

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

I и II КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

I and II CONFERENCE  
OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Abstracts

БЕОГРАД - BELGRADE

1993.

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

I и II КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

I and II CONFERENCE  
OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Abstracts

БЕОГРАД - BELGRADE

1993.

Издавач - Publisher

Српско кристалографско друштво  
Serbian Crystallographic Society

Председник - President  
Бела Рибар - Bela Ribar

Потпредседник - Vice President  
Илија Крстановић - Ilija Krstanić

Секретар - Secretary  
Љиљана Карановић - Ljiljana Karanović

Адреса - Address

11000 Београд, Ђушина 7, тел./факс: 635-217  
11000 Belgrade, Đušina 7, tel./fax: 635-217

Уредници - Editors

Илија Крстановић - Ilija Krstanić  
Богдан Прелесник - Bogdan Prelesnik  
Дејан Полети - Dejan Poleti  
Љиљана Карановић - Ljiljana Karanović

Издавање ове публикације омогућено је финансијском помоћу Министарства  
за науку и технологију Републике Србије.

This publication is financially supported by the Ministry for Science and Technology  
of Republic Serbia.

Штампа: Завод за графичку технику  
Технолошко-металуршког факултета  
Београд, Карнегијева бр. 4

## ПРЕДГОВОР

Наставак делатности бившег Југословенског центра за кристалографију на територији Републике Србије организован је сада кроз рад Српског кристалографског друштва (СКД).

Оснивачка скупштина Српског кристалографског друштва одржана је 7. маја 1992. г. у Свечаној сали Рударско-геолошког факултета у присуству више од 50 учесника и гостију. У име Организационог одбора скуп је поздравно проф. Илија Крстановић, шеф Катедре за кристалографију Рударско-геолошког факултета. Скуп су поздравили и проф. Милослав Марковић, декан Рударско-геолошког факултета као домаћин скупа, академик Момчило М. Ристић у име САНУ и њеног председника академика Душана Капазира, проф. Живорад Чековић у име Српског хемијског друштва и академик Зоран Максимовић у име истраживача у области геолошких наука.

Сви говорници су изразили задовољство због оснивања друштва. Истичући значај кристалографије у фундаменталним и примењеним истраживањима зажелели су успешан рад свим истраживачима који ће деловати у оквиру друштва. Јединогласно је прихваћен Статут СКД којим су дефинисани задаци и начини рада друштва.

За председника СКД изабран је академик Бела Рибар (Институт за Физику ПМФ-а, Нови Сад), за подпредседника проф. Илија Крстановић (Рударско-геолошки факултет, Београд), а за секретара др Љиљана Караповић, ван. проф. (Рударско-геолошки факултет, Београд). Чланови председништва су др Богдан Прелесник, научни саветник (Институт за нуклеарне науке, Винча), проф. Слободанка Станковић (Институт за физику ПМФ-а, Нови Сад), проф. Светислав Јањић (Институт за бакар, Бор) и дипл. инж. Добрица Стојановић (Магнихром, Краљево).

Прва конференција СКД одржана је 30-31. октобра 1992. г. у Београду. Преко 40 учесника одржало је три пленарна предавања и 25 саопштења од којих 7 из области органских структура, 10 из области минералогije, 6 из области синтетичких неорганских једињења и 2 из области инструменталних метода у кристалографији.

Друга конференција СКД одржана је 24. септембра 1993. г. такође у Београду. Слободанка Станковић, која је учествовала у раду 16. конгреса и генералне скупштине Интернационалне уније за кристалографију у Кини, саопштила је пријатну вест да је наше друштво примљено у Интернационалну унију за кристалографију. Самим тим постало је члан и другог организација придружених овој Унији. На Другој конференцији било је присутно око 40 учесника. Саопштено је 20 реферата од којих 11 из области структура органских једињења, 5 из области минерала и 4 из области синтетичких неорганских једињења.

У сагласности са Статутом СКД, Трећа конференција би требало да се одржи 1994. г. у Новом Саду.

Изводи радова Прве и Друге конференције су штампани офсет техником без накнадних корекција.

Захваљујемо се Министарству за науку и технологију на финансијској помоћи за штампање ове публикације.

У Београду, октобра 1993. г.

Уредници

## PREFACE

The resumption of the activity of the former Yugoslav Center for Crystallography in the Republic of Serbia is organized now by the newly formed Serbian Crystallographic Society.

Serbian Crystallographic Society was founded at the formal Session held on May 7, 1992 at the main auditorium of the Faculty of Mining and Geology, University of Belgrade. Prof. I. Krstanović head of the Department of Crystallography gave the opening address followed by the speeches of Prof. M. Marković dean of the Faculty of Mining and Geology, of Acad. M. M. Ristić in the behalf of the Serbian Academy of Sciences and its president Acad. Dušan Kanazir, Prof. Ž. Čeković in the behalf of Serbian Chemical Society and by Acad. Z. Maksimović for the Serbian geologists and mineralogists.

