



Hrvatska zaklada za znanost

HRZZ Istraživački projekti (IP-06-2016)

Prijavni obrazac¹

Istraživanje složenih multiferoičnih materijala pripremljenih
metodama otopinske kemije

SOLFERROMAT

(vidjeti Upute za podnositelje projektnih prijedloga na natječaj Istraživački projekti IP-06-2016 – upute za ispunjavanje Prijavnog obrasca)

Molimo poštovati sljedeća ograničenja oblikovanja: Verdana, veličina fonta najmanje 10, margine (2.0 desna i lijeva i 1.5 donja), jednostruki prored.

Prijavni obrazac sastoji se od tri cjeline:

- Cjelina A – Voditelj projekta (stranice 1-3)
- Cjelina B – Projektni prijedlog (stranice 4 – 17)
- Cjelina C – Suradnici i istraživačka grupa
- Reference

Naslovna strana:

- Ime voditelja projekta (PI): Igor Đerđ
- Ime ustanove nositelja na kojoj će voditelj provoditi projekt: Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
- Puni naziv projektnoga prijedloga: Istraživanje složenih multiferoičnih materijala pripremljenih metodama otopinske kemije
- Trajanje projektnoga prijedloga (u mjesecima): 48

Postojeći trendovi koji vode prema umanjenoj uređaja i povećanoj gustoći zapisa podataka, predstavljaju velik izazov u nanoelektronici zbog stvaranja sve manjih podesivih uređaja s multifunkcionalnošću integriranom u jedan sustav materijala. Kako su i feromagnetizam i feroelektricitet ključni u mnogim aspektima moderne tehnologije, zahtjevi za materijalima koji pokazuju oba svojstva predstavljaju značajnu fundamentalnu i tehnološku važnost. Ipak, kad se u jednofaznom materijalu pojavljuje dva ili više fero-uređenja i ako su ta svojstva blisko povezana, njihovo međudjelovanje može proizvesti novi učinak koji se manifestira kao električna polarizacija uslijed primjene magnetskoga polja ili, obratno, magnetizacija uslijed primjene električnog polja.

Glavni je cilj projekta SOLFERROMAT dizajniranje tri nova tipa funkcionalnih multiferoičnih spojeva:

- i) metaloorganskih spojeva perovskitne strukture ABX_3 (A = amin-kation, B = prijelazni metal, X = organski ligand)
- ii) hibridne organsko-anorganske perovskitne strukture ABX_4 (A = amin-kation, B = prijelazni metal, X = halogeni element) i

¹ Upute za ispunjavanje prijavnog obrasca mogu se pronaći u Uputama za podnositelje projektnih prijedloga za natječaj Istraživački projekti (IP-06-2016).

iii) kompleksnih dvostrukih ili pojedinačnih perovskita tipa $A_2B(\text{Te/W})O_6$ ili $A_3B_2(\text{Te/W})O_9$ (A = laki dvovalentni metal, B = prijelazni metal).

Principi moderne koordinacijske kemije koji uključuju sol-gel postupak, mehanokemiju i mehanokemiju potpomognutu otapalom bit će korišteni za dizajniranje novih materijala za pohranu podataka, poglavito za memorijske elemente u više mogućih stanja i spintronske uređaje. Pažljivo organizirani slijed sinteza, karakterizacija i mjerenja magnetskih, električnih i magnetoelektričnih svojstava omogućit će postizanje ovoga cilja.

Predložena metodologija za karakterizaciju struktura i svojstava novih materijala jest sinergija tehnika korištenih u trima disciplinama: koordinacijskoj kemiji, fizici kondenzirane tvari i znanosti o materijalima kako to uobičajeno čini zajednica koja se bavi multiferoicima. U ovom ćemo projektu kombinirati široko iskustvo u izučavanju funkcionalnih metalnih oksida, metaloorganskih mreža, anorganske kemije i kristalografije koje postoji u osječkoj istraživačkoj grupi s određivanjem magnetskog osnovnog stanja i magnetoelektričkim istraživanjem u Ljubljani. Glavni je cilj projekta poboljšati istraživanje povezivanjem kristalnog inženjeringa s fizikom i kemijom materijala kako bi se otkrili materijali novih funkcionalnih multiferoičnih svojstava. Na temelju dobivenih rezultata, pretpostavljamo dugoročnu korist ovoga projekta u razvoju empirijskih kriterija za istraživanje i pripremu novih naprednih multiferoika.

