

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**23rd CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Андревље – Andrevlje
2016.

**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ
КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

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

За издавача:
Оливера Клисурић

Уредник:
Оливера Клисурић

Технички уредник:
Мирјана Радановић

уз помоћ:
Марко Родић
Љиљана Војиновић Јешић

Издавање ове публикације омогућено је
финансијском помоћи Природно-мате-
матичког факултета Универзитета у Но-
вом Саду

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-3-6

Штампа:
Футура д.о.о.
Мажуранићева 46
21131 Петроварадин

Тираж: 100

Нови Сад
2016

**23rd 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:
Olivera Klisurić

Editor:
Olivera Klisurić

Technical editor:
Mirjana Radanović

with the help of:
Marko Rodić
Ljiljana Vojinović Ješić

This publication is financially supported by
the Faculty of Sciences University of Novi Sad

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-3-6

Printing:
Futura d.o.o.
Mažuranićeva 46
21131 Petrovaradin

Copies: 100

Novi Sad
2016

CIP - Каталогизација у публикацији
Библиотека Матице српске, Нови Сад

548/549(048.3)

СРПСКО кристалографско друштво. Конференција (23 ; 2016 ; АндРЕВЉЕ)

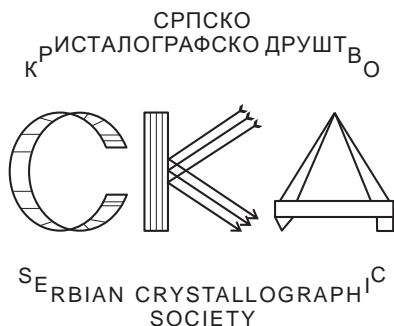
Изводи радова / XXIII конференција Српског кристалографског друштва, АндРЕВЉЕ, [9-11. 6.]
2016. ; [уредник Оливера Клисурић] = Abstracts / 23rd Conference of the Serbian Crystallographic Soci-
ety, Andrevlje, [9-11. 6.] 2016. ; [editor Olivera Klisurić]. - Београд : Српско кристалографско друштво,
2016 (Петроварадин : Футура). - 106 стр. : илустр. ; 25 cm

Упоредо енгл. и срп. текст. - Тираж 100.

ISBN 978-86-912959-3-6

1. Ур. ств. насл.

а) Кристалографија - Апстракти б) Минералологија - Апстракти



**XXIII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ
ДРУШТВА**

**23rd CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC
SOCIETY**

Научни одбор:

Др Дејан Полети, ТМФ, Београд
Др Јелена Роган, ТМФ, Београд
Др Љиљана Карановић, РГФ, Београд
Др Срећко Трифуновић, ПМФ, Крагујевац
Др Александар Кременовић, РГФ, Београд
Др Предраг Вулић, РГФ, Београд
Др Агнеш Капор, ПМФ, Нови Сад
Др Срђан Ракић, ПМФ, Нови Сад
Др Olivera Klisuriћ, ПМФ, Нови Сад
Др Snežana Zarić, ХФ, Београд
Др Bratislav Antić, „ВИНЧА”, Београд
Др Goran Bogdanović, „ВИНЧА”, Београд
Др Slađana Novaković, „ВИНЧА”, Београд

Scientific Committee:

Dr. Dejan Poleti, TMF, Belgrade
Dr. Jelena Rogan, TMF, Belgrade
Dr. Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade
Dr. Srećko Trifunović, PMF, Kragujevac
Dr. Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade
Dr. Predrag Vulić, RGF, Belgrade
Dr. Agneš Kapor, PMF, Novi Sad
Dr. Srđan Rakić, PMF, Novi Sad
Dr. Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad
Dr. Snežana Zarić, HF, Belgrade
Dr. Bratislav Antić, “VINČA”, Belgrade
Dr. Goran Bogdanović, “VINČA”, Belgrade
Dr. Slađana Novaković, “VINČA”, Belgrade

Организациони одбор:

Olivera Klisurić, ПМФ, Нови Сад
Marko Rodić, ПМФ, Нови Сад
Љиљана Војиновић Јешић, ПМФ, Нови Сад
Mirjana Radanović, ПМФ, Нови Сад

Organizing Committee:

Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad
Marko Rodić, PMF, Novi Sad
Ljiljana Vojinović Ješić, PMF, Novi Sad
Mirjana Radanović, PMF, Novi Sad

BIZMUT-FERIT DOPIRAN GADOLINIJUMOM

**A. Dapčević¹, D. Luković Golić², A. Radojković², J. Ćirković², G. Branković²,
Z. Branković²**

¹*Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11000 Beograd, Srbija;* ²*Institut za multidisciplinarna istraživanja, Univerzitet u Beogradu, Kneza Višeslava 1a, 11030 Beograd, Srbija*
e-mail: hadzi-tonic@tmf.bg.ac.rs

Magnetno-električni multiferoici jedni su od najatraktivnijih materijala poslednjih godina s obzirom na moguću primenu u uređajima za skladištenje podataka, senzorima i „*spintronic*” uređajima. Bizmut-ferit, BiFeO₃, je poznati multiferoik za koga je karakteristično postojanje i feroelektriciteta i magnetizma iznad sobne temperature. Magnetna, električna i optička svojstva BiFeO₃ mogu se poboljšati dopiranjem lantanoidima jer ovi dopanti povećavaju magnetizaciju [1].

Mikrokristalni uzorci gadolinijumom dopiranih BiFeO₃ dobijeni su metodom potpunog otparavanja rastvarača, tj. vode, prema proceduri koju su predložili Sakar i koautori [2]. Mešanjem na magnetnoj mešalici rastvora Bi(NO₃)₃·5H₂O, Gd(NO₃)₃·6H₂O i Fe(NO₃)₃·9H₂O i njihovim zagrevanjem do 80 °C i potpunog uparavanja, nastali su prahovi mrkocrvene boje. Nakon sušenja tokom 2 h na 90 °C, prahovi su kalcinirani na 650 °C u cevnoj peći tokom 3 h. Dobijeni mikrokristalni uzorci sastava Bi_{1-x}Gd_xFeO₃ (x = 0,075, 0,05, 0,03 i 0,01) ispresovani su u vidu tableta i sinterovani 6 h na 870 °C.

Podaci za Ritveldovo utajnjavanje prikupljeni su na sprajšenim sinterovanim uzorcima na difraktometru Ital Structure APD 2000 sa CuK α zračenjem ($\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$) u intervalu 20 – 100 °2 θ sa korakom od 0,02 ° i vremenom zadržavanja od 10 s po koraku. Za utajnjavanje strukture korišćeni su programski paketi FULLPROF i WINPLOTR.

Analizom difraktograma najpre je određen fazni sastav polikristalnih uzoraka. U svim uzorcima identifikovan je romboedarski Bi_{1-x}Gd_xFeO₃ (prostorna grupa R3c) uz prisustvo manje od 3 % faze Bi₂Fe₄O₉. Primećen je trend smanjenja zapremine jedinične ćelije sa povećanjem sadržaja gadolinijuma.

Nakon što su određeni položaji atoma, izračunate su vrednosti rastojanja (Bi,Gd)–Fe i dužine veza Bi–O da bi se procenilo izmeštanje katjona duž [111], jer je ono dobar pokazatelj električne polarizacije u uzorcima Bi_{1-x}Gd_xFeO₃. Najveća električna polarizacija predviđa se za uzorak sa najvećim sadržajem dopanta, tj. Bi_{0,925}Gd_{0,075}FeO₃, s obzirom na to da je najveće rastojanje između katjona nađeno kod ovog uzorka. Očekuje se da uzorak sa najnižim sadržajem dopanta, tj. Bi_{0,99}Gd_{0,01}FeO₃, ima najizraženiji antiferomagnetizam jer ga karakteriše najmanji ugao Fe–O–Fe. Ovaj ugao pokazuje nivo preklapanja Fe(3d)–O(2p) orbitala u kristalnoj strukturi, od koga zavisi antiferomagnetno sprezanje između nesusednih Fe³⁺-katjona preko O²⁻-anjona.

