

<http://www.irb.hr/hr/str/zkm>

ZAVOD ZA KEMIJU MATERIJALA DIVISION OF MATERIALS CHEMISTRY

Predstojnik: dr. sc. Svetozar Musić
Tel. ++385 1 4561 094, e-mail: music@irb.hr

Ustroj zavoda:

Laboratorij za sintezu novih materijala, dr. sc. Boris Subotić, voditelj laboratorija

Laboratorij za procese taloženja, dr. sc. Damir Kralj, voditelj laboratorija

Laboratorij za radijacijsku kemiju i dozimetriju, dr. sc. Dušan Ražem, voditelj laboratorija

Laboratorij za kemiju čvrstog stanja, dr. sc. Želimir Blažina, voditelj laboratorija

Laboratorij za kemiju kompleksnih spojeva, dr. sc. Pavica Planinić, voditeljica laboratorija

Tajništvo, Vesna Picak, tajnica

Program rada:

Istraživan je utjecaj koncentracija silicija i aluminijskih iona u tekućoj fazi kristalizacijskog sustava na kinetiku rasta kristala zeolita A i X, mogućnosti sinteze magnezijevih alumosilikatnih keramika (fosferita) korištenjem amonijevih forme zeolita A i magnezijeva oksida kao polaznih reakcijskih komponenti te kristalizacije eukriptita grijanjem zeolita LiA(BW), litijeve forme zeolita A i amornog alumosilikatnog prekursora (gela) u kojem su originalni natrijevi ioni bili zamijenjeni litijevim ionima. Rezultati istraživanja su pokazali da tip kristaliziranog zeolita (A i/ili X) i brzina rasta kristala ne ovise o kemijskim i strukturnim svojstvima čvrste faze (amornog alumosilikatnog prekursora) već isključivo o kemijskom sastavu i "strukтури" (određenoj raspodjelom različitih aluminatnih, silikatnih i alumosilikatnih aniona) tekuće faze kristalizacijskog sustava. Magnezijeva alumosilikatna keramika (forsterit) visoke čistoće i u velikom prinosu može se dobiti kombiniranom obradom (visokoenergijsko mljevenje + zagrijavanje iznad 900 °C) smjese praškastog zeolita A u kojem su originalni natrijevi ioni zamijenjeni amonijevim ionima i praškastog magnezijeva oksida. Fazne analize tijekom zagrijavanja litijeve forme zeolita A (Li-LTA) s različitim brzinama zagrijavanja su pokazale da se proces visokotemperaturne transformacije Li-LTA odvija nastajanjem alumosilikatnih jedinica s kratkim dometom reda i njihovom difuzijski kontroliranom aglomeracijom u rendgenski amorfne aglomerate te da se kristalizacija β-eukriptita odvija homogenom nukleacijom u tako nastaloj amorfnoj fazi i difuzijski kontroliranim jednodimenzionalnim rastom nukleusa (kristala).

Predviđena su istraživanja kinetike taloženja na modelnim sustavima magnezijevih amonijevih fosfata, pri uvjetima koji podražavaju fiziološke. Pri tome planiramo istražiti čimbenike koji uvjetuju nastajanje određene čvrste faze (struvita ili njuberita) te utvrditi mehanizam njihove transformacije u termodinamički stabilne oblike. Također, predviđamo istražiti čimbenike odgovorne za pripremu taložnog kalcijeva karbonata velike specifične površine pri uvjetima uvećanog laboratorijskog mjerila.

Za studij odnosa između kemijske sinteze i svojstava metalnih oksida izabrani su modelni sustavi za koje se smatra da mogu imati primjene u naprednim tehnologijama. Određeni su uvjeti sinteze nanočestica ZnO primjenom sol-gel metode. Sol-gel metoda iskorištena je u sintezi Ga₂O₃ i GaOOH. Istraživana su mikrostrukturalna i kemijska svojstva u sustavima ZrO₂-Cr_{1.5}, HfO₂-Al₂O₃ i ZrO₂-Al₂O₃ s posebnim naglaskom na uvjete nastajanja čvrstih otopina. Izveden je komparativni

studij hidrotermalne kristalizacije HfO_2 i ZrO_2 iz amorfnih prekursora. Predložen je mehanizam taloženja željezovih oksida u jako alkalnom mediju u prisutnosti niklovih kationa. Istraživani su uvjeti sinteze čestica bizmutovog vanadata koji se može koristiti kao pigment. Pokazana je ovisnost nijansi žute boje tog pigmenta o veličini čestica.

Fizičko-kemijski učinci ionizirajućih zračenja koji će se istraživati bit će stvaranje i osobine zračenjem induciranih kratkoživućih reaktivnih čestica nastalih u radiolizi. Istraživat će se kvantitativni odnosi između doze i fizičkih, kemijskih i bioloških učinaka zračenja radi razvoja dozimetrije zračenja. Istraživat će se učinci zračenja u tvarima koje služe u prehrani, medicini, farmaciji i dr. da bi se razvijale nove primjene zračenja.

Polimerni materijali modificirani dodacima (polimerne mješavine, kompoziti) i zračenjem sve više zamjenjuju izvorne polimere jer su jeftiniji i nude kvalitetnija svojstva u odnosu na izvorne komponente. Zato su spoznaje i naši rezultati o reakcijskim mehanizmima umrežavanja poliesterskih smola (UP) poticaj za istraživanje radijacijske kemije poli(etilen-oksida) (PEO) polimera važnog za priređivanje polielektrolita, nanokompozita i hidrogelova. Odnosi struktura-svojstvo kompozita izotaktni polipropilen (iPP)/talk kompatibiliziranih sa stirenskim blok kopolimerima (SEP, SBS, SEBS, SEBS-g-MA) istražuju se zbog njihove važnosti u optimizaciji svojstava plastika za automobilsku industriju. Važna su istraživanja interakcije i strukturiranja poliuretan/polimetakrilat (PUR/PM) kao SIPN mješavina, te alternirajućih akrilnih kopolimera s utisnutim (imprint) makromolekulama. Istražuje se utjecaj površinski aktivnih tvari na supramolekulsko strukturiranje biopolimera. Razvijaju se nove metode ispitivanja polimernih uzoraka za rješavanje specifičnih problema vanjskih naručilaca.

Program rada obuhvaća sintezu i karakterizaciju novih intermetalnih spojeva i metalnih kompleksa, s ciljem dobivanja novih materijala, koji se mogu primijeniti u energetici i katalizi. U tu svrhu priređeni su novi intermetalni spojevi općeg sastava $\text{RENi}_3.5\text{Al}_{1.5}$ (RE = Y, Tb, Dy, i Ho). Interakcija s vodikom pokazala je da kapacitet apsorbiranog vodika pod tlakom od 1,5 MPa ovisi o vrsti atoma rijetke zemlje i iznosi 3,8; 2,8; 3,9; 2,4 vodikova atoma za Tb, Dy, Ho, odnosno Y.

Istraživanja koja se tijekom 2005. godine odvijaju u okviru projekta "Supravodljivi oksidi i višenuklearni metalni kompleksi" većim se dijelom odnose na heksanuklearne klasterne niobija i

tantala. Razrađuju se postupci pripreme mješovito halogenidnih klastera $[\text{M}_6\text{X}_{(12-y)}\text{X}'_y]^{n+}$ (M = Nb, Ta) u kojima se na položajima unutarnjih prenosnih liganada izmjenjuju različiti halogeni elementi (X, X'). Ovakvi su spojevi posebno značajni jer pružaju mogućnost promjene (nano)strukturnih i fizičko-kemijskih svojstava klastera i pridonose novim saznanjima o prirodi veze metal-metal. Razmatraju se strukturna, elektronska i magnetska svojstva paramagnetskih klastera tantala koji u jedinki $[\text{Ta}_6\text{Cl}_{12}]^{3+}$ sadrže jedan nesporeni elektron smješten u najvišoj zaposjednutoj molekularnoj orbitali (HOMO), a opisan je i spoj koji u svom sastavu sadrži istovremeno klusterske jedinice različitih nabojnih brojeva, $[\text{Ta}_6\text{Cl}_{12}]^{3+}$ i $[\text{Ta}_6\text{Cl}_{12}]^{4+}$. U okviru istraživanja oksalatnih sustava prijelaznih metala otkriven je jedan novi strukturni oblik među tris(oksalato)oksoniobatima(V), koji služi kao polazna građevna jedinka pri dobivanju složenijih anorgansko-organskih sustava.

Istraživani su mehanizmi ugradnje izabranih dopanada u strukturu mulita te metalnih oksida In_2O_3 i SnO_2 s ciljem boljeg razumijevanja utjecaja dopanada na svojstva materijala. Za to je korištena rendgenska difrakcija i računaska Rietveldova metoda koja omogućuje određivanje kristalne strukture iz polikristalnih uzoraka. Izvršeno je ispitivanje ugradnje kobalta u mulit, koje je pokazalo da se u mulit može ugraditi tek oko 0.36 tež. % Co. Ustanovljeno je da u procesu dopiranja indijevog oksida kositrom supstitucijska zamjena iona In^{3+} ionima Sn^{4+} na pozicijama B i D polazne strukture In_2O_3 nije uniformna, te da termički tretman dopiranih uzoraka inducira dodatne neuniformne strukturne efekte. Istraživanja mehanizma dopiranja SnO_2 antimonom dovelo je do razvoja nove metode za određivanje omjera udjela iona antimona $\text{Sb}^{3+}/\text{Sb}^{5+}$ u dopiranim uzorcima.

Istraživanje u 2005. godini dovelo je do uspostavljanja standardnih vrijednosti hematoloških i biokemijskih parametara za nekoliko vrsta riba (*Oncorhynchus kisutch*, *Dicentrarchus labrax*, *Mugill* spp., *Thunnus thynnus*) te njihovih promjena s obzirom na neke abiotičke čimbenike. Usporedbom uzgajanih i divljih populacija brancina u Jadranskom moru dokazano je da uzgojni

uvjeti utječu na modifikacije biokemijskih parametara krvi, smanjivanjem otpornosti organizama i povećanjem njihove prijemljivosti na bakterijske, virusne i nametničke bolesti. Rezultati ukazuju na značajne razlike biokemijskih i histoloških profila slobodnoživućih i uzgajanih populacija brancina. Mjerenjem indukcije P-450 enzimatskog sustava riba antibioticima i kemoterapeuticima dobivaju se nova saznanja o interakciji i farmakokinetici tih lijekova.

Research programme:

Influence of the concentrations of silicon and aluminium in the liquid phase of crystallizing system on the growth kinetics of zeolites A and X, possibility of the synthesis of magnesium-aluminosilicate ceramic (forsterite) of high purity by using ammonium form of zeolite A and magnesium oxide as the starting reaction components as well as crystallization of eucryptite by heating of zeolite LiA(BW), lithium form of zeolite A and amorphous aluminosilicate precursor (gel) in which the original sodium ions were exchanged by lithium ions, were investigated. Results of investigation have shown that the type of the crystallized zeolite (A and/or X) and the crystal growth rate do not depend on chemical and structural properties of the solid phase (amorphous aluminosilicate precursor), but exclusively on chemical composition and "structure" (determined by distribution of different aluminate, silicate and aluminosilicate anions) of the liquid phase of crystallizing system. Magnesium-aluminosilicate ceramic (forsterite) of high purity and with high yield can be obtained by a combined treatment (high-energy milling + heating above 900 °C) of the mixture of powdered zeolite A in which the original sodium ions were exchanged with ammonium ions and powdered magnesium oxide. The phase analyzes during heating of lithium form of zeolite A (Li-LTA) at different heating rates have shown that the process of the high-temperature transformation of Li-LTA takes place by formation of short-range ordered aluminosilicate units and their diffusion-controlled agglomeration into X-ray amorphous aggregates followed by homogeneous nucleation of β -eucryptite in the formed amorphous phase and by a diffusion-controlled one-dimensional growth of nuclei (crystals).

The investigations of precipitation kinetics in model systems of magnesium ammonium phosphates at the conditions similar to physiological will be performed. Particular attention will be paid on investigation of experimental conditions governing the formation of thermodynamically metastable phases and the mechanism of their subsequent transformation into stable modifications. In addition, the precipitation of calcium carbonate under the bench scale conditions will be performed in order to investigate the experimental conditions at which precipitate of high specific surface area could be prepared.

In the study of the relationship between the chemical synthesis and the properties of the model oxide systems were selected taking in mind their possible use in advanced technologies. The experimental conditions in the synthesis of nanosize ZnO particles were found using sol-gel method. The same synthesis method was utilized to obtain phase pure Ga₂O₃ or GaOOH. Microstructural and chemical properties of the systems ZrO₂-Cr_{1.5}, HfO₂-Al₂O₃ and ZrO₂-Al₂O₃ were investigated with the emphasize on the formation of solid solutions. A comparative study of the hydrothermal crystallization of HfO₂ and ZrO₂ from amorphous precursors was performed. The mechanism of the precipitation of iron oxides in highly alkaline media and in the presence of nickel cations was proposed. The experimental conditions for the precipitation of bismuth vanadate. The dependence of the colour of this yellow pigment on the particle size has been shown.

Physical-chemical effects of ionizing radiations which will be studied are the formation and properties of radiation-induced short lived reactive species formed in radiolysis. Quantitative relationships between radiation absorbed dose and physical, chemical and biological effects will be studied to develop radiation dosimetry. The research of radiation effects in materials used as foods, medical supplies, pharmaceuticals etc. will be carried out to develop new applications of radiations.

Polymer materials modified by additives (polymer blends and composites) and radiation replace basic polymers since they are cheaper and offer better properties compared to that of origin components. Therefore, the attained knowledge and our previous results about reaction mechanisms of crosslinking unsaturated polyester resins (UP) inspired research on radiation chemistry of poly(ethylene oxide) (PEO), a polymer that is often used as a base for

polyelectrolytes, nanocomposites and hydrogels. The investigation of structure-property relationships of isotactic polypropylene (iPP)/talc composites compatibilized with styrenic rubber block copolymers (SEP, SBS, SEBS, SEBS-g-MA) is of importance for properties optimization of plastics used in automotive industry. The interactivity and structure investigations of SIPN polyurethane/polymetacrylate (PUR/PM) blends as well as alternating acrylic copolymers with imprint macromolecules is very important. The effect of surfactants onto supramolecular ordering is investigated. The development of new investigation methods of polymer materials for solution specific problems of small and medium enterprises.

The research program includes synthesis and characterisation of new intermetallic compounds with the aim to select new materials for use in energetics and catalysis. Therefore new intermetallic compounds of the general composition $RENi_{3,5}Al_{1,5}$ ($RE = Y, Tb, Dy, \text{ and } Ho$) were prepared. Hydrogenation under pressure of 1.5 Mpa, shows that the maximum hydrogen capacity varies with the rare earth atom from 3.8, 2.8, 3.9 to 2.4 for Tb, Dy, Ho and Y, respectively.

Investigations performed during the year 2005, under the project "Superconducting oxides and polynuclear metal complexes", relate mainly to the hexanuclear clusters of niobium and tantalum.

Procedures for the synthesis of mixed-halide $[M_6X_{(12-y)}X'_y]^{n+}$ ($M = Nb, Ta$) clusters, wherein the inside (bridging) ligands positions are occupied by different halogen atoms (X, X') are being developed. Compounds of this type are very important as they enable changes of (nano)structural and physico-chemical properties of the clusters and contribute to the overall knowledge on the nature of metal-metal bond. Structural, electronic and magnetic properties of paramagnetic tantalum clusters, with the $[Ta_6Cl_{12}]^{3+}$ unit containing one unpaired electron in the highest occupied molecular orbital (HOMO), have been investigated, and also a compound with differently charged $[Ta_6Cl_{12}]^{3+}$ and $[Ta_6Cl_{12}]^{4+}$ cluster entities, has been described. Within the investigation of transition-metal oxalate systems a new structural form of the tris(oxalato)oxoniobates(V), has been obtained. The compound serves as one of the starting building blocks in the synthesis of more complex inorganic-organic species.

The mechanisms of incorporation of selected dopands into the structure of mullite and of metal oxides In_2O_3 and SnO_2 have been investigated. This will be a support to better understanding of the influence of dopands on materials properties. X-ray diffraction and mathematical Rietveld method were applied for determination of the crystal structure of the prepared polycrystalline materials. Investigation of mullite doping with cobalt showed that only about 0.36 wt.% Co can be incorporated into the mullite structure. Structural studies of tin doped In_2O_3 revealed that Sn^{4+} substitution for In^{3+} on B and D sites of the original In_2O_3 structure was non-uniform; thermal treatment of the doped samples induced additional non-uniform structural affects. The study of SnO_2 doping with antimony led to a development of a new method for the estimation of the content ratio Sb^{3+}/Sb^{5+} of antimony ions in the Sb-doped samples.

