

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)

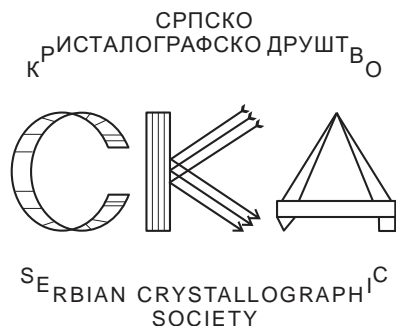
Изводи радова / XXIII конференција Српског кристалографског друштва, АндРЕВЉЕ, [9-11. 6.]
2016. ; [уредник Оливера Клисурић] = Abstracts / 23rd Conference of the Serbian Crystallographic Soci-
ety, Andrevlje, [9-11. 6.] 2016. ; [editor Olivera Klisurić]. - Београд : Српско кристалографско друштво,
2016 (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, PMF, Novi Sad
Marko Rodić, PMF, Novi Sad
Ljiljana Vojinović Ješić, PMF, Novi Sad
Mirjana Radanović, PMF, Novi Sad

Organizing Committee:

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

MODEL SISTEMI ZA FLUORESCENCIJU FLUORAPATITA ZASNOVANI NA KRISTALOGRAFSKIM I KVANTNO-HEMIJSKIM PODACIMA

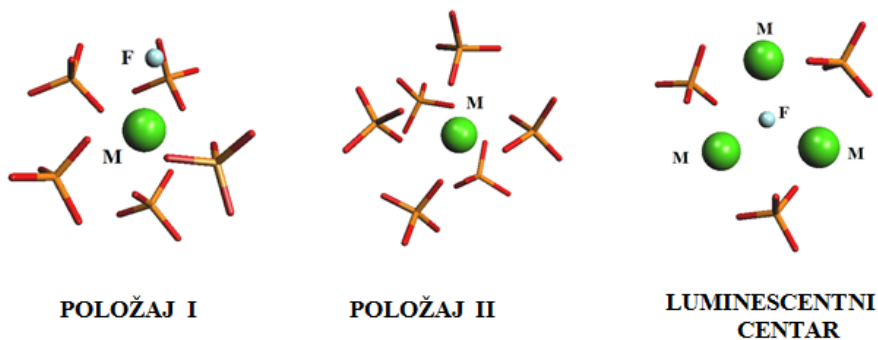
G. Janjić¹, D. Milojkov², V. Stanić³

¹Institut za Hemiju, Tehnologiju i Metalurgiju, Univerzitet u Beogradu, Njegoševa 12, Beograd, Srbija; ²Tehnološki fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, Bulevar cara Lazara 1, Novi Sad, Srbija; ³Institut za nuklearne nauke „Vinča“ Univerzitet u Beogradu, P.O. Box 522, Beograd, Srbija

e-mail: janjic_goran@chem.bg.ac.rs

Hidroksiapatit (HAp) i fluorapatit (FAP) su dobro poznati biomaterijali jer predstavljaju glavne komponente kostiju i zuba. Sintetički HAp i FAP se smatraju potencijalnim biomaterijalima zbog svojih bioloških, biokompatibilnih i antibakterijskih aktivnosti. Razni metalni joni korišćeni su za dopiranje hidroksiapatitnih i fluorapatitnih biomaterijala, sa ciljem da se dobiju bolja svojstva [1]. HAp i FAP dopirani retkim zemljama (RE) su potencijalni luminescentni biomarkeri. Još jedna veoma bitna karakteristika nanočestičnih bioapatita je mogućnost zamene jona metala, kao što su joni lantanida koji predstavljaju nove luminescentne centre.