All the speakers expressed satisfaction for the formation of Serbian Crystallographic Society emphasizing the importance of crystallography in fundamental and applied research, underlying their belief in future successful work in the field of crystallography to all members of the Society. The Statute defining duties and functions of the Society has been accepted as well.

Executive Committee of the Society has been elected as follows: the President, Acad. Bela Ribar (Institute of Physics, University of Novi Sad), the Vice President, Prof. Ilija Krstanović (Faculty of Mining and Geology, University of Belgrade), the Secretary, Assoc. Prof. Ljiljana Karanović (Faculty of Mining and Geology, University of Belgrade), Dr. Bogdan Prelesnik, Scientific adviser (The Institute of Nuclear Sciences Vinča - Belgrade), Prof. Slobodanka Stanković (Institute of Physics, University of Novi Sad), Prof. Svetislav Janjić (Institute of Copper, Bor), Ing. Dobrica Stojanović (Institute "Magnohrom", Kraljevo).

The First Conference of the Society has been held in October 30-31, 1992 in Belgrade. More than 40 members took a part during its session. The three main lectures and 25 reports have been presented, of which 7 belonging to organic structures, 10 about minerals, 6 from the field of inorganic compounds, and 2 dealing with instrumental methods in Crystallography.

The Second Conference has been held in September 24<sup>th</sup>, 1993 in Belgrade. Prof. S. Stanković, who took a part on XVI Congress and General Assembly of the IUCr held in Beijing (China), informed that Serbian Crystallographic Society has been accepted as the member of IUCr. This was a very pleasant news having in mind that the membership in IUCr means at the same time the membership in the other organizations related to IUCr. During this Conference 20 reports have been presented of which 11 dealing with organic structures, 5 on minerals and 4 on inorganic crystal structures.

According to the Statute of the Society the Third Conference will be held in 1994 at Novi Sad.

The abstracts of the reports of I, as well as of II Conference, are pressed by offset technique as submitted by authors.

We are grateful to the Ministry for Science and Technology of Republic Serbia for the financial support.

Belgrade, October 1993

Editors



## САДРЖАЈ

I КОНФЕРЕНЦИЈА	1
ПЛЕНАРНА ПРЕДАВАЊА	3
САОПШТЕЊА	6
II КОНФЕРЕНЦИЈА	31
САОПШТЕЊА	33
ИНДЕКС АУТОРА	53

## CONTENT

I CONFERENCE	1
MAIN LECTURES	3
ORAL PRESENTATIONS	6
II CONFERENCE	31
ORAL PRESENTATIONS	33
AUTHOR INDEX	53

II КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА  
БЕОГРАД, 24. СЕПТЕМБАР 1993.

II CONFERENCE  
OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY  
BELGRADE, 24 SEPTEMBER 1993

R. Z. Dimitrijević<sup>1</sup>, P. I. Tandić<sup>2</sup>, U. B. Mioč<sup>3</sup> i Z. P. Nedić<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Rudarsko-geološki fakultet, Institut za MKPG, Dušina 7, 11000 Beograd  
<sup>2</sup>Geoinstitut, Rovinjska 12, 11000 Beograd  
<sup>3</sup>Fakultet za fizičku hemiju, Studentski Trg 16, 11000 Beograd

Monofosfatne volframove bronzе (MPTB) čine veliku strukturu grupu oksida čiju osnovu izgrađuju deblji slojevi  $WO_3$  oktaedara koje povezuju tetraedarski  $PO_4$  monoslojevi. Ove bronzе mogu se dalje podijeliti u dve grupe: bronzе sa heksagonalnim strukturnim kanalima MPTB<sub>h</sub> opšte formule  $A_x(PO_3)_4(WO_3)_2m$  i bronzе sa pentagonalnim kanalima MPTB<sub>p</sub> opšte formule  $(PO_2)_4(WO_3)_2m$ . Ove dve grupe bronzі međusobno se razlikuju u relativnoj orijentaciji oktaedarskih lanaca u sukcesivnim  $WO_3$  oktaedarskim slojevima. Obe grupe jedinjenja intenzivno se ispituju poslednjih godina zbog neobičnih magnetnih i električnih svojstava.