Research in year 2005 revealed standard values of haematological and biochemical parameters for several fish species (*Oncorhynchus kisutch*, *Dicentrarchus labrax*, *Mugill spp.*, *Thunnus thynnus*) and their alterations regarding some abiotic factors have been established. Comparison of the farmed and wild sea bream populations in the Adriatic Sea proved that the farming environment impacts the modification of biochemical blood parameters, decreasing the resistance of the organisms and increasing their susceptibility on bacterial, viral and parasitic diseases. Results demonstrated significant differences in biochemical and histological profiles of the free-living and farmed sea bass. The use of antibiotics and chemotherapeutics to measure the P-450 induction of the enzymatic system of fish provided new insights into the interaction and pharmacokinetics of these medicines.

Znanstvenoistraživački projekti MZOŠ-a i njihovi voditelji

- 0098060 ISTRAŽIVANJE PROCESA KRISTALIZACIJE I PRIMJENE ZEOLITA, Boris Subotić
0098061 PROCESI I INTERAKCIJE U HETEROGENIM SUSTAVIMA ČVRSTO/TEKUĆE, Damir Kralj
0098062 SINTEZA I MIKROSTRUKTURA METALNIH OKSIDA I OKSIDNIH STAKALA, Svetozar Musić
0098063 FIZIČKO - KEMIJSKI UČINCI IONIZIRAJUĆIH ZRAČENJA, Dušan Ražem
0098064 SINTEZA, KARAKTERIZACIJA I MODIFICIRANJE POLIMERA ZRAČENJEM, Franjo Ranogajec
0098065 INTERMETALNI SPOJEVI I METALNI HIDRIDI, Želimir Blažina
0098066 SUPRAVODLJIVI OKSIDI I VIŠENUKLEARNI METALNI KOMPLEKSI, Nevenka Brničević
0098067 UTJECAJ DOPANADA NA STRUKTURU I SVOJSTVA MATERIJALA ZA TEHNIČKE PRIMJENE, Biserka Gržeta
0098129 BIOKEMIJSKA I MOLEKULARNA REAKCIJA RIBA NA STANJE EKOSUSTAVA, Rozelindra Čož-Rakovac
-

Oznaka: 0098060

**ISTRAŽIVANJE PROCESA KRISTALIZACIJE I PRIMJENE ZEOLITA
RESEARCH OF THE CRYSTALLIZATION PROCESS AND USE OF
ZEOLITES**

Voditelj projekta: dr. sc. Boris Subotić
Tel. ++385 1 4680 123 e-mail: subotic@irb.hr

Suradnici

Tatjana Antonić Jelić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Biserka Bišup, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, u zvanju znanstvene suradnice od 16.11.2005.

Sanja Bosnar, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, u zvanju znanstvene suradnice od 16.11.2005.

Josip Bronić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Cleo Kosanović, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica od 30.6.2005.

Ivan Krznarić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Ana Mužic, dipl. ing. kemije, znanstvena novakinja u suradničkom zvanju asistentice

Boris Subotić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Tehnički suradnici

Višnja Dekanić, peračica

Program rada i rezultati na projektu:

Program rada:

Postoje mnogobrojni eksperimentalni dokazi da brzina rasta kristala zeolita, R_g , ovisi o koncentracijama aluminijske i silicijske u tekućoj fazi kristalizacijskog sustava. Na temelju poznavanja utjecaja različitih čimbenika na vrijednost R_g , vrlo je vjerojatno da na vrijednost R_g ne utječu samo kinetičke energije reaktivnih aluminatnih, silikatnih i alumosilikatnih aniona, već također i njihove raspodjele s obzirom na veličinu, naboj i strukturu. Budući da ove raspodjele ovise o koncentracijama aluminijske i silicijske u tekućoj fazi i lužnatosti sustava, može se pretpostaviti da brzina rasta kristala ovisi o koncentracijama aluminijske i silicijske na složen način. Na temelju iznijetih činjenica i pretpostavki, u proteklom periodu istraživana je utjecaj koncentracija aluminijske i silicijske u širokom području omjera Si/Al (od Si/Al < 1; suvišak aluminijske do Si/Al > 1; suvišak silicijske) u tekućoj fazi kristalizacijskog sustava na kinetiku rasta kristala zeolita A i X.

Zbog "otvorenosti" kristalne strukture, zeoliti su metastabilni materijali koji se mehaničkim (visokoenergijsko mljevenje) i/ili toplinskim postupcima mogu prevesti u amorfne i/ili kristalne alumosilikatne materijale. S obzirom na to da mnogi sintetski zeoliti imaju kemijski sastav blizak kemijskom sastavu alumosilikatnih keramika, njihova toplinska obrada može rezultirati nastajanjem odgovarajućih keramičkih materijala. Na taj način, toplinska (ili kombinirana toplinska i mehanička) obrada zeolita predstavlja novi način dobivanja različitih alumosilikatnih keramičkih materijala (eukriptit, karnegieit, nefelin, kaliofilit, kalsilit, polucit, leucit, anortit, kordierit, celzian, mulit, itd.). Tip nastale keramike ovisi o kemijskom sastavu zeolitnog prekursora i (prvenstveno) o tipu kompenzacijskog kationa. Budući da je prvi stupanj toplinske pretvorbe nastajanje amorfne alumosilikatne faze nakon čega slijede nukleacija i rast sekundarne kristalne faze (keramike) iz prethodno nastale amorfne faze, može se pretpostaviti da bi se alumosilikatne keramike mogle dobiti i termičkom obradom amorfne faze dobivenih mehanokemijskom amorfizacijom zeolita ili taložnih amorfne alumosilikata u kojima su originalni natrijevi ioni zamijenjeni drugim kationima. Na temelju navedenih saznanja i pretpostavki, u proteklom periodu istraživane su mogućnosti sinteze magnezijeve alumosilikatne keramike (forsterit) kombiniranim postupkom (visokoenergijsko mljevenje + grijanje) te kristalizacije (uključujući kinetiku procesa) eukriptita grijanjem zeolita LiA(BW), litijeve forme zeolita A i amorfne alumosilikatnog prekursora (gela) u kojem su originalni natrijevi ioni bili zamijenjeni litijevim ionima.

Rezultati:

Kinematika rasta kristala zeolita A i X mjerene su tijekom njihovih kristalizacija na 80°C iz amorfne alumosilikatnog prekursora (gela sastava: $1,03 \text{ Na}_2\text{O}:\text{Al}_2\text{O}_3:2,38 \text{ SiO}_2 \cdot 1,66 \text{ H}_2\text{O}$) dobivenog izdvajanjem iz alumosilikatnog hidrogela ($1,03 \text{ Na}_2\text{O}:\text{Al}_2\text{O}_3:2,38 \text{ SiO}_2 \cdot 1,66 \text{ H}_2\text{O}$) i dispergirano u 1,4 M otopini NaOH (sustav 0) koja je sadržavala $0,046 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaAlO}_2$ (sustav A1); $0,092 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaAlO}_2$ (sustav A2); $0,136 \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaAlO}_2$ (sustav A3); $0,034 \text{ mol dm}^{-3} \text{ Na}_2\text{SiO}_3$ (sustav S1); $0,068 \text{ mol dm}^{-3} \text{ Na}_2\text{SiO}_3$ (sustav S2) i $0,102 \text{ mol dm}^{-3} \text{ Na}_2\text{SiO}_3$ (sustav S3). Dok iz sustava 0, A1, A2, A3 i S1 nastaje (kristalizira) samo zeolit A, u sustavu S2 nastaje smjesa zeolita A i X, a u sustavu S3 nastaje čisti zeolit X. Brzina rasta kristala, R_g , zeolita A je gotovo ista u sustavima 0 i A1 i postupno se smanjuje u nizu:

$R_g(0) \approx R_g(A1) > R_g(A2) > R_g(A3) > R_g(S1)$. Brzina rasta kristala zeolita X smanjuje se s povećanjem koncentracije Na_2SiO_3 , tj. u nizu: $R_g(S1) > R_g(S2) > R_g(S3)$. Interesantno je da je raspodjela veličina kristala u svim produktima kristalizacije gotovo ista, tj. raspodjela veličina kristala u produktima kristalizacije ne ovisi o uvjetima kristalizacije, odnosno o brzinama nukleacije, rasta kristala i (ukupne) kristalizacije, kao niti o tipu nastalog (kristaliziranog) zeolita. Ovisnost tipa zeolita o koncentracijama aluminatnih i/ili silikatnih aniona u tekućoj fazi kristalizacijskog sustava (određenih dodavanjem NaAlO_2 i/ili Na_2SiO_3) pokazuje da tip kristaliziranog zeolita ne ovisi o kemijskim i „strukturnim“ svojstvima čvrste faze (amorfne alumosilikatnog prekursora) već

isključivo o kemijskom sastavu i „strukтури“ (određenoj raspodjelom različitih aluminatnih, silikatnih i alumosilikatnih aniona) tekuće faze kristalizacijskog sustava. Analiza eksperimentalnih rezultata (promjene koncentracija aluminija i silicija u tekućoj fazi kao i promjene dimenzija najvećih kristala zeolita A i X tijekom kristalizacije) je pokazala da je brzina rasta kristala zeolita A i X neovisna o veličini kristala i da se rast kristala odvija reakcijom monomernih i niskomolekulskih aluminatnih, silikatnih i alumosilikatnih aniona iz tekuće faze na površini rastućih kristala zeolita. Konačno, neovisnost raspodjele veličina kristala u produktima kristalizacije o uvjetima kristalizacije određenim kemijskim sastavom tekuće faze kristalizacijskog sustava je u skladu s principima „učinka pamćenja gela“, tj. da raspodjela veličina kristala u produktima kristalizacije ovisi isključivo o broju i raspodjeli nukleusa u matrici gela. Budući da su broj i raspodjela nukleusa u matrici gela konstantni za dani prekursor i da se ne mijenjaju s uvjetima kristalizacije, konstantnost raspodjele veličine kristala u svim produktima kristalizacije je bila očekivana.

Kombiniranom obradom smjese praškastog zeolita A u kojem su originalni natrijevi ioni zamijenjeni s amonijevim ionima i praškastog magnezijeva oksida, može se dobiti forsterit kao produkt. Postupak pripreme forsterita provodi se u dva stupnja: (i) visokoenergijsko mljevenje u kugličnom mlinu i (ii) zagrijavanje pri određenoj temperaturi. Mljevenje u kugličnom mlinu uzrokuje amorfizaciju amonijeve forme zeolita (pri čemu se dio amonijevih iona transformira u plinoviti amonijak i desorbira iz čvrste faze tijekom mljevenja), smanjenje veličina čestica magnezijeva oksida i miješanje na taj način kemijski „aktiviranih“ komponenti. Toplinska obrada (zagrijavanje)

tako pripremljene smjese (3 sata iznad 900 °C) dovodi do nastajanja forsterita kao dominantne kristalne keramičke faze uz pojavu neznatne količine nusprodukata. Visoki prinos i čistoća produkta (forsterita) omogućeni su zamjenom originalnih natrijevih iona iz zeolita A s amonijevim ionima i njihovim raspadom tijekom mljevenja i zagrijavanja reakcijskih komponenti. Na taj način odvija se izravna reakcija aktiviranih komponenti (amorfno alumosilikata bez sadržaja natrijevih iona i usitnjenog magnezijeva oksida) u forsterit bez mogućnosti nastajanja natrijevih alumosilikatnih keramika (karnegit, nefelin).

Litijeva forma zeolita A (Li-LTA) je pripravljena zamjenom originalnih natrijevih iona iz zeolita A s litijevim ionima iz otopine. Tako pripremljen Li-LTA je linearno zagrijavan od 30 – 1000 °C s brzinama zagrijavanja od 0,0417 °/s; 0,1667 °/s i 0,333 °/s. Termalne transformacije tijekom zagrijavanja su praćene «in situ» sinkrotronskom rendgenskom difrakcijom praha. Pri svim brzinama zagrijavanja, najveći dio Li-LTA se transformira u amorfnu alumosilikatnu fazu do 820 °C, a pri temperaturi od oko 790 °C počinje kristalizacija β-eukriptita iz nastale amorfne faze. Redovi reakcija, $n = 3/2$ za amorfizaciju Li-LTA i $n = 1/2$ za kristalizaciju β-eukriptita, pokazuju da se u skladu s Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami-Evansovom (KJMAE) jednačbom, amorfizacija Li-LTA odvija nastajanjem alumosilikatnih jedinica s kratkim dometom reda i njihovom difuzijski kontroliranom aglomeracijom u rendgenski amorfne aglomerate te da se kristalizacija β-eukriptita odvija homogenom nukleacijom u amorfnoj fazi i difuzijski kontroliranim jednodimenzionalnim rastom nukleusa (kristala).

Research programme and results:

Working plan:

There is abundant experimental evidence that the rate, R_g , of crystal growth of zeolites depends on the concentrations of both aluminium and silicon in the liquid phase of the crystallizing system. Based on the influence of various factors on the value of R_g , it is beyond dispute that the value of R_g is influenced not only by the kinetic energies of the reactive aluminate, silicate and/or aluminosilicate anions, but also by their distributions with respect to size, charge and structure. Since these distributions depend on the concentrations of silicon and aluminium in the liquid phase and on the alkalinity of system, the rate of crystal growth depends on the concentrations of aluminum and silicon in the liquid phase by a complex way. Based on these facts the influence of concentrations of aluminum and silicon in the wide range of the Si/Al molar ratios (from Si/Al < 1; excess of Al to Si/Al > 1; excess of Si) in the liquid phase of the crystallizing system on the kinetics of the crystal growth of zeolites A and X were investigated in the recent period.

Due to their open framework, zeolites are metastable materials, which can be transformed to non-zeolite crystalline and/or amorphous materials by mechanical (high-energy milling) and/or thermal treatments. Since many of synthetic zeolites have composition close to those of aluminosilicate-based ceramics, their thermal treatment may result in the formation of appropriate ceramic materials. In this way the thermal (or combined thermal and mechanical) treatment of zeolites represent a new approach to obtain different aluminosilicate ceramic materials (eucryptite, carnegieite, nepheline, kaliophilite, kalsilite, pollucite, leucite, anorhtite, cordierite, celcian, mullite, etc.). Type of the obtained ceramic depends on the chemical composition of zeolite precursor and (mainly) on the type of compensating cation. Since the first step of thermal transformation is formation of an amorphous aluminosilicate phase followed by nucleation and crystal growth of the secondary crystalline phase (ceramic) from the previously formed amorphous phase, one can assume that aluminosilicate ceramics should be obtained by thermal treatment of the amorphous phases formed by mechanochemical amorphization of zeolites or precipitated amorphous aluminosilicates in which the original (host) sodium ions has been exchanged by other cations. Based on the mentioned knowledge and assumptions, possibilities for the synthesis of magnesium-aluminosilicate based ceramic (forsterite) by a combined procedure (high-energy ball-milling + heating) as well as crystallization of eucryptite (including kinetics of the process) by heating zeolite LiA(BW), lithium form of zeolite A and amorphous aluminosilicate precursor (gel) in which the original sodium ions has been exchanged by lithium ions, were investigated in the recent period.

