

**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

<b><u>E. H. Avdović, D. Simijonović, Ž. B. Milanović, M. Antonijević, D. Milenković, Z. S. Marković</u></b> SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA ( <i>E</i> )-2,3-DIHIDROKSI- <i>N'</i> -(1-(2-OKSO-2 <i>H</i> -HROMEN-3-IL)ETILIDEN)BENZOHIDRAZIDA .....	44
<b><u>E. H. Avdović, D. Simijonović, Ž. B. Milanović, M. Antonijević, D. Milenković, Z. S. Marković</u></b> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF ( <i>E</i> )-2,3-DIHYDROXY- <i>N'</i> -(1-(2-OXO-2 <i>H</i> -CHROMEN-3-YL)ETHYLIDENE) BENZOHYDRAZIDE.....	45
<b><u>Г. А. Богдановић, С. Б. Новаковић, З. Ратковић, С. Љ. Матић, Ј. Мушкиња</u></b> МАЛЕ СТРУКТУРНЕ МОДИФИКАЦИЈЕ МОГУ ДОВЕСТИ ДО ПОТПУНО РАЗЛИЧИТИХ ИНТЕРМОЛЕКУЛСКИХ ИНТЕРАКЦИЈА: СЛУЧАЈ ФЕРОЦЕНИЛ <i>N</i> -АЦИЛ ПИРАЗОЛИНА .....	46
<b><u>G. A. Bogdanović, S. B. Novaković, Z. Ratković, S. Lj. Matić, J. Muškinja</u></b> SMALL STRUCTURAL MODIFICATIONS CAN RESULT IN COMPLETELY DIFFERENT INTERMOLECULAR INTERACTIONS: A CASE OF THE FERROCENYL <i>N</i> -ACYL PYRAZOLINES .....	47
<b><u>Д. С. Кретић, В. Б. Медаковић, И. С. Вељковић</u></b> ПАРАЛЕЛНО-СМАКНУТЕ ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЗМЕЂУ S <sub>8</sub> ПРСТЕНОВА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА: СВЕОБУХВАТНА ТЕОРИЈСКА СТУДИЈА.....	48
<b><u>D. S. Kretić, V. B. Medaković, I. S. Veljković</u></b> PARALLEL-DISPLACED INTERACTIONS BETWEEN S <sub>8</sub> RINGS IN CRYSTAL STRUCTURES: COMPREHENSIVE THEORETICAL STUDY .....	49
<b><u>М. Јевтовић, А. Певец, М. Шумар Ристовић, М. Савић, Д. Митић, Н. Стевановић</u></b> СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА КОМПЛЕКСА Mn(II) СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛТИАЗОЛА И ТИОСЕМИКАРБАЗИДА .....	50
<b><u>M. Jevtović, A. Pevec, M. Šumar Ristović, M. Savić, D. Mitić, N. Stevanović</u></b> SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF Mn(II) COMPLEX WITH THE CONDENSATION PRODUCT OF THIOSEMICARBAZIDE AND 2-ACETYLTIAZOLE.....	51
<b><u>А. Радојковић, Д. Луковић Голић, Н. Јовић Орсини, Н. Николић</u></b> СТРУКТУРНА СВОЈСТВА КЕРАМИКЕ BiFeO <sub>3</sub> ДОПИРАНЕ ЛАНТАНОМ И ЦИРКОНИЈУМОМ .....	52
<b><u>A. Radojković, D. Luković Golić, N. Jović Orsini, N. Nikolić</u></b> STRUCTURAL PROPERTIES OF BiFeO <sub>3</sub> CERAMICS DOPED WITH LANTHANUM AND ZIRCONIUM.....	53

## СТРУКТУРНА СВОЈСТВА КЕРАМИКЕ $\text{BiFeO}_3$ ДОПИРАНЕ ЛАНТАНОМ И ЦИРКОНИЈУМОМ

А. Радојковић<sup>а</sup>, Д. Луковић Голић<sup>а</sup>, Н. Јовић Орсини<sup>б</sup>, Н. Николић<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Институт за мултидисциплинарна истраживања, Кнеза Вишеслава 1а, Београд, Универзитет у Београду, Република Србија; <sup>б</sup> Институт за нуклеарне науке "Винча" - Институт од националног значаја за Р. Србију, Мике Петровића Аласа 12-14, Винча, Република Србија  
e-mail: natasaj@vin.bg.ac.rs

Бизмут-ферит ( $\text{BiFeO}_3$ ) је један од најчешће проучаваних мултифероника који истовремено испољава и фeroелектрично и антиферомагнетно уређење на собној температури. Међутим, велика струја цурења, потешкоће у добијању чисте фазе и порозност керамике су неки од недостатака који спречавају ширу примену овог материјала. До сада су урађена многа истраживања како би се побољшала својства  $\text{BiFeO}_3$ , било делимичном заменом катјона, било применом различитих метода синтезе.