Cjelina A – Voditelj projekta

Dio a: Popis postignuća (*Track-record*) **voditelja projekta u zadnjih 5 godina** (uključujući

1. Pet publikacija u vodećim međunarodnim znanstvenim časopisima koji uključuju istorazinsko vrednovanje, priopćenja s konferencija i/ili monografije, uz navođenje njihovog faktora učinka; 2. Glavni doprinosi razvitku karijera mladih istraživača; 3. Pozvana predavanja na međunarodne konferencije i/ili ljetne škole; 4. Druga važna akademska postignuća.) (najviše 1 stranica)

BROJ OBJAVLJENIH PUBLIKACIJA (2012.- 2016.): **33** od kojih je **22** u **Q1** najizvrsnijih časopisa. **14** priopćenja na međunarodnim znanstvenim skupovima (**10** usmenih izlaganja).

POPIS 5 PUBLIKACIJA (2012.- 2016.) **PROSJEČAN FAKTOR ODJEKA: 6.224:**

- Igor Djerdj***, Jasminka Popović, Suraj Mal, Tobias Weller, Marko Nuskol, Zvonko Jagličić, Željko Skoko, Damir Pajić, Christian Suchomski, Pascal Voepel, Roland Marschall, Bojan Kozlevčar, and Bernd M. Smarsly, Aqueous Sol–Gel Route toward Selected Quaternary Metal Oxides with Single and Double Perovskite-Type Structure Containing Tellurium, *Cryst. Growth Des.*, **16** (2016), 2535-2541 (FO=**4.891**).
- Sven Urban, Paolo Dolcet, Maren Möller, Limei Chen, Peter J. Klar, **Igor Djerdj**, Silvia Gross, Bernd M. Smarsly, Herbert Over, Synthesis and full characterization of the phase-pure pyrochlore Ce₂Zr₂O₇ and the κ-Ce₂Zr₂O₈ phases, *Appl. Catal., B*, DOI: 10.1016/j.apcatb.2016.03.049 (FO=**7.435**).
- Xu Liu, Nan Chen, Bingqian Han, Xuechun Xiao, Gang Chen, **Igor Djerdj***, and Yude Wang*, Nanoparticle cluster gas sensor: Pt activated SnO₂ nanoparticles for NH₃ detection with ultrahigh sensitivity, *Nanoscale*, **7** (36), (2015), 14872-14880 (FO=**7.394**).
- Dan Hu, Bingqian Han, Shaojuan Deng, Zhipeng Feng, Yan Wang, Jasminka Popovic, Marko Nuskol, Yude Wang, and **Igor Djerdj***, Novel Mixed Phase SnO₂ Nanorods Assembled with SnO₂ Nanocrystals for Enhancing Gas-Sensing Performance toward Isopropanol Gas, *J. Phys. Chem. C*, **118** (2014), 9832-9840 (FO=**4.772**).
- Igor Djerdj***, Jasminka Popović, Jernej Stare, Gabriela Ambrožić, Srečo D. Škapin, Bojan Kozlevčar, Damir Pajić, Zvonko Jagličić, and Zorica Crnjak Orel, Nanocrystalline hybrid inorganic-organic one-dimensional chain system tailored with 2 and 3-phenyl rings monocarboxylic acids, *J. Mater. Chem.* **22** (2012), 20; 10255 – 10265 (FO=**6.626**).