Results:

Kinetics of crystal growth of of zeolites A and X were measured during their crystallization at 80^o C from the amorphous aluminosilicate precursor (1.03Na₂O:Al₂O₃:2.38SiO₂·1.66H₂O) prepared by separation of the solid phase from hydrogel having the batch molar chemical composition 1.03Na₂O:Al₂O₃:2.38SiO₂·1.66H₂O, and then dispersed in 1.4 M NaOH solution (system 0) containing 0.046 mol dm⁻³ NaAlO₂ (system A1), 0.092 mol dm⁻³ NaAlO₂ (system A2), 0.136 mol dm⁻³ NaAlO₂ (system A3), 0.034 mol dm⁻³ Na₂SiO₃ (system S1), 0.068 mol dm⁻³ Na₂SiO₃ (system S2), and 0.102 mol dm⁻³ Na₂SiO₃ (system S3). Only zeolite A crystallizes from the systems 0, A1, A2, A3 and S1, a mixture of zeolites A and X crystallizes from system S2, and pure zeolite X crystallizes from system S3. Crystal growth rate, R_g, of zeolite A is almost the same in the systems 0 and A1, and gradually decreases in the sequence: R_g(0) ≈ R_g(A1) > R_g(A2) > R_g(A3) > R_g(S1). Crystal growth rate of zeolite X decreases with increasing concentration of Na₂SiO₃, i.e., in the sequence: R_g(S1) > R_g(S2) > R_g(S3). Here it is interesting that the crystal size distribution in all the crystalline end products is almost the same, i.e., the crystal size distribution in the crystalline end products does not depend on the crystallization conditions, and thus on the rates of nucleation, crystal growth and (overall) crystallization as well as on the type of obtained (crystallized) zeolite. Dependence of the type of zeolite on the concentrations of aluminate and/or silicate anions in the liquid phase of crystallizing systems (controlled by addition of NaAlO₂ and/or Na₂SiO₃) shows that the type of zeolite to be crystallized does not depend on the chemical and "structural" properties of the solid phase (amorphous aluminosilicate precursor), but exclusively on the chemical composition and "structure" (determined by distribution of different aluminate, silicate and aluminosilicate anions) of the liquid phase of crystallizing system. Analysis of experimental results (changes of the concentrations of aluminum and silicon in the liquid phase as well as the changes of the dimensions of the largest crystals of zeolites A and X during crystallization) have shown that growth rate of zeolite A crystals is size-independent and that the growth is governed by the reaction of monomeric and/or low-molecular aluminate, silicate and aluminosilicate anions from the liquid phase on the surfaces of growing zeolite crystals. Finally, independency of the crystal size distribution in the crystalline end products on the crystallization conditions determined by chemical composition of the liquid phase of crystallizing system is in accordance with the principles of "gel memory effect", namely that the crystal size distribution of the crystalline end product depends exclusively on the number and distribution of nuclei in the gel

matrix. Since the number and distribution of nuclei in the gel matrix are constants for a given precursor and not influenced by the crystallization conditions, the constancy of the crystal size distribution in the all crystalline products was expected. Using powder mixtures of ammonium-exchanged zeolite zeolite A and magnesium oxide as starting materials, forsterite ceramic was obtained as the final phase. The preparation procedure has two steps: (i) high-energy ball-milling and (ii) heating at given temperature. Ball-milling was used to amorphize ammonium-exchanged zeolite A (and simultaneous transformation of ammonium ions into gaseous ammonia and its desorption from the solid phase during milling), to reduce the particle size of magnesium oxide and to mix these two components, chemically "activated" during ball milling. Thermal treatment (heating) of the milled mixture (above 900^o C for 3 h) yielded forsterite as a dominant phase; only negligible amounts of minor phases appeared as byproducts. High yield and purity of the product are enabled by exchange of the original (host) sodium ions in zeolite A by ammonium ions and their destroying during ball-milling and heating of the reaction components. In this way, a direct reaction of the activated components (amorphous aluminosilicate without sodium ions and chopped magnesium oxide) into forsterite takes place without a possibility of formation of sodium-aluminosilicate ceramics (carnegieite, nepheline).

Lithium form of zeolite A (Li-LTA) was prepared by exchange of original (host) sodium ions from zeolite A with lithium ions from solution. Such prepared Li-LTA was linearly heated with the heating rates of 0.0417^o/s, 0.1667^o/s i 0.333^o/s. Thermal transformations during heating were followed by in situ time-resolved synchrotron X-ray powder diffraction. At all the heating rates, most of Li-LTA was transformed into amorphous aluminosilicate phase till 820^o C, and at about 790^o C crystallization of beta-eucryptite started from the amorphous phase. The kinetic orders, $n = 3/2$ for the amorphization of Li-LTA and $n = 1/2$ for crystallization of β -eucryptite indicate that in accordance with the Kolomogorov-Johnson-Mehl-Avrami-Evans (KJMAE) equation, amorphization of Li-LTA takes place by thermally-induced formation of short-range ordered aluminosilicate units and their diffusion-limited agglomeration into amorphous agglomerates, while non-isothermal crystallization of β -eucryptite takes place by homogeneous nucleation of β -eucryptite in the amorphous phase and diffusion-limited one-dimensional growth of nuclei (crystals).

Oznaka: 0098061

PROCESI I INTERAKCIJE U HETEROGENIM SUSTAVIMA ČVRSTO/TEKUĆE PROCESSES AND INTERACTIONS IN HETEROGENEOUS SOLID/LIQUID SYSTEMS

Voditelj projekta: dr. sc. Damir Kralj
Tel. ++385 1 4680 207 e-mail: kralj@irb.hr

Suradnici

Vesna Babić-Ivančić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Jasminka Kontrec, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica od 7.4.2005.

Damir Kralj, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Branka Njegić Džakula, dipl. ing. kemije, znanstvena novakinja u suradničkom zvanju asistentice

Vanjski suradnici

Ljerka Brečević, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica u mirovini

Program rada i rezultati na projektu:

Tijekom 2005. godine provedena su intenzivna istraživanja mehanizama i kinetike taloženja modelnih sustava magnezijevih amonijevih fosfata i kalcijeva karbonata. Pri tome je posebna pažnja posvećena istraživanju nastajanja i transformacije struvita ($\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) u uvjetima sličnim fiziološkim ($t = 37 \text{ }^\circ\text{C}$, $\text{pH}_i = 7.4$). Određena su koncentracijska područja reaktanata unutar kojih taloži struvit, odnosno njuberit ($\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$), a dobiveni su i eksperimentalni podaci o transformaciji struvita. Proces transformacije je proučavan praćenjem promjena u tekućoj i čvrstoj fazi sustava. Dobiveni rezultati upućuju na transformaciju putem otopine, tj. mehanizam kojim tijekom transformacije dolazi do otapanja nestabilne čvrste faze (struvit) i rasta stabilne (njuberit). Istraživanja kalcijevih karbonata rađena su u uvjetima uvećanog laboratorijskog mjerila te je tim povodom konstruiran višenamjenski kemijski reaktor (VIKER), u koji je implementirana PID regulacija, vlastita elektronika te intuitivno grafičko sučelje. Priprava taložnoga kalcijeva karbonata različitih morfoloških karakteristika omogućena je variranjem niza eksperimentalnih parametara te korištenjem tekućih, plinovitih i/ili čvrstih reaktanata.

Research programme and results:

During 2005 intensive investigations of mechanisms and kinetics of the precipitation model systems of magnesium ammonium phosphates and calcium carbonates have been performed. Particular attention was paid to the kinetics of formation and transformation of struvite ($\text{MgNH}_4\text{PO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) under conditions similar to physiological ($t = 37 \text{ }^\circ\text{C}$, $\text{pH}_i = 7.4$). Concentration domains of struvite and newberyite ($\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$) precipitation, as well as the conditions for struvite transformation were determined. The transformation process was studied by following changes in the liquid and solid phases of the system. The results indicate that struvite transformation is solution mediated process, i.e. the process in which struvite dissolution and newberyite growth take place simultaneously.

Investigations of calcium carbonate precipitation were performed under the bench scale conditions. In this connection, a multi-purpose PC controlled bench scale chemical reactor (VIKER) was constructed. The reactor was implemented with PID regulation, home-made electronics, software and intuitive graphical interface. By using VIKER, with the possibility of varying a range of experimental parameters, calcium carbonate of different morphological properties was produced by using solid, liquid and/or gas reactants.

Oznaka: 0098062

SINTEZA I MIKROSTRUKTURA METALNIH OKSIDA I OKSIDNIH STAKALA **SYNTHESIS AND MICROSTRUCTURE OF METAL OXIDES AND OXIDE GLASSES**

Voditelj projekta: dr. sc. Svetozar Musić
Tel. ++385 1 4561 094 e-mail: music@irb.hr

Suradnici

Đurđica Dragčević, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica, u zvanju više znanstvene suradnice od 16.11.2005.

Marijan Gotić, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Stjepko Krehula, dipl. ing. kemije, znanstveni novak u suradničkom zvanju asistenta

Miroslava Maljković, doktorica kem. znanosti, znanstvena novakinja u suradničkom zvanju više asistentice (do 23.12.2005.)

Svetozar Musić, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Mira Ristić, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Ivanka Salaj-Obelić, doktorica kem. znanosti, stručna suradnica

Ankica Šarić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Goran Štefanić, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik od 2.6.2005.

Tehnički suradnici

Jasmin Forić, tehničar

Program rada i rezultati na projektu:

Projekt "Sinteza i mikrostruktura metalnih oksida i oksidnih stakala" usmjeren je na dobivanje podataka o odnosu između kemijske sinteze na jednoj strani te kemijskih mikrostrukturnih i fizikalnih svojstava tih materijala na drugoj strani. Općenito, primjenom različitih metoda sinteze ili promjenom eksperimentalnih parametara moguće je mijenjati specifična svojstva metalnih oksida i oksidnih stakala. Takva znanja jako su važna pri primjeni u tehnološke svrhe. To se može iskoristiti u sintezi naprednih materijala (pigmenti, katalizatori, senzori, magneti, adsorbensi, itd.). Za studij odnosa između kemijske sinteze i svojstava metalnih oksida izabrani su modelni sustavi za koje se smatra da mogu imati primjene u naprednim tehnologijama. Određeni su uvjeti sinteze nanočestica ZnO primjenom sol-gel metode. Sol-gel metoda iskorištena je u sintezi Ga₂O₃ i GaOOH. Istraživana su mikrostrukturna i kemijska svojstva u sustavima ZrO₂-Cr_{1.5}, HfO₂-Al₂O₃ i ZrO₂-Al₂O₃ s posebnim naglaskom na uvjete nastajanja čvrstih otopina. Izveden je komparativni studij hidrotermalne kristalizacije HfO₂ i ZrO₂ iz amorfni prekursora. Predložen je mehanizam taloženja željezovih oksida u jako alkalnom mediju u prisutnosti niklovi kationa. Istraživani su uvjeti sinteze čestica bizmutovog vanadata koji se može koristiti kao pigment. Pokazana je ovisnost nijansi žute boje tog pigmenta o veličini čestica.

Research programme and results:

The project "Synthesis and microstructure of metal oxides and oxide glasses" has been focused on the relationship between the chemical synthesis on one side and chemical, microstructural and physical properties on the other side. Generally, the specific properties of metal oxides and oxide glasses can be changed by changing the method of chemical synthesis, as well as the experimental parameters. The knowledge of this subject is very important in the application. This can be used in the synthesis of advanced materials (pigments, catalysts, sensors, magnets, ferroelectrics, adsorbens etc.). In the present study of the relationship between the chemical synthesis and the properties of metal oxides the model oxide systems were selected taking in mind their possible use in advanced technologies. The experimental conditions in the synthesis of nanosize ZnO particles were found using sol-gel method. The same synthesis method was utilized to obtain phase pure Ga₂O₃ or GaOOH. Microstructural and chemical properties of the systems ZrO₂-Cr_{1.5}, HfO₂-Al₂O₃ and ZrO₂-Al₂O₃ were investigated with the emphasize on the formation of solid solutions. A comparative study of the hydrothermal crystallization of HfO₂ and ZrO₂ from

amorphous precursors was performed. The mechanism of the precipitation of iron oxides in highly alkaline media and in the presence of nickel cations was proposed. The experimental conditions for the precipitation of bismuth vanadate. The dependence of the colour of this yellow pigment on the particle size has been shown.

Oznaka: 0098063

FIZIČKO-KEMIJSKI UČINCI IONIZIRAJUĆIH ZRAČENJA PHYSICO-CHEMICAL EFFECTS OF IONIZING RADIATIONS

Voditelj projekta: dr. sc. Dušan Ražem
Tel. ++385 1 4561 154 e-mail: razem@irb.hr

Suradnici

Branka Katušin-Ražem, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica, u zvanju više znanstvene suradnice od 16.11.2005.

Željka Knežević, magistrica kem. znanosti, znanstvena novakinja u suradničkom zvanju asistentice

Branka Mihaljević, doktorica kem. znanosti, viša asistentica, u zvanju znanstvene suradnice od 16.11.2005.

Saveta Miljanić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica, u zvanju više znanstvene suradnice od 16.11.2005.

Ferencne Ranogajec, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica

Dušan Ražem, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Branko Vekić, magistar kem. znanosti, asistent

Tehnički suradnici

Milan Blažević, tehničar

Atlantis Cobalt, tehničar

Program rada i rezultati na projektu:

Program rada: Projekt je nastavak ranijih istraživanja fizičko – kemijskih učinaka ionizirajućih zračenja. Istraživat ćemo stvaranje i osobine zračenjem induciranih kratkoživećih reaktivnih čestica nastalih u radiolizi: elektrona, iona, slobodnih radikala i pobuđenih molekula. Ova istraživanja od važnosti su za razumijevanje pojava u radijacijskoj kemiji, kao i nekih biološki važnih kemijskih procesa. Također će se provoditi studije kvantitativnih odnosa između doze zračenja i fizičkih, kemijskih i bioloških učinaka zračenja u nastojanju da se razviju, poboljšaju i primjene novi dozimetrijski sustavi za rješavanje problema koji zahtijevaju mjerenje doze u širokom rasponu od mnogo redova veličine, od praćenja zračenja u okolišu do radijacijske tehnologije. Istraživanja učinaka zračenja u prirodnim i sintetskim tvarima koje služe u prehrani, medicini, farmaciji i kozmetici doprinjet će razvoju novih i poboljšanju postojećih procesa u kojima se primjenjuje zračenje.

Rezultati rada: Rad na projektu obuhvaćao je tri istraživačke cjeline: i) studij reaktivnih kratkoživećih čestica; ii) istraživanja i unapređivanje sredstava i metoda za mjerenje količine energije zračenja koja se apsorbira u ozračenoj tvari (dozimetrija); iii) istraživanja mogućih primjena zračenja.

i) Studij reaktivnih kratkoživećih čestica: U posljednje vrijeme veliko zanimanje usmjereno je na istraživanja slobodnih radikala. Slobodni radikali neizostavni su proizvodi djelovanja ionizirajućih zračenja na tvari te je za njihovu karakterizaciju bila odlučujuća mogućnost njihove lagane pripreve upravo putem ozračivanja. U nastavku naših ranijih istraživanja zračenjem inducirane peroksidacije nezasićenih masnih kiselina i oksidacije iona željeza(II) peroksil-radikalima, istraživali smo utjecaj polarnosti sredine na oksidaciju željeza(II) tert-butil hidroperoksidom u vodi, metanolu i smjesi metanol - diklormetan. Ova reakcija je radiomimetička jer, kao i zračenje, generira slobodne radikale. Oksidacijom nastalo željezo(III) kompleksirali smo ionima tiocijanata i klorida.

ii) Istraživanja i unapređivanje sredstava i metoda za mjerenje količine energije zračenja koja se apsorbira u ozračenoj tvari (dozimetrija): Svi učinci zračenja bitno ovise o količini apsorbirane energije zračenja, tj. doze. Poznavanje doze zračenja koja može biti primljena u nekim situacijama bitno je za planiranje i verifikaciju mjera zaštite od zračenja, kao i za kontrolu procesa koji se zasnivaju na namjernom ozračivanju, bilo da se radi o medicinskim (dijagnostičkim ili terapijskim) ili tehnološkim primjenama zračenja. U okviru projekta istraživali smo dozimetriju zračenja u širokom rasponu doza, od vrlo malih doza koje potječu od prirodnog zračenja u okolišu, preko doza koje su karakteristične za pojedine specijalističke medicinske preglede i radioterapiju, zatim doza koje mogu primiti osobe ozračene u radiološkim ili nuklearnim nesrećama, do vrlo velikih doza kojima se izlažu materijali u svrhu postizanja raznih tehnoloških ciljeva. Za mjerenja najnižih doza upotrebljavaju se materijali osjetljivi na zračenja u kojima se apsorbirana doza može očitati zahvaljujući pojavi termoluminescencije (TL), tj. pojavi da ozračeni materijali prilikom zagrijavanja isijavaju svjetlo čija je količina proporcionalna dozi. Istraživali smo i dozimetrijski karakterizirali različite TL materijale, posebno neke novorazvijene TL materijale i njihove odzive na zračenja različitih vrsta i energija, a koja se sreću u praksi zaštite od zračenja. Opisali smo primjene TL dozimetara za dozimetrijske karakterizacije doza koje prime pacijenti tijekom nekih specijalističkih medicinskih postupaka, čime smo unaprijedili metodologiju dozimetrije u nas. Također smo uveli i novu metodu dozimetrije koja se zasniva na pojavi sekundarne emisije svjetla nakon obasjavanja ozračenih dozimetara pobudnim svjetlom, a poznata je pod nazivom radiofotoluminescencije. Za mjerenja znatno većih doza koje mogu biti primljene u radiološkim i nuklearnim nesrećama na raspolaganju je već ranije u našem Laboratoriju razvijeni osobni kemijski akcidentalni dozimetar, kao i dozimetrija pomoću oštećenja biološkog materijala (biodozimetrija) koja je usvojena u suradnoj ustanovi, Institutu za medicinska istraživanja. Opisana je primjena kemijskog dozimetrijskog sustava za dozimetriju simuliranog nuklearnog akcidenta pomoću novorazvijenog optoelektronskog čitača te rekonstrukcija radiološkog akcidenta primjenom TL i biodozimetrije. Za dozimetriju vrlo visokih doza koje se primjenjuju za radijacijsku sanitizaciju, pasterizaciju i sterilizaciju bio je u ovom Laboratoriju ranije razvijen odgovarajući kemijski dozimetrijski sustav na osnovi klorbenzena koji je ušao u praktičnu primjenu širom svijeta te je međunarodno priznat već više od 10 godina kao standard ISO/ASTM (International Standards Organization/American Society for Testing and Materials). Ovaj standard prošao je drugu reviziju od strane ISO na pet godina a predstoji i njegovo prihvaćanje od strane International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU).

iii) Istraživanja mogućih primjena zračenja: Biocidno djelovanje ionizirajućih zračenja koristi se za dekontaminaciju raznih materijala u kojima se zahtijeva određeni stupanj mikrobiološke čistoće ili potpuna odsutnost svih oblika života, a posebno mikroorganizama, tj. sterilnost. Potreba za tim osobito je izražena u materijalima prirodnog podrijetla koji služe kao sirovine ili hrana te u materijalima i proizvodima koji se rabe u kozmetici, farmaciji i medicini. Istraživali smo fizičke i kemijske promjene koje nastaju ozračivanjem aktivne farmaceutske supstance, ketoprofena. Analizirali smo primjene ionizirajućih zračenja za radijacijsku sterilizaciju farmaceutika i kozmetičkih sredstava koje su bile opisane u literaturi posljednjih 15-ak godina.