Вектор спонтане фeroелектричне поларизације волуминозног  $\text{BiFeO}_3$  поклапа се са једним од [111] праваца перовскитне структуре (просторна група  $R3c$ ). Правац поларизације се може променити за  $180^\circ$ ,  $109^\circ$  и  $71^\circ$ . Побољшање фeroелектричних својстава  $\text{BiFeO}_3$  може се постићи одговарајућим допирањем узорака. У овом раду приказани су резултати допирања керамике  $\text{BiFeO}_3$  лантаном (на местима  $\text{Bi}^{3+}$ ) и цирконијумом (на местима  $\text{Fe}^{3+}$ ). Серија од девет узорака са очекиваном стехиометријом  $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Zr}_y\text{O}_{3+\delta}$ , за  $x = 0, 0,10$  или  $0,15$  и  $y = 0, 0,002$  или  $0,01$ , синтетисана је методом отпаравања воденог раствора соли метала на  $80^\circ\text{C}$ . Прекурсорски прахови су оджарени на  $650^\circ\text{C}$  током 3 сата, а добијени керамички прахови пресовани и синтеровани на температурама између  $780^\circ\text{C}$  и  $835^\circ\text{C}$ . Rietveld-ова метода је коришћена за утачњавање дифрактограма синтерованих узорака и добијање информација о њиховој кристалној структури. Резултати су потврдили да допирање лантаном за  $x = 0,10$  стабилизује структуру перовскита и не дозвољава формирање других фаза. Даље повећање садржаја лантана на  $x = 0,15$  иницира прелазак кристалне структуре из ромбодарске (п.г.  $R3c$ ) у орторомбичну (п.г.  $Pnma$ ) фазу. Делимична замена јона  $\text{Bi}^{3+}$  јонима  $\text{La}^{3+}$  у положајима  $6a$  доводи до контракције кристалне решетке, док делимична замена јона  $\text{Fe}^{3+}$  јонима  $\text{Zr}^{4+}$  доводи до повећања параметара решетке. Углови између  $\text{Bi-Fe-Bi}$  јона, као и катјон-катјон растојања могу бити корелисани са реманентном поларизацијом због чега су праћени у испитиваним системима  $\text{BiFeO}_3$ .

## STRUCTURAL PROPERTIES OF BiFeO<sub>3</sub> CERAMICS DOPED WITH LANTHANUM AND ZIRCONIUM

A. Radojković<sup>a</sup>, D. Luković Golić<sup>a</sup>, N. Jović Orsini<sup>b</sup>, N. Nikolić<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Institute for Multidisciplinary Research, Kneza Višeslava 1a, Belgrade, University of Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> VINČA Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, P.O. Box 522, Belgrade, Serbia  
e-mail: natasaj@vin.bg.ac.rs

Bismuth ferrite (BiFeO<sub>3</sub>) is one of the most studied multiferroic materials due to its unique property of having both ferroelectric and antiferromagnetic ordering at room temperature. However, high leakage current, difficulties with pure phase synthesis and porosity of bulk ceramics are some of the drawbacks that still prevent it from being practically applied. Up to now, many investigations have been conducted to improve BiFeO<sub>3</sub> multiferroic properties, either by cation substitutions at the Bi<sup>3+</sup> or Fe<sup>3+</sup> site, or by applying various synthesis methods.

The spontaneous ferroelectric polarization in bulk BiFeO<sub>3</sub> lies along one of the [111] directions of the perovskite structure (space group *R3c*). The direction of the polarization can be switched by 180°, 109° and 71°. For the improvement of the ferroelectric properties of BiFeO<sub>3</sub>, numerous doping strategies have been demonstrated. In this paper, co-doping of bismuth ferrite ceramics with La (at Bi-site) and Zr (at Fe-site) was performed. A series of nine samples with the expected stoichiometry Bi<sub>1-x</sub>La<sub>x</sub>Fe<sub>1-y</sub>Zr<sub>y</sub>O<sub>3+δ</sub>, for  $x = 0, 0.10$  or  $0.15$  and  $y = 0, 0.002$  or  $0.01$ , were synthesized by a method of hydro-evaporation of water-soluble metal salts at 80 °C. The precursor powders were calcined at 650 °C, and the obtained ceramic powders were pressed and sintered at temperatures between 780 °C and 835 °C. The Rietveld method was used to refine the XRD patterns of the sintered samples and obtain information about their crystal structure. The results confirmed that doping with lanthanum for  $x = 0.10$  stabilize the perovskite structure and does not allow the formation of secondary phases. Further increasing of lanthanum content to  $x = 0.15$  initiates the transition of the crystal structure from the rhombohedral (S.G. *R3c*) to the orthorhombic (S.G. *Pnma*) phase. The substitution of Bi<sup>3+</sup> ions by La<sup>3+</sup> ions at *6a* sites in the perovskite lattice leads to the contraction of the lattice, while the substitution of Fe<sup>3+</sup> ions with Zr<sup>4+</sup> ions at *6a* sites brings to the increase of the lattice parameters. Attention was paid to the angles formed between Bi-Fe-Bi ions, as well as the values for cation-cation distances in the unit cell, to see if they can be correlated with the polarization in studied BiFeO<sub>3</sub> systems.