektronskog zračenja tokom TEM analize dodatno potvrđujući slojevitu strukturu dobijenog titanata.

Ovaj rad opisuje jednostavan sintetski postupak za dobijanje titanatnih nanopločica korisnih za razne primene, a takođe konačno objašnjava razliku između titanata i titan-dioksida sa stanovišta strukture i mikrostrukture.

PHASE TRANSITION FROM NANOSTRUCTURED TITANIA TO LAYERED TITANATE

B. Simović^a, A. Dapčević^b, J. Zdravković^c, G. Branković^a

^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, 11120Belgrade, Serbia; ^c Innovation centre Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11120Belgrade, Serbia

e-mail: bojanasimovic@imsi.bg.ac.rs

The environmental friendly titanium-based nanomaterials such as titania and titanates are often used in industry regarding to their extraordinary properties: biological and chemical stability, photocatalytic activity, cost-effectiveness. Among other procedures, the hydrothermal process became a very important way to synthesize the titania and titanate nanostructures.

In this work, nine products were obtained by modifying the experimental conditions (6, 12 and 18 h at 110, 135 and 160 °C) of hydrothermal treatment of starting nanoanatase in alkaline medium (5 mol dm⁻³ NaOH solution). The possibility to obtain the single titanate phase was investigated as well as the influence of different experimental conditions on structural and microstructural properties of obtained products.

As shown by XRPD and TEM, when commercial nanoanatase is hydrothermally treated, the single titanate phase was obtained after energetically the most intensive treatment *i.e.* 18 h at 160 °C. Among all other eight products, a certain amount of anatase remained, with the decreasing content as the temperature and time of hydrothermal treatment increases. This intensification of hydrothermal treatment significantly increases the solubility of TiO₂ promoting the changes in morphology from nearly spherical anatase particles to elongated titanate nanosheets. This is the consequence of Ti–O–Ti bonds breaking and formation of Ti–O–Na or Ti–OH bonds and thus the growth of lamellar structures giving the complete transformation of anatase nanoparticles into titanate nanosheets after 18 h at 160 °C. The calculated unit cell parameters of this titanate phase, $a = 18.188(6)$, $b = 3.7669(3)$, $c = 2.9812(6)$ Å, show the slight elongation along a -axis comparing to H₂Ti₂O₅·H₂O (PDF #47-0124). This could be explained by partial Na⁺–H⁺ ion exchange. Based on EDS and TG of obtained pure titanate, the Na_{0.4}H_{1.6}Ti₂O₅·H₂O formula could be assigned to the titanate phase. The FTIR and TG analyses showed the hygroscopic nature of Na_{0.4}H_{1.6}Ti₂O₅·H₂O nanosheets and the consequential surface adsorption of water. However, the HRTEM/SAED revealed the shortening of interplanar distances along a because of the dehydration due to vacuum and electron radiation during the TEM analysis additionally confirming the layered structure of obtained titanate.

This work describes a simple synthetic procedure for production of titanate nanosheets useful for diverse applications but also finally distinguish the titanates from titania in terms of structure and microstructure.