Research programme and results:

Research programme: The project is a continuation of our earlier research of physical – chemical effects of ionizing radiations. The formation and properties of radiation-induced short lived species in radiolysis will be studied: electrons, ions, free radicals and excited molecules. These studies are important for the understanding of radiation chemical events, as well as of some biologically important chemical processes. Quantitative relationships between radiation absorbed doses and physical, chemical and biological effects will be studied to develop, improve and apply new dosimetry systems for handling problems which require the measurement of doses in a broad range of many orders of magnitude, from environmental radiation monitoring to radiation processing. The research on radiation effects in natural and/or synthetic materials used as foods, medicines, pharmaceuticals and cosmetics will contribute to the development of new processes and to the improvement of the existing ones using radiations.

Results. The work on the project consisted of three research topics: i) study of reactive short lived species; ii) research and development of ways and means suitable for the measurements of the amount of radiation energy absorbed in irradiated matter (dosimetry); iii) study of potential applications of radiations.

i) Study of reactive short lived species. Free radicals have been attracting a lot of interest recently. Free radicals are inevitable products of radiation action in irradiated matter, and the ease of their preparation by irradiation has played a decisive role in their characterization. Irradiation has been shown a suitable means to produce and study isolated free radicals in model systems and under controlled conditions. In the continuation of our earlier studies of radiation induced peroxidation of unsaturated fatty acids and oxidation of iron(II) ions by peroxy radicals, we studied the effect of the medium polarity on the oxidation of iron(II) by *tert*-butyl hydroperoxide in water, methanol and solvent mixture methanol – dichloromethane. This is a radiomimetic reaction because, like irradiation, it generates free radicals. Iron(III) ions formed by oxidation have been visualized by complexation with thiocyanate and chloride ions.

ii) Research and development of ways and means for the measurement of the amount of radiation energy absorbed in irradiated matter (dosimetry). All effects of irradiation critically depend on the amount of energy absorbed, i.e. dose. The knowledge of dose which may be absorbed in some situations is essential for the planning and verification of radiation protection measures, as well as for the control of processes based on intentional irradiation, whether for medical (diagnostic or therapeutic) or technological ends. The ways and means for the measurement of the amount of absorbed radiation energy depend on the quality and dose of radiation. We studied radiation dosimetry in a broad dose range, starting from very low doses of natural radiation background, to doses characteristic of special medical diagnostic or radiotherapy procedures, over accident doses, up to massive doses used to accomplish various technological ends in materials.

For lowest dose measurements, materials sensitive to irradiation are used, in which absorbed dose can be read out due to the effect of thermoluminescence (TL), which is an effect of light emission on heating of irradiated materials, the amount of light being proportional to the absorbed dose. We studied and characterized the responses of various TL materials, especially some newly developed ones, to radiations of various qualities and energies which are met in radiation protection practice. We described the uses of TL dosimeters for dosimetry characterization of doses to patients received during some medical procedures which enabled the improvement of the dosimetry methodology. We also introduced a new dosimetry method of radiophotoluminescence which is based on the secondary emission of light induced by illumination of irradiated dosimeters.

For the measurement of considerably larger doses which may be received in radiological and nuclear accidents, we possess a personal chemical accident dosimetry system developed in our Laboratory, as well as a dosimetry system based on the radiation damage to biological material (biodosimetry), which was developed in the Institute for Medical Research. The application of the chemical accident dosimetry system and a pertaining newly developed optoelectronic reader for dosimetry of a simulated nuclear accident, as well as the reconstruction of a radiological accident by means of TL and biodosimetry have been described.

For the dosimetry of very high doses used for radiation sanitization, pasteurization and sterilization, a corresponding chemical dosimetry system based on chlorobenzene as developed earlier in this Laboratory has entered a practical use worldwide and has been internationally

recognized for more than 10 years as an ISO/ASTM (International Standards Organization/American Society for Testing and Materials) standard. This standard has just undergone a second quinquennial revision by the ISO, its acceptance by the ICRU (International Commission on Radiation Units and Measurements) pending.

iii) Research of potential applications of radiations. Biocidal action of ionizing radiations is used for the decontamination of various materials, of which a certain level of microbiological purity or complete absence of all forms of life, particularly microbial life (sterility), is required. The need for it is especially emphasized in materials of natural origin which are used as raw materials or food, and in the materials and products used as cosmetics, pharmaceuticals and medical supplies.

We studied physical and chemical changes induced by irradiation of an active pharmaceutical ingredient, ketoprofen. We analyzed literature sources on radiation sterilization of pharmaceuticals and cosmetics over the past 15 years.

Oznaka: 0098064

SINTEZA, KARAKTERIZACIJA I MODIFICIRANJE POLIMERA ZRAČENJEM SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND MODIFICATION OF POLYMERS BY IONIZING RADIATION

Voditelj projekta: dr. sc. Franjo Ranogajec
Tel. ++385 1 4561 070 e-mail: frano@rudjer.irb.hr

Suradnici

Tanja Jurkin, dipl. ing. kemije, znanstvena novakinja u suradničkom zvanju asistentice

Irina Pucić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica

Anđela Pustak, dipl. ing. kemije, znanstvena novakinja u suradničkom zvanju asistentice

Ivan Šmit, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik, u zvanju znanstvenog savjetnika od 16.11.2005.

Tehnički suradnici

Branko Štefulj, tehničar

Silvano Štoković, tehničar

Vanjski suradnici

Dragutin Fleš, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik u mirovini; akademik

Želimir Jelčić, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik, PLIVA d.d., Zagreb

Gregor Radonjič, doktor kem. znanosti, docent, Ekonomsko-poslovna fakulteta, Maribor, Slovenija

Franjo Ranogajec, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik u mirovini

Goran Ungar, doktor kem. znanosti, Department of Engineering Materials, University of Sheffield, Velika Britanija

Program rada i rezultati na projektu:

Istražuju se (i) reakcijski mehanizmi umrežavanja, degradacije te stabilizacije dodacima i radijacijskim cijepjenjem poliesterskih smola i plastomera; (ii) utjecaj modifikatora, uvjeta kompatibilizacije i zračenja na odnos struktura-svojstvo polimernih mješavina i (nano)kompozita s ciljem optimizacije uporabnih svojstava; (iii) kompatibilizacijski efekti blok-, cijepjenih i nanokarakteristike alternirajućih kopolimera; (iv) polielektroliti. Razvijaju se nove metode ispitivanja polimernih uzoraka za rješavanje specifičnih problema vanjskih naručilaca.

Naša prethodna saznanja o radijacijskim reakcijama polimera potaknula su istraživanje koje je pokazalo značajan utjecaj strukture poliestera na radijacijsko i postradijacijsko umrežavanje smole te različitu osjetljivost eksperimentalnih metoda prema tim promjenama. Ista saznanja poticaj su za istraživanje radijacijske kemije poli(etilen-oksida), PEO, polimera važnog za priređivanje polielektrolita, nanokompozita i hidrogelova. Specifična tehnika radijacijske analize, Particle Induced X-ray Spectroscopy (PIXE), primjenjena je za identifikaciju i određivanje koncentracije molibdatnog isparljivog inhibitora korozije (VCI) u antikorozijskim polietilenskim filmovima

Odnosi struktura-svojstvo kompatibiliziranih kompozita izotaktni polipropilen (iPP)/talk istraživani su zbog njihove važnosti u optimizaciji vrhunskih svojstava plastika za automobilsku industriju. Stupanj ovijenosti čestica talka (tzv. core-shell efekt) i neka mehanička svojstva kao mjere za kompatibilizacijsku djelotvornost različitih blok kopolimera stirena padaju u nizu SEBS-g-MA > SEBS > SBS > SEP. Istraživanje strukturiranja poliuretan/polimetakrilat (PUR/PM) mješavina pokazalo je da međudjelovanje PUR i PM lanaca razara sferulite i kristalnu uređenost PUR domena poliuretana. Utvrđene su mezostrukturne razlike između alternirajućih akrilnih kopolimera i njihovih umreženih nanoporoznih proizvoda s utisnutim (imprint) makromolekulama. U okviru studija polimernih površinski aktivnih tvari istraživani su utjecaj svojstava biopolimera (polisaharidi) i površinski aktivnih tvari kao i njihovih interakcija na strukturiranje supramolekulskih sustava u vodenim otopinama.

Research programme and results:

Investigations of (i) reaction mechanisms of crosslinking, degradation and stabilization with additives and radiation grafting of unsaturated polyester resins and plastomers (ii) the effect of modifiers, compatibilization conditions and irradiation on structure-properties relationship of polymer blends and (nano)composites with aim of end-use properties optimisation, (iii) compatibilization effects of block-, graft copolymers and nanocharacteristics of alternating copolymers, (iv) polyelectrolites. The development of new investigation methods of polymer materials for solution specific problems of small and medium enterprises.

Our previous findings on radiation reactions of polymers motivated the research on radiation and post-irradiation crosslinking that showed significant influence of polyester structure and differences in sensitivity of various experimental methods to it. The same findings inspired research on radiation chemistry of poly(ethylene oxide), PEO, a polymer that is often used as a base for polyelectrolytes, nanocomposites and hydrogels. A specific radiation analysis technique, Particle Induced X-ray Spectroscopy (PIXE), was applied to identify and assess the concentration of molybdate based vapour-phase corrosion inhibitor in anticorrosion polyethylene films.

The structure-property relationships of compatibilized isotactic polypropylene (iPP)/talc composites investigation is of importance for properties optimization of superior plastics used in automotive industry. The encapsulation extent of talc particles (core-shell effect) and some mechanical properties as a measure for the compatibilization effect of different styrene block copolymers decrease in the series SEBS-g-MA > SEBS > SBS > SEP. The structure investigation of polyurethane/polymetacrylate (PUR/PM) blends has shown that the interactivity between PUR and PM chains destroyed the spherulites and crystalline order of polyurethane domains. Mesosstructural differences between alternating copolymers and their crosslinked nanoporous products with imprint macromolecules was determined. Investigation of biopolymer/surfactant systems revealed increased ordering of anionic biopolymer matrices with cationic surfactant addition. Ordered

supramolecular structures resulted from the electrostatic interactions between oppositely charged groups and hydrophobic interactions between the surfactant alkyl chains.

Oznaka: 0098065

INTERMETALNI SPOJEVI I METALNI HIDRIDI INTERMETALLIC COMPOUNDS AND METAL HYDRIDES

Voditelj projekta: dr. sc. Želimir Blažina
Tel. ++385 1 4561084 e-mail: blazina@ir.hr

Suradnici

Želimir Blažina, doktor kem. znanosti, znanstveni savjetnik

Antun Drašner, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Goran Miletić, magistar kem. znanosti, znanstveni novak u suradničkom zvanju asistenta

Matija Paljević, doktor kem. znanosti, viši znanstveni suradnik

Božica Šorgić, doktorica kem. znanosti, znanstvena suradnica (do 7.6.2005.)

Rudolf Trojko, doktor kem. znanosti, znanstveni suradnik

Tehnički suradnici

Tomislav Žic, tehničar (do 30.12.2005.)

Vanjski suradnici

Mihajlo Firak, doktor tehničkih znanosti, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Sveučilište u Zagrebu (konzultant)

Program rada i rezultati na projektu:

Program rada obuhvaća sintezu i karakterizaciju novih intermetalnih spojeva i metalnih kompleksa, s ciljem dobivanja novih materijala, koji se mogu primijeniti u energetici i katalizi. Osnovne eksperimentalne metode istraživanja jesu rendgenska strukturna analiza metodom praha, neutronska difrakcija, metalografija, magnetometrija, tenzimetrija i termičke metode analize (termogravimetrijska analiza, TGA, diferencijalna termička analiza, DTA, diferencijalna pretražna kalorimetrija, DSC). U teorijskom dijelu istraživanja za računanje elektronske strukture intermetalnih spojeva, korištena je računaska metoda TB-LMTO "tight-binding version of the linear muffin-tin orbital method".

Priređeni su novi intermetalni spojevi općeg sastava RE Ni_{3.5}Al_{1.5} (RE = Y, Tb, Dy i Ho) pri čemu RE znači "rijetke zemlje" i nađeno je da kristaliziraju u heksagonskom CaCu₅ strukturnom tipu (P6/mmm). Hidriranje pod tlakom od 1,5MPa pokazala su da kapacitet apsorbiranog vodika ovisi o vrsti atoma rijetke zemlje i iznosi 3,8; 2,8; 3,9; 2,4 za Tb, Dy, Ho, odnosno Y. Analiza neutronograma pokazuje da Al atomi zamjenjuju Ni atome isključivo na kristalografskim položajima 3(c). Širenje parametara kristalne rešetke ovisi i o veličini atoma rijetke zemlje i o količini aluminija.

Mjerenje magnetizacije spoja $TbNi_{3.5}Al_{1.5}$ pokazuje jak feromagnetski doprinos elementa rijetke zemlje (terbij). Sprega izmjene s niklom ostaje relativno mala, s odgovarajućom Curievom temperaturom T_c između 10 i 15 K. $TbNi_{3.5}Al_{1.5}$ hidrid pokazuje pojačanu magnetsku izmjenu s $T_c=105$ K, što ukazuje da su momenti nikla magnetski polarizirani suprotno momentima terbjia.

Rađena su i istraživanja termičkih svojstava molekulskih i ionskih platinskih (II) kompleksa s dietil- i monoetil-esterima 2-kinolilmetilfosfonične kiseline i klora i broma, uz pomoć TG-DTA tehnike. Opažene su velike razlike u termičkom ponašanju različitih tipova kompleksa, posebno između molekulskih i ionskih kompleksa, pri čemu su općenito molekulski kompleksi znatno stabilniji.

Research programme and results:

The research program includes synthesis and characterisation of new intermetallic compounds and metal complexes with the aim to select new materials for use in energetics and catalysis. The basic methods of investigations are x-ray powder diffraction, neutron diffraction, metallography, magnetometry, pressure composition isotherm measurements and thermal methods of analysis (thermogravimetric analysis, TGA, differential thermal analysis, DTA, differential scanning calorimetry, DSC, etc.). In the theoretical part of investigation for electronic structure calculations of intermetallic compounds the TB-LMTO (tight-binding version of the linear muffin-tin orbital) method was used.

New intermetallic compounds of the general composition $RE Ni_{3.5}Al_{1.5}$ ($RE = Y, Tb, Dy, \text{ and } Ho$) were prepared and found to crystallise with the hexagonal $CaCu_5$ -type of structure ($P6/mmm$). Hydrogenation under pressure of 1.5 MPa, shows that the maximum hydrogen capacity varies with the rare earth atom from 3.8, 2.8, 3.9 to 2.4 for Tb, Dy, Ho and Y, respectively. Analysis of neutron diffraction patterns indicates that Al atoms replace Ni atoms exclusively on the 3 (g) crystallographic sites. The lattice parameter expansion can be correlated both to the size of the RE atom and to the amount of aluminium. Magnetisation measurements of $TbNi_{3.5}Al_{1.5}$ show strong ferromagnetic contribution of magnetic RE element (terbium). The exchange couplings remain rather weak, corresponding to a Curie temperature T_c between 10 and 15 K. The $TbNi_{3.5}Al_{1.5}$ hydride reveals a reinforcement of the magnetic couplings with $T_c=105$ K. This indicates that nickel moments are magnetically reverse polarised to those of terbium.

Thermal studies of the molecular and ionic platinum (II) complexes of diethyl and monoethyl ester of 2-quinolylmethylphosphonic acid and chlorine or bromine were carried out using TG-DTA techniques. Large differences in the thermal behaviour between various types of complexes, especially between the molecular and the ion-pair salt complexes, were found, whereby the molecular complexes are generally much more stable.

Oznaka: 0098066

SUPRAVODLJIVI OKSIDI I VIŠENUKLEARNI METALNI KOMPLEKSI SUPERCONDUCTING OXIDES AND POLYNUCLEAR METAL COMPLEXES

Voditeljica projekta: dr. sc. Nevenka Brničević
Tel. ++385 1 4561 189 e-mail: nevenka.brnicevic@irb.hr

Suradnici

Berislav Perić, doktor fiz. znanosti, znanstveni novak u suradničkom zvanju višeg asistenta, u zvanju znanstvenog suradnika od 9.12.2005.

