

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXV КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

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

Abstracts

Бајина Башта – Baјina Bašta
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"

Ag-DOPIRANI FLUORAPATITNI NANOMATERIJALI DOBIJENI POSTUPKOM NEUTRALIZACIJE

G. Janjić^a, D. Milojkov^b, D. Mutavdžić^c, V. Živković-Radovanović^d, K. Radotić^e, A. Radosavljević-Mihajlović^e, V. Stanić^e

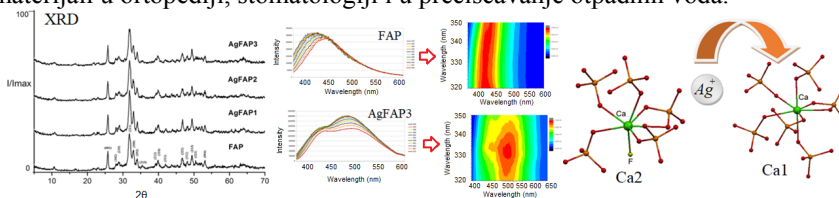
^aInstitut za Hemiju, Tehnologiju i Metalurgiju, Univerzitet u Beogradu, Njegoševa 12, Beograd, Srbija; ^bTehnološki fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, Bulevar cara Lazara 1, Novi Sad, Srbija; ^cInstitut za multidisciplinarna istraživanja, Univerzitet u Beogradu, Kneza Višeslava 1, 11030 Beograd, Srbija; ^dHemijski fakultet, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 12-16, 11001 Beograd, Srbija; ^eInstitut za nuklearne nauke „Vinča“ Univerzitet u Beogradu, P.O. Box 522, Beograd, Srbija;
e-mail:janjic_goran@chem.bg.ac.rs

Srebrom dopirani fluorapatiti (AgFAP) su sintetisani postupkom neutralizacije (reakcija Ag_2O rastvorenog u HF i H_3PO_4 sa suspenzijom $\text{Ca}(\text{OH})_2$). [1] Sintetisani uzorci AgFAP imali su procentnu zastupljenost jona srebra ($[\text{Ag}/(\text{Ag} + \text{Ca})] \cdot 100\%$) od 0.001, 0.01 i 1%. Rendgenska difraktometrijska (XRD) analiza uzoraka FAP i AgFAP pokazala je da su položaji difrakcionih pikova slični i da su u skladu sa ASTM podacima za fluorapatite (Slika 1). FAP kao materijal ima kristalnu rešetku sa heksagonalnom $\text{P6}_3/\text{m}$ prostornom grupom, sa dva strukturno različita položaja Ca^{2+} jona (Ca1 (4f) i Ca2 (6h) položaji). FTIR and SEM analize pokazale su da su čestice AgFAP uzoraka homogene i nano-veličine.

Fluorescencija AgFAP uzoraka je pomerena ka zelenom regionu, u odnosu na fluorescenciju FAP nanočestica (u ljubičastom regionu vidljivog dela spektra). MCR-ALS analize su pokazale formiranje dva maksimuma u AgFAP fluorescentnom spektru (na 420 i 520 nm), kao posledica dopiranja Ag^+ jona u Ca1 (4f) položaj FAP rešetke (Slika 1). Rezultati DFT proračuna su pokazali da je Ag^+ jon jače vezan u Ca1 položaju (-1352,6 kcal/mol) nego u Ca2 položaju (-1249.0 kcal/mol).

Ispitivanja antibakterijskih aktivnosti su pokazale da svi uzorci AgFAP imaju biocidni efekat na patogene, [1] dok samo AgFAP3 uzorak (1% Ag^+) može poslužiti kao nanomaterijala za zaštitu od zračenja, kao i za pripremu fotoluminiscentnih dozimetara, jer ovaj materijal apsorbira fotone u celoj oblasti UV zračenja.

Rezultati ove studije ukazuju da su srebrom dopirani fluorapatitni nanomaterijali pogodni za različite biomedicinske primene, kao antibakterijski biomaterijali u ortopediji, stomatologiji i u prečišćavanje otpadnih voda.



Slika 1. XRD, emisiono-apsorpcioni spektri FAP, i dopiranje Ag^+ jona u Ca1 položaj.

[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.

Ag-DOPED FLUORAPATITE NANOMATERIALS OBTAINED BY NEUTRALIZATION METHOD

G. Janjić^a, D. Milojkov^b, D. Mutavdžić^c, V. Živković-Radovanović^d, K. Radotić^c, A. Radosavljević-Mihajlović^e, V. Stanić^e

^aInstitute of Chemistry, Technology and Metallurgy Belgrade, University of Belgrade, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia; ^bFaculty of Technolog, University of Novi Sad, Bulevar cara Lazara 1, Novi Sad, Serbia; ^cInstitute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Kneza Višeslava 1, 11030 Belgrade, Serbia; ^dFaculty of Chemistry, University of Belgrade, Njegoševa 12, 11001 Belgrade, Serbia; ^eVinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, P.O. Box 522, Belgrade, Serbia
e-mail: janjic_goran@chem.bg.ac.rs

Silver doped fluorapatite (AgFAP) nanopowders were synthesised by neutralization method (reaction of dissolving Ag₂O in solution of HF and H₃PO₄ with suspension of Ca(OH)₂). [1] AgFAP samples were synthesized with atomic ratios of [Ag/(Ag + Ca)]-100% of 0.001, 0.01 and 1%. The XRD patterns of FAP and Ag⁺-doped FAP samples (Figure 1) are similar, with the positions of X-ray diffraction peaks in accordance with ASTM data for fluorapatite. FAP as material has a crystal lattice with a hexagonal symmetry space group *P6₃/m*, with two structurally different positions of Ca²⁺ ion (Ca1 (4f) and Ca2 (6h) sites). FTIR and SEM analysis showed that the particles of AgFAP samples are nano-sized and homogenous.

Fluorescence of AgFAP is red shifted to the green region compared to fluorescence of FAP nanoparticles (in the violet region of visible part of the spectrum). MCR-ALS analyses showed the formation of two maxima in AgFAP fluorescence spectra (at 420 and 520 nm), as a consequence of Ag⁺ ions doping at Ca1 (4f) site in the FAP lattice (Figure 1). The results of DFT calculations showed that an Ag⁺ ion is stronger bonded to Ca1 site (-1352.6 kcal/mol) than to Ca2 site (-1249.0 kcal/mol).

Antibacterial studies have shown that all studied AgFAP samples exhibit biocidal effect against pathogens, [1] while only AgFAP3 (1% of Ag⁺) nanopowder might be used as the radiation protective nanomaterial, as well as for preparation of photoluminescence dosimeters, because this material absorbs photons over all part of the UV radiation spectrum. The result of this study indicates that Ag-doped fluorapatite nanomaterials are promising for different biomedical applications, as antibacterial biomaterials in orthopedics, dentistry and in the purification of waste water.

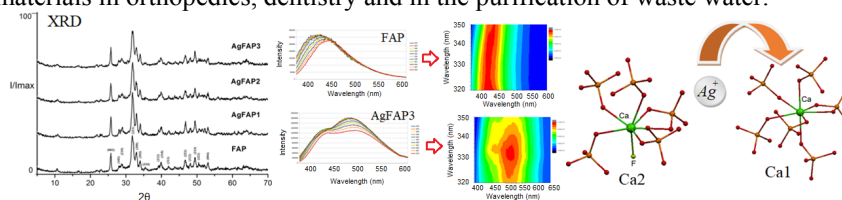


Figure 1. The XRD patterns, excitation-emission profiles of FAPs, and Ag⁺ ion doping at Ca1 site.

[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.