GLAVNI DOPRINOSI RAZVITKU KARIJERA MLADIH ISTRAŽIVAČA (VOĐENJA

DOKTORANADA I POSLIJEDOKTORANADA): Mentor jednog doktorskog studenta, završen dio eksperimentalnog rada i objavljen je 1 rad iz teme disertacije u *Crystal Growth and Design*; Voditelj poslijedoktoranda na uspješno završenom UKF projektu: „Multifunctional complex metal tellurates: Structure-property relationship study“, objavljen jedan zajednički rad također u *Crystal Growth and Design*; Voditelj poslijedoktoranda na Newfelpro projektu: “Effective modulation of ZnO band gap and the modulation mechanism study (ZnO band gap study)“, u tijeku revizija članka za časopis *Journal of Catalysis*.

POZVANA PREDAVANJA:

- Nonaqueous route towards various functional nanosized compounds: An overview, Institute of Materials Jean Rouxel, University of Nantes, March, **2013**, Nantes, France.
- Electron microscopy study of one-dimensional functional materials synthesized by a nonaqueous route, *Microscopy Conference*, August, **2013**, Regensburg, Germany.
- Novel Mixed Phase SnO₂ Nanorods Assembled with SnO₂ Nanocrystals for Enhancing Gas-Sensing Performance toward Isopropanol Gas, *ISMANAM-2014*, June, **2014**, Cancun, Mexico.
- Hexagonal Rare Earth Orthoferrites Stabilized on the Nanometer Scale in Polymer-Templated Mesostructured Thin Films and Powders, *IMMS-9*, August, **2015**, Brisbane, Australia.
- The application of metal oxide nanoparticles in gas sensing devices and lithium ion batteries, *Cutting Edge 2015*, **22. 09. 2015.**, University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Ljubljana, Slovenia.

VOĐENJE ZNANSTVENIH PROJEKATA

2013.-2015.: Voditelj UKF projekta: “Multifunctional complex metal tellurates: Structure property relationship study”- Unity through Knowledge Fund;

2014.-2016.: Voditelj Newfelpro projekta: “Effective modulation of ZnO band gap and the modulation mechanism study (ZnO band gap study)”- Newfelpro dolazna shema;

2014.-2017.: Voditelj SCOPES projekta: “Metal-Hydride Organic Frameworks (HOF)-new solids for gas adsorption and separation”- Swiss National Science Foundation.

Dio b: Životopis voditelja projekta (najviše 2 stranice, prema sljedećem predlošku)**OSOBNE INFORMACIJE**

Prezime i ime: *Đerđ Igor*
 Matični broj istraživača: *225002*
 Mrežna stranica: *http://www.kemija.unios.hr/zaposlenici/igor-derd/*

OBRAZOVANJE

2003. *Dr. sc., područje prirodnih znanosti, polje fizika, grana fizika kondenzirane tvari, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu*
 1997. *Diplomirani inženjer fizike, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu*

Zaposlenje

2016. – danas *Izvanredni profesor znanstvenog polja interdisciplinarnе prirodne znanosti: kemija i fizika i zamjenik pročelnika za znanstvenoistraživačku djelatnost
 Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku*

Prethodna zaposlenja

2014. – 2016. *Viši znanstveni suradnik, Zavod za fiziku materijala, Institut Ruđer Bošković*
 2010. – 2011. *Gostujući znanstvenik (plaćeni dopust), Kemijski inštitut Ljubljana, Slovenia*
 2009. - 2014. *Znanstveni suradnik, Zavod za fiziku materijala, Institut Ruđer Bošković*
 2007. - 2009. *Poslijedoktorand, Department of Materials, ETHZ, Zürich, Švicarska*
 2006. - 2007. *Poslijedoktorand (plaćeni dopust), Colloid Chemistry, Max-Planck-Institute of Colloids and Interfaces, Potsdam, Njemačka*
 2004. - 2007. *Viši asistent, Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu*
 1998. - 2004. *Asistent, Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu*