Pavica Planinić, doktorica kem. znanosti, viša znanstvena suradnica

Marijana Šestan Jurić, dipl. ing. kemije, znanstvena novakinja u suradničkom zvanju asistentice

Tehnički suradnici

Ernest Sanders, kemijski tehničar

Vanjski suradnici

Nevenka Brničević, doktorica kem. znanosti, znanstvena savjetnica u mirovini

Gerald Giester, doktor geol. znanosti, Institut für Mineralogie und Kristallographie, Universität Wien, Beč, Austrija

Program rada i rezultati na projektu:

Razrađuju se novi postupci pripreme i proučavaju svojstva heksanuklearnih halogenidnih klastera niobija i tantala. Istražuju se višenuklearni oksalatni sustavi prijelaznih metala sa svrhom pripreme novih spojeva poželjnih magnetskih (i drugih) svojstava, koji bi mogli poslužiti kao novi magnetski materijali. Među heksanuklearnim klasterima tantala priređen je spoj $2[(Ta_6Cl_{12})Cl_3(n-C_4H_9CN)_3] \cdot [(Ta_6Cl_{12})Cl_4(n-C_4H_9CN)_2] \cdot n-C_4H_9CN$, koji u svom sastavu sadrži istovremeno klusterske jedinice različitih nabojnih brojeva – $[Ta_6Cl_{12}]^{3+}$ i $[Ta_6Cl_{12}]^{4+}$, pa je ova dvosol jedan od rijetkih spojeva ovakvoga tipa unutar promatranih sustava – heksanuklearnih klastera V. i VI. skupine prijelaznih metala. Detaljno su opisana strukturna i spektroskopska svojstva novoga klastera. Razmatraju se strukturna, elektronska i magnetska svojstva paramagnetskog klastera tantala $[(Ta_6Cl_{12})Cl(H_2O)_5][CdBr_4] \cdot 6H_2O$, koji u jedinki $[Ta_6Cl_{12}]^{3+}$ sadrži jedan nespareni elektron smješten u najvišoj zaposjednutoj molekularnoj orbitali (HOMO). Strukturni su podaci za ovaj spoj prethodno bili rješavani u prostornoj grupi $Fd-3m$, gdje su jedinice raspoređene u rešetki dijamantnog tipa, s 4 najbliže susjedne jedinice smještene na udaljenosti 8,676 Å od središnje. Podaci su ukazivali na postojanje neuređenosti na položajima vanjskih liganada, između jednog atoma klora i 5 molekula vode. Istovremeno su rezultati mjerenja magnetske susceptibilnosti bili razmatrani u jednom «kvazi» jednodimenzijском modelu s dvije vrste interakcija. Stoga su ponovno prikupljeni strukturni podaci rješavani u prostornoj grupi niže simetrije, $Imma$, pri čemu su razmatrana dva modela, model koji uzima u obzir nesređenost strukture i model sraslaca i pseudo-merohedrije. Računi nisu dali znatnija poboljšanja u odnosu na prostornu grupu $Fd-3m$. Razrađuju se postupci pripreme mješovito-halogenidnih klastera $[M_6X_{(12-y)}X'(y)]^{n+}$, u kojima se na položajima unutarnjih prenosnih liganada izmjenjuju različiti halogeni elementi (X, X'). Ovakvi su spojevi značajni jer omogućuju promjenu (nano)strukturnih i fizičko-kemijskih svojstava klastera i pridonose ukupnom znanju o prirodi veze metal-metal. U okviru istraživanja novih oksalatnih sustava prijelaznih metala otkriven je i opisan spoj $Rb_3[NbO(C_2O_4)_3] \cdot 2H_2O$ kao novi strukturni oblik među tris(oksalato)okso-metalatima(V). Spoj služi kao polazna građevna jedinica pri dobivanju složenijih anorgansko-organskih sustava. Tako su priređeni višenuklearni metalni sustavi koji sadrže homo- i heterodinuklearne jedinice, $Cu^{II}Cu^{II}$ i $Cu^{II}Nb^V$, povezane međusobno oksalatnim skupinama: $[Cu_2(bpy)_4(mi-C_2O_4)][Cu(bpy)_2(mi-C_2O_4)NbO(C_2O_4)_2] \cdot 0,5bpy \cdot 7H_2O$ i $[Cu_2(phen)_4(mi-C_2O_4)][Cu(phen)_2(mi-C_2O_4)NbO(C_2O_4)_2] \cdot 8H_2O$ (bpy = 2,2'-bipiridin; phen = 1,10-fenantrolin). Razmatraju se njihova strukturna i magnetska svojstva.

Research programme and results:

New procedures for the preparation of hexanuclear halide clusters of niobium and tantalum are being developed and the properties of the new compounds investigated. Polynuclear oxalate systems of transition metals are intensively studied with the aim of obtaining new species with

desirable magnetic (and other) properties, that could serve as novel magnetic materials. Within the hexanuclear clusters of tantalum, a compound of the composition $2[(\text{Ta}_6\text{Cl}_{12})\text{Cl}_3(n\text{-C}_4\text{H}_9\text{CN})_3]\cdot[(\text{Ta}_6\text{Cl}_{12})\text{Cl}_4(n\text{-C}_4\text{H}_9\text{CN})_2]\cdot n\text{-C}_4\text{H}_9\text{CN}$ has been prepared, containing simultaneously two types of differently charged clusters entities – $[\text{Ta}_6\text{Cl}_{12}]^{3+}$ and $[\text{Ta}_6\text{Cl}_{12}]^{4+}$, which is a very rare phenomenon among the observed systems – the hexanuclear clusters of the V and VI groups of transition metals. Structural and spectroscopic properties of the new cluster have been described in details. Structural, electronic and magnetic properties of the tantalum $[(\text{Ta}_6\text{Cl}_{12})\text{Cl}(\text{H}_2\text{O})_5][\text{CdBr}_4]\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ paramagnetic cluster, with the $[\text{Ta}_6\text{Cl}_{12}]^{3+}$ unit containing one unpaired electron in the highest occupied molecular orbital (HOMO), have been investigated. Structural data obtained earlier for this compound had been solved in the $Fd\text{-}3m$ space group, with the cluster units being arranged in the diamond type lattice, with four nearest neighbours placed at the distance of 8.676 Å. The data showed that the terminal ligands positions were disorderly occupied by one chlorine atom and five water molecules. At the same time, magnetic susceptibility data were interpreted in a quasi one-dimensional model with two types of interactions. Therefore, the newly collected data have been refined in a lower symmetry group, $Imma$, with two models being considered, one taking into account the disorder of the structure and another assuming that the crystal is twinned by pseudo-merohedry. With respect to the $Fd\text{-}3m$ space group the improvements have not been significant. Procedures for the synthesis of mixed-halide $[\text{M}_6\text{X}(12\text{-}y)\text{X}'(y)]^{n+}$ niobium and tantalum clusters, wherein the inside, bridging ligands positions are occupied by different halogen atoms (X, X') are being developed. Compounds of this type are important as they enable changes of (nano)structural and physico-chemical properties of the clusters and contribute to the overall knowledge on the nature of metal-metal bond. Within the investigations of new, oxalate systems of transition metals the complex $\text{Rb}_3[\text{NbO}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, as a new structural form of the tris(oxalato)oxometalates(V), has been obtained and described. The compound is used as one of the building blocks in the synthesis of more complex inorganic-organic species. Thus, the polynuclear metal systems containing homo- and heterodinuclear $\text{Cu}^{\text{II}}\text{Cu}^{\text{II}}$ and $\text{Cu}^{\text{II}}\text{Nb}^{\text{V}}$ units, mutually bridged by oxalate groups, $[\text{Cu}_2(\text{bpy})_4(mi\text{-C}_2\text{O}_4)]\cdot [\text{Cu}(\text{bpy})_2(mi\text{-C}_2\text{O}_4)\text{NbO}(\text{C}_2\text{O}_4)_2]\cdot 2\cdot 0,5\text{bpy}\cdot 7\text{H}_2\text{O}$ and $[\text{Cu}_2(\text{phen})_4(mi\text{-C}_2\text{O}_4)]\cdot [\text{Cu}(\text{phen})_2(mi\text{-C}_2\text{O}_4)\text{NbO}(\text{C}_2\text{O}_4)_2]\cdot 2\cdot 8\text{H}_2\text{O}$ (bpy = 2,2'-bypiridine; phen = 1,10-phenanthroline), have been prepared. Their structural and magnetic properties have been examined.

Oznaka: 0098067

UTJECAJ DOPANADA NA STRUKTURU I SVOJSTVA MATERIJALA ZA TEHNIČKE PRIMJENE

INFLUENCE OF DOPANDS ON THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF MATERIALS FOR TECHNICAL APPLICATIONS

Voditeljica projekta: dr. sc. Biserka Gržeta
Tel. ++385 1 4561 120 e-mail: grzeta@irb.hr

Suradnici

Biserka Gržeta, doktorica fiz. znanosti, znanstvena savjetnica

Jasminka Popović, dipl. ing. kemije, znanstvena novakinja u suradničkom zvanju asistentice

Vanjski suradnici

Emilija Tkalčec, doktorica kem. znanosti, redovita profesorica u mirovini, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Program rada i rezultati na projektu:

Istraživanja u okviru ovog projekta obuhvaćaju ispitivanja mehanizama i učinaka ugradnje izabranih metalnih dopanada u osnovnu strukturu mulita ($3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$) i u strukturu metalnih oksida SnO_2 i In_2O_3 , s ciljem boljeg razumijevanja utjecaja ugradnje dopanada na svojstva materijala.

U okviru istraživanja mulita ispitana je mogućnost ugradnje Co^{2+} u strukturu mulita. U literaturi ima vrlo malo podataka o mogućnosti tog dopiranja. Uzorci mulita su priređeni iz dvofaznih gelova konstantnog atomskog omjera $(\text{Al}+\text{Co})/\text{Si}=3:1$ u kojima je 1, 2 ili 3 at% aluminija bilo zamijenjeno kobaltom. Istraživanja pomoću rendgenske difrakcije su pokazala da su priređeni uzorci sadržavali fazu tipa mulita te manje udjele $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, CoAl_2O_4 i amorfne faze. Dopiranje kobaltom je povećalo parametre jedinične ćelije mulita. Pomoću Rietveldove metode izvršena je kvantitativna analiza uzoraka i određena je kristalna struktura mulitne faze u uzorcima. Ustanovljeno je da se u mulit ugrađuje tek oko 0.36 tež.% Co (0.12 at%), tako što Co^{2+} zamjenjuje Al^{3+} u oktaedrima AlO_6 strukture mulita. Preostala količina kobalta u uzorku dijelom sudjeluje u formiranju faze CoAl_2O_4 , a dijelom se nalazi u amorfnoj komponenti uzorka.

Antimonom dopirani SnO_2 poznat je pod imenom ATO (*engl.* antimony tin oxide). Strukturna istraživanja uzoraka ATO koji su sadržavali 0-14 at% Sb pokazala su da se oba iona antimona, Sb^{3+} i Sb^{5+} , ugrađuju supstitucijski na mjesto Sn^{4+} strukture SnO_2 . Difrakcijske linije uzoraka bile su proširene, a proširenje je imalo anizotropni karakter. Uočeno je da proširenje difrakcijskih linija i anizotropija jako ovise o nivou dopiranja antimonom, te o omjeru $\text{Sb}^{3+}/\text{Sb}^{5+}$ ugrađenih iona antimona u polaznu strukturu SnO_2 . To je dovelo do razvoja metode za određivanje omjera udjela iona Sb^{3+} i Sb^{5+} u uzorcima ATO. Metoda zahtijeva precizno određivanje širina difrakcijskih linija 110 i 101 uzoraka ATO. Omjer širina ovih difrakcijskih linija i omjer udjela $\text{Sb}^{3+}/\text{Sb}^{5+}$ linearno su proporcionalni, što čini osnovu za jednostavno određivanje iznosa $\text{Sb}^{3+}/\text{Sb}^{5+}$ u uzorcima ATO.

Kositrom dopirani In_2O_3 , poznat pod imenom ITO (*engl.* indium tin oxide), je transparentni vodljiv oksid koji već ima vrlo široku primjenu, no još uvijek postoje nejasnoće na koji se način kositar ugrađuje u strukturu In_2O_3 . Indij oksid In_2O_3 ima kubičnu strukturu prostorne grupe Ia-3. Ion In^{3+} popunjava dva međusobno različita oktaedarska mjesta u strukturi In_2O_3 koja se u literaturi označuju kao B i D mjesta. Istraživana je ugradnja kositra u In_2O_3 . Priređeni su nanokristalni uzorci dopirani s 2-14 at% Sn, koji su ispitani pomoću rendgenske difrakcije i ^{119}Sn Mössbauer spektroskopije. Uočeno je da dopiranje In_2O_3 kositrom do udjela 7,8 at% Sn povećava parametar jedinične ćelije, a veći udio Sn uzrokuje smanjenje parametra jedinične ćelije, što je ukazivalo da u procesu dopiranja supstitucijska zamjena iona In^{3+} ionima Sn^{4+} na pozicijama B i D nije uniformna. Rezultati ^{119}Sn Mössbauer spektroskopije su pokazali da pri udjelu od 7,8 at% Sn u In_2O_3 , ioni kositra podjednako zaposjedaju mjesta B i D. Ispod tog udjela, ioni kositra više zaposjedaju mjesto D, a iznad tog udjela mjesto B. Dopirani uzorci su također popušteni na 1000 °C tijekom jednog sata. Parametar ćelije popuštenih uzoraka povećavao se linearno s udjelom kositra u uzorcima. ^{119}Sn Mössbauer spektri popuštenih uzoraka su sadržavali maksimume karakteristične za mjesta B i D te dodatni vrlo široki maksimum koji se može pripisati difuziji iona Sn^{4+} .

Research programme and results:

The research in the scope of this project involves investigations of mechanisms and effects of incorporation of selected metallic dopands into the structure of mullite ($3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$), and of metal oxides SnO_2 and In_2O_3 . This will be a support to better understanding of the influence of dopands on materials properties.

In the scope of structural studies of mullite the cobalt incorporation into mullite structure was investigated. In literature, just few data on this doping could be found. Mullite samples doped with cobalt were derived from diphasic gels with constant atom ratio $(\text{Al}+\text{Si})/\text{Si}=3:1$, where 1, 2 and 3 at% of aluminum was replaced by cobalt. X-ray diffraction examinations showed that the samples contained mullite phase and some amount of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, CoAl_2O_4 and amorphous phase. Cobalt doping caused an increase in unit-cell parameters of the mullite phase. The Rietveld method was performed for quantitative phase analysis of the samples and for structure refinement of the mullite phase in the samples. It was found that a small amount of cobalt, 0.36 wt% (0.12 at%), substituted for Al^{3+} in the AlO_6 octahedra of the mullite structure. The remaining cobalt reacted with alumina forming CoAl_2O_4 , and dissolved in the glassy phase.

Antimony doped SnO_2 is known by name ATO (antimony tin oxide). Structural studies of ATO samples containing 0-14 at% Sb showed that both Sb^{3+} and Sb^{5+} were substituted for Sn^{4+} in the SnO_2 structure. Diffraction lines were broadened, the line broadening being anisotropic. It was noticed that the broadening of diffraction lines and the line anisotropy depended strongly on the antimony doping level, as well on the $\text{Sb}^{3+}/\text{Sb}^{5+}$ content ratio. That led to development of a new method for the estimation of the content ratio of Sb^{3+} and Sb^{5+} ions in ATO samples. The method involves a precise measuring of the line widths for the diffraction lines 110 and 101 of ATO samples. The ratio of full-widths at half-maximum (FWHM) for the lines 110 and 101, $\text{FWHM}_{110}/\text{FWHM}_{101}$, is linearly correlated with the content ratio $\text{Sb}^{3+}/\text{Sb}^{5+}$ in the samples.

Tin doped In_2O_3 , known by name ITO (indium tin oxide), is a transparent conducting oxide with various commercial applications, but an uncertainty how tin incorporates in the In_2O_3 structure still exists. Indium oxide crystallizes in a cubic structure in space group Ia-3, In^{3+} cations being located on two different octahedral sites referred as B and D, respectively. Tin incorporation into In_2O_3 structure was investigated. Nanocrystalline tin-doped indium oxide samples containing 2-14 at% Sn were prepared and characterised by X-ray diffraction as well with ^{119}Sn -Mössbauer spectroscopy. It was noticed that the unit-cell parameter increased with tin doping level up to 7.8 at% Sn and decreased at higher levels. This behaviour of the unit-cell parameter indicated that Sn^{4+} substitution for In^{3+} on B and D sites of the original In_2O_3 structure is non-uniform. ^{119}Sn -Mössbauer spectroscopy revealed that incorporated tin resided equally sites B and D for 7.8 at% Sn. Below that doping level the preference for tin to occupy D site was noticed, while for doping level higher than 7.8 at% Sn the B site was preferred. Tin-doped samples were additionally annealed at 1000 °C for 1 h. Unit-cell parameter of the annealed samples increased with tin doping level. ^{119}Sn -Mössbauer spectra of the annealed samples were characterized with two doublets corresponding to two different cation sites (B and D, respectively), and an additional extremely broad subspectrum which could be ascribed to the diffusional motion of Sn^{4+} ions.