Da bi kreirali model sistem za kvantno-hemijske proračune koji mogu da reprodukuju fluorescentne spektre dopiranih fluorapatita, urađena je analiza kristalnih struktura. Analiza kristalnih struktura dobijenih iz Baze kristalnih struktura časopisa „American Mineralogist“ (AMCSD) pokazala je da FAP imaju heksagonalnu simetriju (prostorna grupa $P6_3/m$), koja je izgrađena od jona metala (Ca, Sr, NA, Ce, Mn, La, Nd, Cd, Di, U ili Th), trovalentne anjonske grupe (PO_4^{3-} ili SiO_4^{3-}), i monovalentnog anjona (F^- , OH^- , i Cl^-). U ovim strukturama postoje dva simetrijski neekvivalentna položaja jona Ca^{2+} : položaji I i II (vidi sliku dole). *Ab initio* proračuni fluorescentnih spektara su urađeni za tri geometrije, sa jonima metala u položajima I i II položaju, dok treći model sistem sadrži tri katjona metala, tri PO_4^{3-} jona i F^- jon u centru (luminescentni centar). Treći model sistem pokazao je najbolje slaganje sa eksperimentalnim podacima.



[1] V. Stanić, A. Radosavljević-Mihajlović, V. Živković-Radovanović, B. Nastasijević, M. Marinović-Cincović, J. Marković, M. Budimir Milica, *App. Surf. Sci.*, **337** (2015) 72–80.

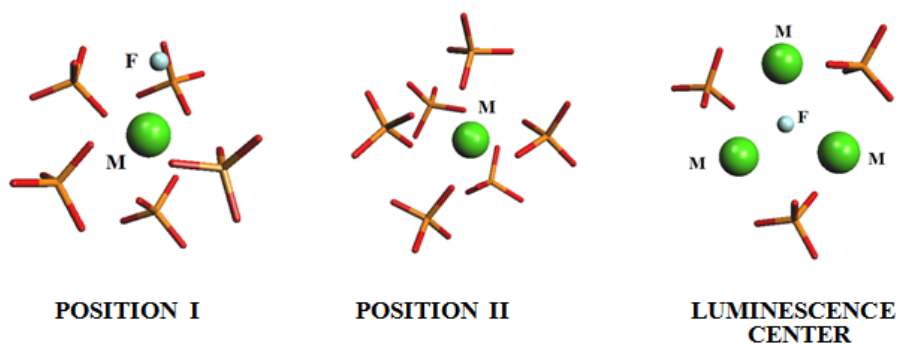
MODEL SYSTEMS FOR FLUORESCENCE OF FLUORAPATITE BASED ON CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL DATA

G. Janjić¹, D. Milojkov², V. Stanić³

¹Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy Belgrade, University of Belgrade, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia; ²Faculty of Technolog, University of Novi Sad, Bulevar cara Lazara 1, Novi Sad, Serbia; ³Vinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, P.O. Box 522, Belgrade, Serbia
e-mail: janjic_goran@chem.bg.ac.rs

Hydroxiapatite (HAp) and fluorapatite (FAp) are well known biomaterials being the main components of bones and teeth. The synthetic HAp and FAp are considered as potential biomaterial due to bioactive and biocompatible and antibacterial activity. Various metal ions, have been used to doped hydroxyapatite and fluorapatite biomaterials with in order to get better activity [1]. The rare-earth (RE) doped HAp and FAp are prospective luminescent biomarkers. Another very important characteristic of nanosized bioapatite is its structural capacity to accept many ionic substitutions such as lanthanide ions as new luminescent centers.

To create a model system for quantum-chemical calculations that can reproduce the fluorescent spectra of doped fluorapatite analysis of crystal structure were done. The analysis of crystal structures extracted from American Mineralogist Crystal Structure Database shown that FAp has a hexagonal symmetry (space group $P6_3/m$), with metal cation (Ca, Sr, Na, Ce, Mn, La, Nd, Cd, Dy, U or Th), trivalent anionic group (PO_4 or SiO_4), and monovalent anion (F^- , OH^- , and Cl^-). In these structures there are two non equivalent Ca^{2+} positions: position I and position II (see figure below). *Ab initio* calculations of fluorescence spectra were done on three geometries with metal ion in positions I and II, while the third model system contains three metal cations, three PO_4^{3-} anions and F^- ion in the center (luminescence center). The third model system showed the best agreement with the experimental data.



[1] V. Stanić, A. Radosavljević-Mihajlović, V. Živković-Radovanović, B. Nastasijević, M. Marinović-Cincović, J. Marković, M. Budimir Milica, *App. Surf. Sci.*, **337** (2015) 72–80.