MPTB bronzа sastava  $PW_8O_{26}$  ispitivana u ovom radu dobljena je u procesu termalno indukovanih faznih transformacija  $H_3PW_{12}O_{40} \cdot 29H_2O$  kiseline na 600°C. U temperaturnom intervalu od 600-1150°C MPTB bronzа sa porastom temperature pokazuje polimorfne transformacije. Silika I. Triklinična faza ( $\alpha_0 = 7.310(1) \text{ \AA}$ ,  $b_0 = 7.524(1) \text{ \AA}$ ,  $c_0 = 7.686(1) \text{ \AA}$ ,  $\alpha_0 = 88.90(1)^\circ$ ,  $\beta_0 = 90.98(1)^\circ$ ,  $\gamma_0 = 90.94(1)^\circ$ ), formirana je na 1150°C posle 0.5h odgrevanja. Hemijska analiza faza na 600°C i 1150°C dala je sastav  $PW_8O_{26}$  a saglasno opštoj formuli za MPTB bronzе sva četiri polimorfa imaju koeficijent u opštoj formuli,  $n=16$ .

Kristalna struktura triklinične faze određena je Rietveld-ovom analizom u prostornoj grupi  $P1$  (No. 2). Za prve cikluse rafinisanja korišćeni su atomski parametri  $WO_3$  faze s obzirom na sličnost rendgenskih difraktograma praha. Položaj P u centru simetrije određen je iz Fourier-ovih mapa diferentne sinteze. Finalna Rietveld-ova silka  $PW_8O_{26}$  MPTB bronzе dobljena na bazi izračunatih atomskih i profinlnih parametara, kao i vrednosti faktora slaganja ukazuju na njenu bazičnu izostrukturnost sa  $WO_3$  fazom.

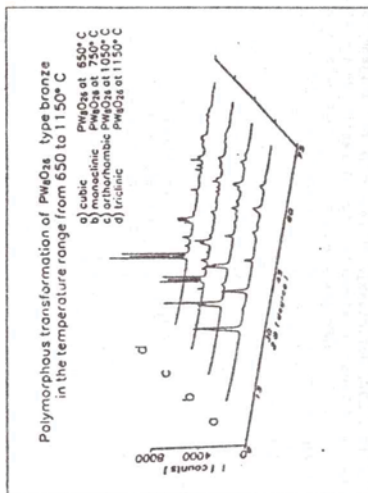
## LITERATURA

1. J. Giroult et al., *J. Solid State Chem.*, **44**, 407, (1982).
2. B. Domerges, R. Coreaud, P. Labbe and B. Ravau, *Ibid* **50**, 173, (1983).
3. A. Benmoussa et al., *Acta Cryst.*, **C40**, 573, (1984).
4. J. Giroult et al., *Acta Cryst.*, **B37**, 2139, (1981).
5. A. Benmoussa et al., *J. Solid State Chem.*, **44**, 318, (1982).
6. Z. Tevelidmedhin et al., *J. Solid State Chem.*, **95**, 21, (1991).
7. U. Mioč et al., *J. Mater. Sci.*, submittet, (1993).
8. R. Diehl, G. Brandt and E. Salje, *Acta Cryst.*, **B34**, 1105, (1978).

R. Z. Dimitrijević<sup>1</sup>, P. I. Tandić<sup>2</sup>, U. B. Mioč<sup>3</sup> and Z. P. Nedić<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Mining and Geology, Dept. of Cryst., Dušina 7, 11000 Belgrade  
<sup>2</sup>Geoinstitute, Rovinjska 12, 11000 Belgrade  
<sup>3</sup>Faculty of Physical Chemistry, P.O. Box 137, 11000 Belgrade

The monophosphate tungsten bronzes (MPTB) form a large family whose framework is built up from  $WO_3$ -type slabs interconnected through slices of  $PO_4$  tetrahedra. These bronzes can be divided into two series, the monophosphate bronzes with hexagonal tunnels,  $A_x(PO_3)_4(WO_3)_2m$  called MPTB<sub>h</sub> and the monophosphates bronzes with pentagonal tunnels  $(PO_2)_4(WO_3)_2m$  called MPTB<sub>p</sub>. These two series differ mainly one from the other by the relative orientation of the octahedral chains in the successive  $WO_3$ -type slabs. According to their unusual magnetic and electronic transport properties the MPTB bronzes have been the subject of intense investigation in recent years.  $PW_8O_{26}$  bronze compound investigated in this paper was synthesized in the course of thermally induced phase transformation of  $H_3PW_{12}O_{40} \cdot 29H_2O$  acid at 600°C. In the temperature range from 600-1150°C, MPTB bronze  $PW_8O_{26}$  shows polymorphous transitions, Fig. 1. The crystal structure of triclinic  $PW_8O_{26}$  phase was investigated by the Rietveld method in the centrosymmetric space group.

Sl. 1. Redgennski difraktogram  $PW_8O_{26}$  bronzі.