Oznaka: 0098129

**BIOKEMIJSKA I MOLEKULARNA REAKCIJA RIBA NA STANJE
EKOSUSTAVA
BIOCHEMICAL AND MOLECULAR FISH REACTION ASSOCIATED WITH
CHANGES OF ECOSYSTEM**

Voditeljica projekta: dr. sc. Rozelindra Čož-Rakovac
Tel. ++385 1 4571 232 e-mail: rrakovac@irb.hr

Suradnici

Rozelindra Čož-Rakovac, doktorica vet. medicine, znanstvena suradnica, viša znanstvena suradnica

Mato Hacmanjek, doktor vet. znanosti, znanstveni suradnik

Margita Jadan, magistrica biol. znanosti, znanstvena novakinja u suradničkom zvanju asistentice

Ivančica Strunjak-Perović, doktorica vet. medicine, znanstvena suradnica od 30.6.2005.

Natalija Topić-Popović, doktorica vet. medicine, znanstvena suradnica od 30.6.2005.

Program rada i rezultati na projektu:

Homeostatski mehanizam ribe kontinuirano je izložen promjenama vodenog ekosustava kao njenog životnog prostora. Biotski (mikroorganizmi i njihovi toksini) i abiotski čimbenici (kakvoća vode, antibiotici i kemoterapeutici) ekosustava mogu pojedinačno ili skupno utjecati na pojavu stresa riba. Svi odgovori organizma na stres imaju biokemijsku i molekulsku osnovu koju je moguće sagledati kroz kvalitativne i kvantitativne promjene na subcelularnoj i ekstracelularnoj razini ispitivanih organizama. Biokemijski odnosno molekulski pokazatelji posjeduju idealno svojstvo kao biološki indikatori, a to je brza reakcija na promjene ekosustava, te kao takvi predstavljaju prvi upozoravajući signal promjene istog.

Određivanje standardnih vrijednosti hematoloških i biokemijskih parametara (hematokrit, indeks loma, TP, albumini i globulini, kolesterol, trigliceridi, glukoza, urea, NH₃, bilirubin, kreatinin; enzimi: alkalna fosfataza, kreatinin kinaza, ALT, AST, GGT, LDH, lipaza, elektroliti: Ca, Mg, Na, K, Cl, PO₄; hormoni: T₄, kortizol, steroidni hormoni) za zdrave ribe koje žive u optimalnim uvjetima osnovni je preduvjet za upotrebu istih kao bioindikatora stanja okoliša. Uspoređivanjem vrijednosti parametara krvi pojedinih vrsta riba u ekološki narušenim ekosustavima (slatkovodni, bočati, morski) sa dobivenim rasponom referentnih vrijednosti istih u optimalnim uvjetima stvorit će se osnova za razgraničavanje fizioloških i patoloških stanja riba. Osim gore navedenih parametara, mjerit će se i aktivnost mikrosomalnog enzimatskog sustava u riba kao važnog pokazatelja zagađenja (kemoterapeutici, antibiotici, dezinficijensi) vodenog ekosustava. Mjerenjem indukcije P-450 enzimatskog sustava riba antibioticima i kemoterapeuticima dobit će se nova saznanja o interakciji i farmakokinetici tih lijekova. Rezultati ovih istraživanja pomoći će pri boljem znanstvenom razumijevanju prirodnih i antropogeno induciranih procesa koji utječu na strukturu i funkciju biološkog sustava organizama (riba) koji žive u vodi.

Istraživanje u 2005. godini dovelo je do uspostavljanja standardnih vrijednosti hematoloških i biokemijskih parametara za nekoliko vrsta riba (*Oncorhynchus kisutch*, *Dicentrarchus labrax*, *Mugill spp.*, *Thunnus thynnus*) te njihovih promjena s obzirom na neke abiotske čimbenike. Usporedbom uzgajanih i divljih populacija brancina u Jadranskom moru dokazano je da uzgojni uvjeti utječu na modifikacije biokemijskih parametara krvi, smanjivanjem otpornosti organizama i povećanjem njihove prijemljivosti na bakterijske, virusne i nametničke bolesti. Rezultati ukazuju na signifikantne razlike biokemijskih i histoloških profila slobodnoživućih i uzgajanih populacija brancina.

Research programme and results:

The homeostatic mechanism of fish is continuously exposed to changes in their water ecosystem and habitat. The biotic factors (micro-organisms and their toxins) and abiotic factors (water quality, antibiotics and chemotherapeutics) of the ecosystem can individually or collectively cause stress in fish. All responses of an organism to stress have a biochemical and molecular basis that can be

noticed through qualitative and quantitative changes at the subcellular and extracellular levels of the organism. Biochemical and molecular indicators are ideal as biological indicators in that they react quickly to changes in the ecosystem and so provide the first warning signal of these changes. Determining standard values of haematological and biochemical parameters (haematocrit, refraction index, TP, albumins and globulins, cholesterol, triglycerides, glucoses, urea, NH_3 , bilirubin, creatinine; enzymes: alkaline phosphatase, creatinine kinase, ALT, AST, GGT, LDH, lipase, electrolytes: Ca, Mg, Na, K, Cl, PO_4 ; hormones: T4, cortisol, steroid hormones) for healthy fish that live in optimum conditions is a prerequisite for their use as bio-indicators of the condition of the environment. Comparison of the values of blood parameters in individual kinds of fish in ecologically disrupted ecosystems (freshwater, brackish, marine) with the obtained range of reference values in optimum conditions enables a differentiation of the physiological and pathological conditions of the fish. In addition to the above-mentioned parameters, the activity of the microsomal enzymatic system of fish will be measured as an important indicator of pollution (chemotherapeutics, antibiotics, disinfectants) of the water ecosystem. The use of antibiotics and chemotherapeutics to measure the P-450 induction of the enzymatic system of fish will provide new insights into the interaction and pharmacokinetics of these medicines. This research will enable better scientific understanding of the natural and anthropogenically-induced processes that influence the structure and function of the biological system of organisms (fish) that live in water.

PRILOZI

Znanstveni i pregledni radovi objavljeni u časopisima koji su indeksirani u Current Contents-u

1. Bosnar, Sanja; Bronić, Josip; Krznarić, Ivan; Subotić, Boris. Influence of concentrations of aluminum and silicon in the liquid phase on the growth kinetics of zeolite A and X microcrystals. // *Croatica chemica acta*. 78 (2005), 1; 1-8.
2. Bououdina, Mohamed; Šorgić, Božica; Ouladdiaf, Bachir; Skryabina, Natalia; Fruchart, Daniel. Neutron diffraction investigations and magnetic properties of $\text{RNi}_{3.5}\text{Al}_{1.5}$ compounds and their hydrides (deuterides). // *Journal of alloys and compounds*. 404-406 (2005); 64-67.
3. Čož-Rakovac, Rozelindra; Strunjak-Perović, Ivančica; Hacmanjek, Mato; Topić Popović, Natalija; Lipej, Zoran; Šoštarić, Branko. Blood chemistry and histological properties of wild and cultured sea bass (*Dicentrarchus labrax*) in the North Adriatic Sea. // *Veterinary research communications*. 29 (2005), 8; 677-687.
4. Čulin, Jelena; Šmit, Ivan; Andreis, Mladen; Veksli, Zorica; Anžlovar, Alojz; Žigon, Majda. Motional heterogeneity and phase separation of semi-interpenetrating networks and mixtures based on functionalised polyurethane and polymethacrylate prepolymers. // *Polymer*. 46 (2005); 89-99.
5. Denac, Matjaž; Musil, Vojko; Šmit, Ivan. Polypropylene/talc/SEBS (SEBS-g-MA) composites. Part 2. Mechanical properties. // *Composites. Part A, Applied science and manufacturing*. 36 (2005), 9; 1282-1290.
6. Denac, Matjaž; Šmit, Ivan; Musil, Vojko. Polypropylene/talc/SEBS (SEBS-g-MA) composites. Part 1. Structure. // *Composites. Part A, Applied science and manufacturing*. 36 (2005), 8; 1094-1101.
7. Gajović, Andreja; Furić, Krešimir; Štefanić, Goran; Musić, Svetozar. In situ high temperature study of ZrO_2 ball-milled to nanometre sizes. // *Journal of molecular structure*. 744-747 (2005), 127-133.
8. Gajović, Andreja; Furić, Krešimir; Tomašić, Nenad; Popović, Stanko; Skoko, Željko; Musić, Svetozar. Mechanochemical preparation of nanocrystalline TiO_2 powders and their behavior at high temperatures. // *Journal of alloys and compounds*. 398 (2005), 1-2; 188-199.
9. Gotić, Marijan; Musić, Svetozar; Ivanda, Mile; Šoufek, Marin; Popović, Stanko. Synthesis and characterisation of bismuth(III)-vanadate. // *Journal of molecular structure*. 744-747 (2005),

535-540.

10. Katušin-Ražem, Branka; Hamitouche, Katia; Maltar-Strmečki, Nadica; Kos, Karmen; Pucić, Irina; Britvić-Budicin, Smiljana; Ražem, Dušan. Radiation sterilization of ketoprofen. // *Radiation physics and chemistry* (1993). 73 (2005), 2; 111-116.
11. Kontrec, Jasminka; Babić-Ivančić, Vesna; Brečević, Ljerka. Formation and morphology of struvite and newberyite in aqueous solutions at 25 and 37 °C. // *Collegium antropologicum*. 29 (2005), 1; 289-294.
12. Kosanović, Cleo; Stubičar, Nada; Tomašić, Nenad; Bermanec, Vladimir; Stubičar, Mirko. Synthesis of forsterite powder by combined ball-milling and thermal treatment. // *Journal of alloys and compounds*. 389 (2005), 1-2; 306-309.
13. Kovačević, Nenad; Vrtar, Mladen; Vekić, Branko. A simple calibration method for Ru-106/Rh-106 eye applicators. // *Radiotherapy and oncology*. 74 (2005); 293-299.
14. Krehula, Stjepko; Musić, Svetozar; Popović, Stanko. Influence of Ni-dopant on the properties of synthetic goethite. // *Journal of alloys and compounds*. 403 (2005); 368-375.
15. Lugomer, Stjepan; Mihaljević, Branka; Peto, Gabor; Toth, Attila; Horvath, Eniko. Sponge-like metal surface generated by laser in the semiconfined configuration. // *Journal of applied physics*. 97 (2005), 7 (0733); 5-13.
16. Musić, Svetozar; Dragčević, Đurđica; Popović, Stanko; Ivanda, Mile. Precipitation of ZnO particles and their properties. // *Materials letters*. 59 (2005); 2388-2393.
17. Planinić, Pavica; Rastija, Vesna; Perić, Berislav; Giester, Gerald; Brničević, Nevenka. Synthesis and crystal structure of $2[(\text{Ta}_6\text{Cl}_{12})\text{Cl}_3(\text{n-BuCN})_3]^{3+}$; $[(\text{Ta}_6\text{Cl}_{12})\text{Cl}_4(\text{n-BuCN})_2]^{4+}$; n-BuCN. The first example of a cluster with $[\text{Ta}_6\text{Cl}_{12}]^{3+}$ and $[\text{Ta}_6\text{Cl}_{12}]^{4+}$ core in the same molecule. // *Comptes rendus chimie*. 8 (2005.); 1766-1773.
18. Pucić, Irina; Turković, Aleksandra. Radiation modification of (PEO) 8ZnCl_2 polyelectrolyte and nanocomposite. // *Solid state ionics*. 176 (2005); 1797-1800.
19. Ristić, Mira; Musić, Svetozar; Ivanda, Mile; Popović, Stanko. Sol-gel synthesis and characterization of nanocrystalline ZnO powders. // *Journal of alloys and compounds*. 397 (2005), 1-2; L1-L4.
20. Ristić, Mira; Musić, Svetozar; Orehovec, Zvonko. Thermal decomposition of synthetic ammonium jarosite. // *Journal of molecular structure*. 744-747 (2005); 295-300.
21. Ristić, Mira; Popović, Stanko; Musić, Svetozar. Application of sol-gel method in the synthesis of gallium(III)-oxide. // *Materials letters*. 59 (2005), 11; 1227-1233.
22. Šestan, Marijana; Perić, Berislav; Giester, Gerald; Planinić, Pavica; Brničević, Nevenka. Another structure type of oxotris(oxalato)niobate(V): Molecular and crystal structure of $\text{Rb}_3[\text{NbO}(\text{C}_2\text{O}_4)_3]2\text{H}_2\text{O}$. // *Structural chemistry*. 16 (2005), 4; 409-414.
23. Šmit, Ivan; Erceg Kuzmić, Ana; Vuković, Radivoje; Bogdanić, Grozdana; Fleš, Dragutin. Structural differences between copolymers of acryl- and methacryl-cyclohexylurea with ethylene glycol dimethacrylate and their thermal degradation products. // *Journal of macromolecular science. Pure and applied chemistry*. 42 (2005), 12; 1621-1626.
24. Štefanić, Goran; Molčanov, Krešimir; Musić, Svetozar. A comparative study of the hydrothermal crystallization of HfO_2 using DSC/TG and XRD analysis. // *Materials chemistry and physics*. 90 (2005), 2-3; 344-352.
25. Štefanić, Goran; Musić, Svetozar; Gajović, Andreja. Thermal behavior of the amorphous precursors of the $\text{ZrO}_2\text{-CrO}_{1.5}$ system. // *Journal of molecular structure*. 744-747 (2005); 541-549.
26. Štefanić, Goran; Musić, Svetozar; Molčanov, Krešimir. The crystallization of HfO_2 and ZrO_2 under hydrothermal conditions. // *Journal of alloys and compounds*. 387 (2005), 1; 300-307.
27. Štefanić, Goran; Musić, Svetozar; Trojko, Rudolf. The influence of thermal treatment on the phase development in $\text{HfO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ and $\text{ZrO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ systems. // *Journal of alloys and compounds*. 388 (2005), 1; 126-137.
28. Tkalčec, Emilija; Kurajica, Stanislav; Ivanković, Hrvoje. Diphasic aluminosilicate gels with two

- stage mullitization in temperature range of 1200-1300°C. // *Journal of the European Ceramic Society*. 25 (2005); 613-626.
29. Tomašić, Vlasta; Tomašić, Ana; Šmit, Ivan; Filipović-Vinceković, Nada. Interactions in mixed cationic surfactants and dextran sulfate aqueous solutions. // *Journal of Colloid and Interface Science*. 285 (2005); 342-350.
30. Tušek-Božić, Ljerka; Trojko, Rudolf. Thermal behaviour of platinum(II) complexes of diethyl and monoethyl 2-quinolylmethylphosphonates. // *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. 81 (2005), 1; 153-157.
31. Vinceković, Marko; Bujan, Marija; Šmit, Ivan; Filipović-Vinceković, Nada. Phase behavior in mixtures of cationic surfactant and anionic polyelectrolytes. // *Colloids and Surfaces. A, Physicochemical and Engineering Aspects*. 255 (2005); 181-191.
32. Žic, Mark. Zero charge potential of a dropping mercury electrode drop determined by chronocoulometry. // *Journal of Electroanalytical Chemistry*. 584 (2005), 2; 215-218.

Knjige i poglavlja u knjigama

1. Zbornik radova 6. simpozija hrvatskog društva za zaštitu od zračenja / Garaj-Vrhovac, Verica; Kopjar, Nevenka; Miljanić, Saveta (ur.). Zagreb: Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2005.
2. Gržeta, Biserka; Tkalčec, Emilija; Goebbert, Christian; Takeda, Masuo; Takahashi, Masashi; Nomura, Kiyoshi. Structural studies of nanocrystalline Sb-doped SnO₂ // *Cristalografia. Fundamentos, técnicas y aplicaciones / Bucio, Lauro (ur.)*. Mexico D. F., Mexico: Sociedad Mexicana de Cristalografía, A. C., 2005. 69-74.

Ostali radovi objavljeni u časopisima

1. Erceg Kuzmić, Ana; Vuković, Radivoje; Bogdanić, Grozdana; Šmit, Ivan; Fleš, Dragutin. Novi pristup priređivanju molekularni tiskanih polimera. // *Polimeri : časopis za plastiku i gumu*. 26 (2005.) , 2; 63-68.
2. Knežević, Alena; Tarle, Zrinka; Ristić, Mira; Alajbeg, Iva. Utjecaj intenziteta svjetla za polimerizaciju na stupanj konverzije kompozitnih materijala (I dio). // *Acta Stomatologica Croatica*. 39 (2005.) , 4; 427-434.
3. Ranogajec-Komor, Maria. Status and perspectives of dosimetry in Europe. // *FB news (Tokyo)*. 6 (2005) , 342; 12-14.