[1] A. Mukherjee, S. Basu, P. K. Manna, S. M. Yusuf, M. Pal, *J. Mater. Chem.*, **C2** (2014) 5885–5891.

[2] M. Sakar, S. Balakumar, P. Saravanan, S. N. Jaisankar, *Mater. Res. Bull.*, **48** (2013) 2878–2885.

GADOLINIUM DOPED BISMUTH FERRITE

A. Dapčević¹, D. Luković Golić², A. Radojković², J. Čirković², G. Branković², Z. Branković²

¹Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia; ²Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Kneza Višeslava 1a, 11030 Belgrade, Serbia
e-mail: hadzi-tonic@tmf.bg.ac.rs

The magnetoelectric multiferroics are one of the most promising materials in recent years due to their possible application in data storage, sensors, and spintronic devices. Bismuth ferrite, BiFeO₃, is a well-known multiferroic material which exhibits the coexistence of ferroelectricity and magnetism well above room temperature. The magnetic, electrical and optical properties of BiFeO₃ can be improved by doping with lanthanoids, since these dopants induce larger magnetization [1].

Gadolinium doped microcrystalline samples of BiFeO₃ were synthesized from Bi(NO₃)₃·5H₂O, Gd(NO₃)₃·6H₂O and Fe(NO₃)₃·9H₂O, by hydro-evaporation procedure presented by Sakar *et al.* [2]. Previously dissolved starting components were mixed and heated at 80 °C under magnetic stirring until complete evaporation. The brown-red precursor powders obtained after drying for 2 h at 90 °C were calcined at 650 °C in a tube oven for 3 h to form resulting Bi_{1-x}Gd_xFeO₃ (x = 0.075, 0.05, 0.03 and 0.01) powders. Afterwards, the powders were pressed into pellets and sintered for 6 h at 870 °C.

The XRD data of pulverized sintered samples were collected using an Ital Structure APD 2000 X-ray powder diffractometer (CuK α radiation, $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$) in a range 20 – 100 °2 θ with a step-width of 0.02 ° and a constant counting time of 10 s per step. The FULLPROF software was used for the Rietveld refinement of the structure in WINPLOTR environment.

The XRD powder patterns revealed that the dominant phase was rhombohedral Bi_{1-x}Gd_xFeO₃ (space group R3c). A small amount (less than 3 %) of Bi₂Fe₄O₉ phase was found in each sample. The trend of decreasing unit-cell volumes with the increase of Gd-content has been observed.

The positions of all atoms, (Bi,Gd)–Fe distances and Bi–O bond lengths are calculated in order to verify the cation displacement along [111], which is a good indicator of electrical polarization of Bi_{1-x}Gd_xFeO₃ samples. The greatest lattice distortion was found for the sample with the highest Gd-content, *i.e.* Bi_{0.925}Gd_{0.075}FeO₃, and therefore the largest electric polarization is expected here. The highest antiferromagnetic ordering at room temperature can be expected for the sample with the lowest Gd-content, *i.e.* Bi_{0.99}Gd_{0.01}FeO₃, since it has the smallest Fe–O–Fe bond angle. This angle indicates the extent of Fe(3d)–O(2p) orbital overlapping in the crystal structure, which is responsible for the antiferromagnetic coupling between next-nearest-neighbor Fe³⁺ cations *via* O²⁻ anion.

- [1] A. Mukherjee, S. Basu, P. K. Manna, S. M. Yusuf, M. Pal, *J. Mater. Chem.*, **C2** (2014) 5885–5891.
[2] M. Sakar, S. Balakumar, P. Saravanan, S. N. Jaisankar, *Mater. Res. Bull.*, **48** (2013) 2878–2885.