Radovi objavljeni u zbornicima skupova

1. Govorčin Bajsić, Emi; Rek, Vesna; Leskovic, Mirela; Šmit, Ivan. Blends of thermoplastic polyurethane and polypropylene // *Polymers for advanced technologies*. Budimpešta, 2005. 13-16.
2. Kontrec, Jasminka; Babić-Ivančić, Vesna; Kralj, Damir; Brečević, Ljerka. Transformation of MgNH₄PO₄·6H₂O in aqueous solutions // *VDI-Berichte 1901.1 - Industrial crystallization 2005 / Ulrich, Joachim (ur.)*. Düsseldorf : VDI Verlag GmbH, 2005. 109-114.
3. Knežević, Željka; Krpan, Katarina; Ranogajec-Komor, Maria; Miljanić, Saveta; Vekić, Branko; Rupnik, Zdravko. Povezivanje termoluminiscentnog čitača s računalom te razvoj programa za obradu mjernih podataka // Zbornik radova 6. simpozija Hrvatskog društva za zaštitu od zračenja / Garaj-Vrhovac, Verica; Kopjar, Nevenka; Miljanić, Saveta (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2005. 111-116.
4. Kraljević, Petar; Vilić, Marinko; Miljanić, Saveta; Šimpraga, Miljenko. Aktivnost transferaza u krvnoj plazmi pilića izležanih iz jaja ozračenih malom dozom gama-zračenja tijekom inkubacije // Zbornik radova 6. simpozija Hrvatskog društva za zaštitu od zračenja / Garaj-Vrhovac, Verica;

- Kopjar, Nevenka; Miljanić, Saveta (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2005. 173-177.
5. Miljanić, Saveta; Ilijaš, Boris. Kemijski dozimetrijski sustav za radijacijske nesreće // Zbornik radova 6. simpozija Hrvatskog društva za zaštitu od zračenja / Garaj-Vrhovac, Verica; Kopjar, Nevenka; Miljanić, Saveta (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2005. 152-157.
 6. Milković, Đurđica; Ranogajec-Komor, Maria; Miljanić, Saveta. Protokol radiološkog snimanja torakalnih organa u svrhu zaštite od zračenja // Zbornik radova 6. simpozija Hrvatskog društva za zaštitu od zračenja / Garaj-Vrhovac, Verica; Kopjar, Nevenka; Miljanić, Saveta (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2005. 312-316.
 7. Pucić, Irina. Modificiranje i analiza polimera primjenom ionizirajućeg zračenja // Polimerni materijali i dodaci polimerima / Igor Čatić (ur.). Zagreb : Društvo za plastiku i gumu, 2005. 67-75.
 8. Pucić, Irina. Modificiranje i analiza polimera primjenom ionizirajućeg zračenja // Savjetovanje Polimerni materijali i dodatci polimerima / Jurjašević, Stanislav (ur.). Zagreb : Društvo za plastiku i gumu, 2005. 67-75.
 9. Ranogajec-Komor, Maria; Osvay, Margit; Miljanić, Saveta; Blagus, Saša. Osjetljivost LiF termoluminescentnih detektora na termalne i brze neutrone // Zbornik radova 6. simpozija Hrvatskog društva za zaštitu od zračenja / Garaj-Vrhovac, Verica; Kopjar, Nevenka; Miljanić, Saveta (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2005. 105-110.
 10. Štuhec, Matjaž; Miljanić, Saveta; Vekić, Branko. Harmonisation of measurements in radiation protection // Zbornik radova 6. Simpozija Hrvatskog društva za zaštitu od zračenja / Garaj-Vrhovac, Verica; Kopjar, Nevenka; Miljanić, Saveta (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2005. 87-90.
 11. Vekić, Branko; Ban, Renata; Miljanić, Saveta. Sekundarni standardni dozimetrijski laboratorij Instituta "Ruđer Bošković", Zagreb // Zbornik radova 6. simpozija Hrvatskog društva za zaštitu od zračenja / Garaj-Vrhovac, Verica; Kopjar, Nevenka; Miljanić, Saveta (ur.). Zagreb : Hrvatskog društvo za zaštitu od zračenja, 2005. 40-48.
 12. Vilić, Marinko; Kraljević, Petar; Miljanić, Saveta; Šimpraga, Miljenko. Koncentracija ukupnih bjelančevina u krvnoj plazmi pilića izležanih iz jaja ozračenih malom dozom gama-zračenja tijekom inkubacije // Zbornik radova 6. simpozija Hrvatskog društva za zaštitu od zračenja / Garaj-Vrhovac, Verica; Kopjar, Nevenka; Miljanić, Saveta (ur.). Zagreb : Hrvatsko društvo za zaštitu od zračenja, 2005. 178-182.

Elaborati, izvještaji i studije

1. Pucić, Irina. Određivanje uzroka "bučnosti" samoljepivih traka s pvc nosačem, 2005. elaborat.

Kolokviji i seminari održani u drugim ustanovama

Gržeta, Biserka; Tkalčec, Emilija; Goebbert, Christian; Takeda, Masuo; Takahashi, Masashi; Nomura, Kiyoshi: Structural studies of nanocrystalline antimony-doped tin oxide (ATO) from RT to 550 °C, Escuela Superior de Física y Matemáticas Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, Meksiko, 11.11.2005.

Miljanić Saveta; Ranogajec-Komor Maria; Knežević Željka; Vekić Branko: Research and development of dosimetry at the Ruđer Bošković Institute, Kyoto University, Kyoto, Japan, 11.2.2005.

Ranogajec-Komor Maria; Knežević Željka; Miljanić Saveta; Vekić Branko: Status and perspectives of dosimetry in Europe, Chiyoda Technol Corporation, Tokyo, Japan, 7.2.2005.

Ranogajec-Komor Maria; Knežević Željka; Miljanić Saveta; Vekić Branko: Characterization and intercomparison of radiophotoluminescence (RPL) dosimetry system according to international standards and protocols - Project proposal, Chiyoda Technol Corporation, Tokyo, Japan, 6.2.2005.

Ranogajec-Komor Maria; Knežević Željka; Miljanić Saveta; Vekić Branko: Thermoluminescence dosimetry, Kyoto University, Kyoto, Japan, 11.2.2005.

Vekić Branko; Knežević Željka; Miljanić Saveta; Ranogajec-Komor Maria: Standard calibration for radiation in Croatia, Chiyoda Technol Corporation, Mito, Japan, 9.2.2005.

Znanstveno i stručno usavršavanje u inozemstvu

Gržeta, B.: Escuela Superior de Física y Matemáticas Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, Meksiko, 9.11.2005. - 12.11.2005.

Krpan, K.: Regional Training Course on International Atomic Energy Agency (IAEA) Validation and Process Control for Radiation Processing, Risø Nationallaboratoriet, Roskilde, Danska, 14.11.2005. - 18.11.2005.

Sudjelovanja na kongresima

MEETING OF EXPERTS ON THE INFLUENCE OF OPTICAL RADIATIONS AND ELECTROMAGNETIC FIELDS ON EYES AND OTHER ORGANS; HRVATSKO DRUŠTVO ZA ZAŠTITU OD NEIONIZIRAJUĆIH ZRAČENJA "ALBERT EINSTEIN"

Opatija, Hrvatska, 9.4.2005. - 9.4.2005.

Sudionici: Ranogajec-Komor, M.

Prilozi: -

IM 2005 - EUROPEAN WORKSHOP ON INDIVIDUAL MONITORING OF IONIZING RADIATION

Beč, Austrija, 11.4.2005. - 15.4.2005.

Sudionici: Miljanić, S.; Vekić, B.

Prilozi:

Miljanić, S.; Zorko, B.; Gregori, B.; Knežević, Ž. TL detectors for gamma ray dose measurements in criticality accidents, poster.

Štuhec, M.; Zorko, B.; Vekić, B.; Miljanić, S.; Ban, R.; Bašić, B. Harmonization of individual dosimetry quality control within metrology system of a small country, poster.

ŠESTI SIMPOZIJ HRVATSKOGA DRUŠTVA ZA ZAŠTITU OD ZRAČENJA S MEĐUNARODNIM SUDJELOVANJEM

Stubičke Toplice, Hrvatska, 18.4.2005. - 20.4.2005.

Sudionici: Knežević, Ž.; Miljanić, S.; Ranogajec-Komor, M.; Vekić, B.

Prilozi:

Kraljević, P.; Vilić, M.; Miljanić, S.; Šimpraga, M. : Aktivnost transferaza u krvnoj plazmi pilića izleženih iz jaja ozračenih malom dozom gama-zračenja tijekom inkubacije, usmeno priopćenje

Vilić, M.; Kraljević, P., Miljanić, S.; Šimpraga, M. : Koncentracija ukupnih bjelančevina u krvnoj plazmi pilića izležanih iz jaja ozračenih malom dozom gama-zračenja tijekom inkubacije, usmeno priopćenje

Knežević, Ž.; Krpan, K.; Ranogajec-Komor, M.; Miljanić, S.; Vekić, B.; Rupnik, Z. : Povezivanje termoluminescentnog čitača s računalom te razvoj programa za obradu mjernih podataka, usmeno priopćenje

Milković, Đ.; Ranogajec-Komor, M.; Miljanić, S. : Protokol radiološkog snimanja torakalnih organa u svrhu zaštite od zračenja, usmeno priopćenje

Miljanić, S.; Ilijaš, B. : Kemijski dozimetrijski sustav za radijacijske nesreće, usmeno priopćenje

Ranogajec-Komor, M.; Osvay, M.; Miljanić, S.; Blagus, S. : Osjetljivost LiF termoluminescentnih detektora na termalne i brze neutrone, usmeno priopćenje

Štuhec, M.; Miljanić, S.; Vekić, B. : Harmonization of measurements in radiation protection, usmeno priopćenje

Vekić, B.; Ban, R.; Miljanić, S. : Sekundarni standardni dozimetrijski laboratorij Instituta "Ruđer Bošković", Zagreb, usmeno priopćenje

XIX. HRVATSKI SKUP KEMIČARA I KEMIJSKIH INŽENJERA

Opatija, Hrvatska, 24.4.2005. - 27.4.2005.

Sudionici: ; Antić Jelić, T.; Babić-Ivančić, V.; Bosnar, S.; Bronić, J.; Gotić, M.; Jurkin, T.; Kontrec, J.; Kosanović, C.; Kralj, D.; Mužić, A.; Njegić Džakula, B.; Planinić, P.; Pucić, I.; Pustak, A.; Ristić, M.; Subotić, B.; Šestan, M.; Štefanić, G.

Prilozi:

Antić Jelić, T.; Subotić, B. Utjecaj "učinka pamćenja" gelova na kinetiku kristalizacije zeolita, poster

Babić-Ivančić, V.; Kontrec, J.; Kralj, D.; Brečević, Lj. Transformacija struvita u modelnom sustavu $MgCl_2-NH_4H_2PO_4-NaOH-H_2O$, poster

Bosnar, S.; Subotić, B. Utjecaj suviška aluminijske i silicijске u tekućoj fazi na proces kristalizacije zeolita, poster

Bronić, J.; Sekovanić, L.; Mužić, A.; Biljan, T.; Kontrec, J.; Subotić, B. Interakcija joda s Na- i Ag-oblikom zeolita A, poster

Jurkin, T.; Pucić, I. Postradijacijsko umrežavanje i struktura nezasićene poliesterske smole, poster

Kontrec, J.; Babić-Ivančić, V.; Brečević, Lj.; Kralj, D. Kristalizacija kalcita uz dodatak aditiva, poster

Kosanović, C.; Norby, P.; Subotić, B. Kinetic analysis of $LiAlSiO_4$ from Li-exchanged zeolite A by time-resolved synchrotron powder diffraction, poster

Kosanović, C.; Tomašić, N.; Stubičar, M.; Gajović, A. Sintaza forsterita iz alumosilikatnih prekursora, poster

Mužić, A.; Bronić, J.; Subotić, B. Utjecaj koncentracija iona Nq^+ , Ca^{2+} te CO_2 na nukleaciju i kristalni rast zeolita A, poster

Njegić Džakula, B.; Kralj, D. Priprava i karakterizacija taloga anionskih glina $Mg_{0,68}Al_{0,32}A_{0,32}(OH)_2 \cdot nH_2O$, poster

Planinić, P.; Vojnović, M.; Perić, B.; Brničević, N. Novi postupak izmjene premošćujućih halogenidnih liganada u heksanuklearnim klusterima niobija i tantala, poster

Pucić, I.; Jurkin, T.; Turković, A. Morfologija radijacijski modificiranih $(PEO)_8ZnCl_2$ polielektrolita i nanokompozita, poster

Pucić, I.; Madžar, T.; Jakšić, M. Određivanje koncentracije isparivog inhibitora korozije pike-spektroskopijom, poster

Šestan, M.; Perić, B.; Planinić, P.; Brničević, N.; Matković-Čalogović, D.; Zadro, K. Spojevi s μ -oksalatnim skupinama između homo- i heterometalnih centara, poster

Šmit, I.; Pustak, A. Morfologija mješavina polipropilena, poster

Štefanić, G.; Musić, S.; Trojko, R.; Biljan, T. Thermal behavior of the amorphous precursors in the ZrO_2 - $GaO_{1,5}$ system, poster

30th WORKSHOP ON RADIATION PROTECTION OF THE HEALTH PHYSICS SECTION OF THE EOTVOS LORAND PHYSICAL SOCIETY

Keszthely, Mađarska, 3.5.2005. - 5.5.2005.

Sudionici: Miljanić, S.; Ranogajec-Komor, M.

Prilozi:

Ranogajec-Komor, M, Miljanić, S.; Osvay, M.: Status of individual and environmental dosimetry in Europe - the activity and role of EURADOS, usmeno priopćenje

EUROFILLERS 2005 AND 8th EUROPEAN SYMPOSIUM ON POLYMER BLENDS - JOINT MEETING

Brugge, Belgija, 9.5.2005. - 12.5.2005.

Sudionici: -

Prilozi:

Švab, I.; Musil, V.; Šmit, I. The effect of styrenic block copolymers on polypropylene/wollastonite composites, poster

MEETING OF COST D27 ACTION "ORIGIN OF LIFE AND EARLY EVOLUTION", WORKING GROUP 006/03

Zagreb, Hrvatska, 20.5.2005. - 21.5.2005.

Sudionici: Filipović-Vinceković, N.; Pucić, I.; Sikirić, M.; Šmit, I.; Tušek-Božić, Lj., Tomašić, V.

Prilozi:

Sikirić, M.; Šmit, I.; Tušek-Božić, Lj., Tomašić, V.; Pucić, I.; Primožić, I.; Filipović-Vinceković, N.: Effect of the Spacer Length on the Solid Phase Transition of Dissymmetric Gemini Surfactants, poster

20th INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE CO-ORDINATION AND BIOINORGANIC CHEMISTRY

Smolenice, Slovačka, 5.6.2005. - 10.6.2005.

Sudionici: Mihaljević, B.

Prilozi:

Mihaljević, B.; Ražem, D. : Influence of medium on oxidation kinetics of iron(II) ion with tert-butyl hydroperoxide, poster

FOURTEENTH CROATIAN-SLOVENIAN CRYSTALLOGRAPHIC MEETING

Vrsar, Hrvatska, 15.6.2005. - 17.6.2005.

Sudionici: Bosnar, S.; Bronić, J.; Gržeta, B.; Kosanović, C.; Krehula, S.; Mužic, A.; Perić, B.; Popović, J.; Ristić, M.; Štefanić, G.

Prilozi:

Kosanović, C.; Bosnar, S.; Subotić, B.; Kaučić, V.; Novak Tušar, N.; Gabrovček, R.; Ristić, A. Synthesis of gamma- and beta-eucryptite obtained by thermal transformation of LiA(BW), Li-exchanged zeolite A and of Li-exchanged amorphous aluminosilicate gel, predavanje

Krehula, S.; Musić, S.; Skoko, Ž.; Popović, S. Influence of Zn-doping on the properties of synthetic goethite, usmeno priopćenje

Perić, B. Different refinements of $[(Ta_6Cl_{12})Cl(H_2O)_5][CdBr_4] \cdot 6H_2O$, usmeno priopćenje

Popović, J.; Gržeta, B.; Tkalčec, E.; Kurajica, S. Upper limit of cobalt incorporation in mullite, usmeno priopćenje

Štefanić, G.; Gajović, A.; Musić, S. Structural and microstructural changes in monoclinic ZrO_2 during the ball-milling with stainless steel assembly, usmeno priopćenje

Tkalčec, E.; Gržeta, B.; Goebbert, C.; Popović, J.; Ksenofontov, V.; Takeda, M. Structural studies of tin-doped indium oxide (ITO), usmeno priopćenje

IX CONFERENCE & EXHIBITION OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY

Portorož, Slovenija, 19.6.2005. - 23.6.2005.

Sudionici: Štefanić, G.

Prilozi:

Štefanić, G.; Musić, S.; Gajović, A. A comparative study of the influence of milling media on the structural and microstructural changes in monoclinic ZrO_2 , poster**CURRENT AND FUTURE TRENDS IN POLYMERIC MATERIALS**

Prag, Češka, 26.6.2005. - 30.6.2005.

Sudionici: -

Prilozi:

Čulin, J.; Šmit, I.; Andreis, M.; Veksli, Z.; Anžlovar, A.; Žigon, M. : Phase Separation of Functionalized Polyester Polyurethanes, poster

7. MULTINACIONALNI KONGRES MIKROSKOPIJE (7th MULTINATIONAL CONGRESS ON MICROSCOPY-A REGIONAL MEETING WITH EUROPEAN EXTENSION)

Portorož, Slovenija, 26.6.2005. - 30.6.2005.

Sudionici: Babić-Ivančić, V.

Prilozi:

Babić-Ivančić, V.; Šerić, V. Crystalluria Observed by Light Microscopy, poster

Kontrec, J.; Babić-Ivančić, V.; Kralj, D.; Brečević, Lj. Contribution of optical microscopy to the study of magnesium phosphate transformation, poster

7th AUSTRIAN POLYMER MEETING

Graz, Austrija, 4.7.2005. - 6.7.2005.

Sudionici: Pucić, I.; Šmit, I.

Prilozi:

Denac, M.; Musil, V.; Šmit, I.; Švab, I. Encapsulation phenomenon in PP hybrid composites, poster

Pucić, I.; Jurkin, T. Postirradiation Crosslinking and Structure of Unsaturated Polyester Resin, poster

Pucić, I.; Jurkin, T.; Turković, A. Radiation Modified (PEO) 8 ZnCl₂ Polyelectrolytes and Nanocomposites, poster

Pucić, I.; Madžar, T.; Jakšić, M. PIXE Spectroscopy for Determination of Vapor Phase Corrosion Inhibitor Concentration, poster

XX CONGRESS OF THE INTERNATIONAL UNION OF CRYSTALLOGRAPHY

Firenca, Italija, 23.8.2005. - 31.8.2005.

Sudionici: Gržeta, B.; Popović, J.

Prilozi:

Gržeta, B.; Tkalčec, E.; Goebbert, C.; Popović, J.; Ksenofontov, V.; Reiman, S.; Felser, C. Structural changes of sol-gel derived Sn-doped In₂O₃ due to annealing at 1000 °C, poster

Popović, J.; Gržeta, B.; Tkalčec, E.; Kurajica, S. Cobalt incorporation in mullite, poster

Popović, S.; Skoko, Ž.; Gajović, A.; Furić, K.; Musić, S. X-ray Diffraction Study of Thermal Properties of Titanium Oxide, poster

Tkalčec, E.; Gržeta, B.; Goebbert, C.; Popović, J.; Ksenofontov, V.; Reiman, S.; Felser, C. Structural study of Sn-doped In₂O₃, poster

3rd FEZA CONFERENCE

Prag, Češka, 23.8.2005. - 26.8.2008.

Sudionici: Antonić Jelić, T.; Bosnar, S.; Bronić, J.; Kosanović, C.; Mužic, A.; Subotić, B.

Prilozi:

Mužic, A.; Bronić, J.; Subotić, B. Population balance analysis of the crystallization of zeolite A from clear aluminosilicate solutions, poster

Antonić Jelić, T.; Hadžija, M.; Subotić, B. Effects of lyophilization on amorphous aluminosilicate precursors, poster

Bosnar, S.; Kosanović, C.; Subotić, B.; Novak Tušar, N.; Gabrovšek, R.; Zabukovec Logar, N.; Kaučič, V. Li-aluminosilicate materials useful for radiation of eucryptite ceramics, poster

Kosanović, C.; Bosnar, S.; Subotić, B.; Novak Tušar, N.; Gabrovšek, R.; Ristić, A.; Kaučič, V. Thermal transformations of amorphous aluminosilicate gels, poster

Mužic, A.; Bronić, J.; Sekovanić, L.; Kontrec, J.; Biljan, T.; Subotić, B. Synthesis of some iodides within zeolite A crystals, poster

Mužic, A.; Bronić, J.; Sekovanić, L.; Kontrec, J.; Biljan, T.; Subotić, B. Introduction of iodine into zeolite X exchanged with Ag, Zn or Cu, poster

INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON CATALYTIC PROCESSES ON ADVANCED MICRO- AND MESO-POROUS MATERIALS

Nessebar, Bugarska, 2.9.2005. - 5.9.2005.

Sudionici: Bronić, J.; Kosanović, C.

Prilozi:

Bronić, J.; Sekovanić, L.; Mužic, A.; Biljan, T.; Kontrec, J.; Subotić, B. Host-guest interaction of inorganic ions and molecules with zeolites. Iodine in zeolite A, predavanje

Kosanović, C.; Stubičar, N.; Tomašić, N.; Stubičar, M.; Subotić, B.; Gajović, A.; Sekovanić, L. X-ray diffraction, infrared and Raman spectroscopy studies of synthetic forsterite obtained from zeolite precursors, predavanje

INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE APPLICATIONS OF THE MOSSBAUER EFFECT - ICAME 2005

Montpellier, Francuska, 3.9.2005. - 10.9.2005.

Sudionici: Gotić, M.; Krehula, S.; Musić, S.; Ristić, M.; Štefanić, G.

Prilozi:

Gotić, M.; Musić, S. Influence of experimental conditions on the precipitation of iron oxides from FeSO₄ solutions, poster

Krehula, S.; Musić, S.; Popović, S. Influence of Ni-dopand on the properties of synthetic goethite, poster

Ristić, M.; Musić, S. Characterization of precipitates formed by slow or forced hydrolysis of Fe(ClO₄)₃ solutions, poster

Štefanić, G.; Musić, S.; Nomura, K. XRD and ⁵⁷Fe Mossbauer investigation, poster

8th INTERNATIONAL WORKSHOP ON POSITRON AND POSITRON CHEMISTRY AND POSITRONS IN NUCLEAR MEDICINE

Coimbra, Portugal, 4.9.2005. - 9.9.2005.

Sudionici: Bosnar, S.

Prilozi:

Bosnar, S.; Kosanović, C.; Subotić, B.; Bosnar, D.; Kajcsos, Z.; Liszaky, L.; Lohonyai, L.; Lazar, K. On the sensitivity of positron lifetime spectroscopy to the stages of crystallization of LTA type zeolite, predavanje

16th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON INDUSTRIAL CRYSTALLIZATION

Dresden, Njemačka, 11.9.2005. - 14.9.2005.

Sudionici: Kontrec, J.

Prilozi: -

TREĆI HRVATSKI UROLOŠKI KONGRES

Osijek, Hrvatska, 21.9.2005. - 24.9.2005.

Sudionici: Babić-Ivančić, V.

Prilozi:

Babić-Ivančić, V.; Šerić, V. Kristalurija - prvi korak u stvaranju kamenaca, predavanje

DIFFUSION FUNDAMENTALS

Leipzig, Njemačka, 22.9.2005. - 24.9.2005.

Sudionici: Bronić, J.

Prilozi:

Mužić, A.; Sekovanić, L.; Bronić, J.; Biljan, T.; Kontrec, J.; Subotić, B. Diffusion of iodine into exchanged zeolite A and X, predavanje

13. SIMPOZIJ DRUŠTVA ZA ZAŠTITU OD ZRAČENJA SRBIJE I CRNE GORE

Donji Milanovac, Srbija i Crna Gora, 25.9.2005. - 28.9.2005.

Sudionici: Ranogajec-Komor, M.

Prilozi: -

13. KONFERENCA O MATERIALIH IN TEHNOLOGIJAH

Portorož, Slovenija, 10.10.2005. - 12.10.2005.

Sudionici: Kralj, D.

Prilozi:

Babić-Ivančić, V.; Brečević, Lj.; Kontrec, J.; Kralj, D. Transformation of struvite to newberyite in aqueous solutions, poster

QUINTO CONGRESO NACIONAL DE CRISTALOGRAFIA

Guanajuato, Meksiko, 13.11.2005. - 18.11.2005.

Sudionici: Gržeta, B.

Prilozi:

Gržeta, B.; Tkalčec, E.; Goebbert, C.; Takeda, M.; Takahashi, M.; Nomura, K. Structural studies of nanocrystalline Sb-doped SnO₂, plenarno predavanje

DANI DRUŠTVA ZA PLASTIKU I GUMU

Zagreb, Hrvatska, 17.11.2005. - 18.11.2005.

Sudionici: Pucić, I.

Prilozi:

Pucić, I. Modificiranje i analiza polimera primjenom ionizirajućeg zračenja, predavanje

13. GODIŠNJI SASTANAK HRVATSKOG DRUŠTVA ZA ELEKTRONSKU MIKROSKOPIJU

Zagreb, Hrvatska, 16.12.2005. - 16.12.2005.

Sudionici: Babić-Ivančić, V.

Prilozi:

Babić-Ivančić, V.; Šerić, V. Crystalluri Observed by Light Microscopy, poster

Kontrec, J.; Babić-Ivančić, V.; Kralj, D.; Brečević, Lj. Contribution of Optical Microscopy to the Study of Magnesium Phosphate Transformation, poster

Sudjelovanje u radu međunarodnih organizacija

Ražem, D.: International Atomic Energy Agency (IAEA) Consultants Meeting on Recent Trends in Radiation Sterilization; Kairo, Egipat, International Atomic Energy Agency (IAEA), Beč, Austrija

Gržeta, B.: Aktivni član International Centre for Diffraction Data; član triju tehničkih podkomiteta: Ceramics Subcommittee, Metals and Alloys Subcommittee, X-Ray Diffraction Methods Subcommittee, ICDD, Newtown Square, PA, SAD

Miljanić, S.; Ranogajec-Komor, M.; Vekić, B.: EURADOS Annual Meeting, European Radiation Dosimetry Group - EURADOS, Kraków, Poljska

Miljanić, S.; Ranogajec-Komor, M.: Sastanak Radne skupine 9 (WG 9) u projektu CONRAD (Framework 6) EURADOS-a, European Radiation Dosimetry Group - EURADOS, Saclay, Francuska

Ranogajec-Komor, M.: Meeting of the ISSDO for the organization of the 15th International Conference on Solid State Dosimetry, Delft, Nizozemska., International Solid State Dosimetry Organization, Stillwater, OH, SAD

Ražem, D.: Joint AFRA/IAEA Regional Training Course on General Process Control, Quality Control/Quality Assurance, Radiation Dosimetry and Safety Procedures and New Engineering Developments in Industrial Irradiators, Kairo, Egipat, International Atomic Energy Agency (IAEA), Beč, Austrija

Ražem, D.: NATO Food and Agriculture Planning Committee, Vital Resources Seminar, Bled, Slovenija, NATO, Bruxelles, Belgija

Međunarodni ugovori

Ranogajec, F.: Investigation of the effect of high energy radiation on polymeric systems, temeljem suradnje između Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti i Mađarske akademije znanosti (Magyar Tudományos Akadémia), Izotópkutató Intézet Felületkémiai Osztály, Budimpešta, Mađarska

Ražem, D.: Razgradnja organofosfornih spojeva pomoću gama zračenja, Hrvatsko-slovenski bilateralni program suradnje u području znanosti i tehnologije, Politehnika Nova Gorica, Nova Gorica, Slovenija

Katušin-Ražem, B.: Nuclear Techniques for the Protection of Cultural Heritage Artefacts in the Mediterranean Region, IAEA RER 1/006, International Atomic Energy Agency (IAEA), Beč, Austrija

Miljanić, S.: Utjecaj kakvoće zračenja na odziv dozimetara čvrstog stanja, temeljem suradnje između Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti i Mađarske akademije znanosti (Magyar Tudományos Akadémia), KFKI Atomenergia Kutatóintézet (AEKI), Budimpešta, Mađarska

Ranogajec-Komor, M.: Osnovna i primjenjena istraživanja dozimetrije čvrstog stanja, temeljem suradnje između Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti i Mađarske akademije znanosti (Magyar Tudományos Akadémia), Izotópkutató Intézet Felületkémiai Osztály, Budimpešta, Mađarska

Ranogajec-Komor, M.: Characterization and Intercomparison of Radiophotoluminescent (RPL) Dosimetry Systems, Chiyoda Technol Corporation, Tokyo, Japan

Ražem, D.: Quality Control Methods and Procedures for Radiation Technology, IAEA RER/8/010, regionalni projekt tehničke suradnje, Međunarodna agencija za atomsku energiju, Beč, Austrija

Šmit, I.: Polimerni mikrokompoziti i nanokompoziti, Hrvatsko-slovenski bilateralni program suradnje u području znanosti i tehnologije, Ekonomsko-poslovna fakulteta, Univerza v Mariboru, Maribor, Slovenija

Posjeti inozemnih stručnjaka Institutu "Ruđer Bošković"

Olgun Güven, Hacettepe Üniversitesi, Ankara, Turska, 13.6.2005. - 18.6.2005.

Margit Osvay, Izotópkutató Intézet, Budimpešta, Mađarska, 17.4.2005. - 20.4.2005.

Odličja i nagrade

"ZLATNA ARCA 2005" I "GENIUS CUP - NAGRADA UDRUGE MAĐARSKIH INOVATORA"
Nagrade dobivene na 3. međunarodnoj izložbi inovacija, novih ideja, proizvoda i tehnologija (13.09.–18.09.2005., Jesenski međunarodni zagrebački velesajam) za "VIKER - računalom vođeni višenamjenski kemijski reaktor uvećanog laboratorijskog mjerila"

Damir Kralj, Jasminka Kontrec, M. Ukrainczyk, Vesna Babić-Ivančić, Ljerka Brečević

Dodiplomska i poslijediplomska nastava

Poslijediplomska nastava

DIFRAKCIJA U POLIKRISTALNOM MATERIJALU

Poslijediplomski doktorski studij kemije, smjer Anorganska i strukturna kemija, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Voditelj(i): Gržeta, Biserka; Popović, Stanko
Predavač(i): Gržeta, Biserka; Popović, Stanko

EKSPERIMENTALNE METODE U KRISTALNOJ STRUKTURNOJ ANALIZI

Poslijediplomski doktorski studij kemije, smjer Anorganska i strukturna kemija, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Voditelj(i): Gržeta, Biserka; Nagl, Ante
Predavač(i): Gržeta, Biserka; Nagl, Ante

FIZIČKO - KEMIJSKI UČINCI IONIZIRAJUĆIH ZRAČENJA

Sveučilišni poslijediplomski studij prirodnih znanosti, struka kemija, fizička kemija, Prirodoslovno - matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Voditelj(i): Kallay, Nikola
Predavač(i): Ražem, Dušan

IHTIOHEMATOLOGIJA

Ribarstvo, Agronomski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Voditelj(i): Čož-Rakovac, Rozelindra
Predavač(i): Čož-Rakovac, Rozelindra

INTERMETALNI SPOJEVI I METALNI HIDRIDI

Poslijediplomski znanstveni studij iz polja kemije, smjer anorganska i strukturna kemija, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Voditelj(i): Cindrić, Marina
Predavač(i): Blažina, Želimir

METALNI HIDRIDI I VODIKOVA EKONOMIJA

Poslijediplomski doktorski studij inženjerska kemija, znanstveno polje: kemijsko inženjerstvo, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu

Voditelj(i): Metikoš-Huković, Mirjana
Predavač(i): Drašner, Antun; Jukić, Ante

MORFOLOŠKA STRUKTURA POLIMERNIH MATERIJALA

Studij Inženjerska kemija, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Voditelj(i): Metikoš-Huković, Mirjana
Predavač(i): Šmit, Ivan

PRIMJENJENA RADIJACIJSKA KEMIJA

Studij Inženjerska kemija, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Voditelj(i): Metikoš-Huković, Mirjana
Predavač(i): Ranogajec, Franjo

RAVNOTEŽA I KINETIKA PROCESA U HETEROGENIM SUSTAVIMA

Sveučilišni poslijediplomski studij prirodnih znanosti, struka kemija, fizička kemija, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Voditelj(i): Kallay, Nikola
Predavač(i): Brečević, Ljerka

RENDGENSKE I TERMIČKE METODE ANALIZE

Poslijediplomski studij geoloških znanosti, znanstveno polje: geoznanosti, Prirodoslovno matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb

Voditelj(i): Palinkaš, Ladislav
Predavač(i): Trojko, Rudolf; Tibljaš, Darko

SUVREMENI PRISTUP UROLITIJAZI

Poslijediplomski doktorski studij biomedicine, Medicinski fakultet, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Osijek

Voditelj(i): Tucak, Antun

Predavač(i): Babić-Ivančić, Vesna; Karner, Ivan; Galić, Josip; Cvijetić Avdagić, Selma; Kuveždić, Hrvoje; Milas, Jasminka