Znanstveni opus

Broj objavljenih radova (WoS): **78 (56 Q1)**

Broj priopćenja na znanstvenim skupovima: **38**

Broj usmenih izlaganja na međunarodnim znanstvenim skupovima: **27**

Broj citata: **1965** (prema WoS-u) h-indeks: **26**

STIPENDIJE I NAGRADE

2006. *Winner of the IMC16/IFSM Scholarship for Young Scientists for attendance at IMC16 (16th International Congress of Electron Microscopy), 2006, Sapporo Japan.*
 2009. *Outstanding Reviewer Award for Scripta Materialia for 2009.*
 2010. *SNSF conference grant for the attendance of ISMANAM 2010, Zürich, Switzerland.*
 2010. – 2011. *Stipendija za boravak u Sloveniji dodijeljena od Slovene Human Resources Development and Scholarship Fund "Ad Futura".*
 2011. *Godišnja nagrada ravnatelja Instituta Ruđer Bošković za 2011.*
 2012. *Godišnja nagrada ravnatelja Instituta Ruđer Bošković za 2012.*
 2013. *CNR Short term mobility grant za istraživački posjet: Institute of Crystallography Bari, Italija (listopad 2013).*
 2013. *RSC journal author travel grant za posjetu QMUL, London, UK, prosinac 2013.*

MENTORSTVA DOKTORSKIH STUDENATA I POSLIJEDOKTORANDA

2014. – danas: *1 doktorand, Institut Ruđer Bošković (UKF projekt), objavljen rad s doktorandom u koautorstvu u Cryst. Growth Des.*
 2014. – 2016: *1 poslijedoktorand, Institut Ruđer Bošković (UKF projekt), objavljen rad s poslijedoktorandom u koautorstvu u Cryst. Growth Des.*
 2014. – danas: *1 poslijedoktorand, Institut Ruđer Bošković (Newfelpro dolazna shema), objavljen rad s poslijedoktorandom u J. Electron. Mater.*

NASTAVNE AKTIVNOSTI

1998. – 2003. *Asistent na kolegiju Osnove teorije vjerojatnosti i matematička statistika, Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Fizički odsjek*

1999. – 2005. *Asistent na kolegiju Fizika za geologe, Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Fizički odsjek*
1999. – 2005. *Asistent na kolegiju Fizički praktikum V, Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Fizički odsjek*
2004. – 2005. *Asistent na kolegiju Odabrana poglavlja fizike čvrstog stanja, Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Fizički odsjek*
2000. – 2005. *Nastavnik na kolegijima Fizički praktikum I and II, Pedagoški fakultet, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku.*
1998. – 2000. *Nastavnik na kolegiju Statistička fizika, Pedagoški fakultet, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku*
2012. – danas *Nastavnik na kolegiju Matematičke metode u kemiji, Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku*
2014. – danas *Nastavnik na izbornom kolegiju Doktorskog studija kemija: Elektronska difrakcija i mikroskopija, Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet, Kemijski odsjek*

OBVEZE U USTANOVU

2016. – danas *Zamjenik pročelnika za znanstvenoistraživačku djelatnost i član Vijeća Odjela za kemiju Sveučilišta J. J. Strossmayera u Osijeku*

ČLANSTVA

2008. – 2010. *Materials Research Society*
1999. – danas *Hrvatsko mikroskopijsko društvo*
1999. – danas *Hrvatska kristalografska zajednica*
2000. – danas *Hrvatsko fizikalno društvo*
2013. – danas *American Nano Society*
2015. – danas *Royal Society of Chemistry*

NAJVAŽNIJE ZNANSTVENE SURADNJE

- *Prof. dr. Markus Niederberger at the ETHZ, Switzerland (doped materials)*
- *Prof. dr. Yude Wang at the Yunnan University, China (lithium batteries)*
- *Prof. dr. Bernd Smarsly at the Justus-Liebig-University, Germany (ionic liquids)*
- *Dr. Torsten Brezesinski at Karlsruhe Institute of Technology, Germany (lithium batteries)*
- *Prof. dr. Radovan Černý at the University of Geneva, Switzerland (structural solving and HOF compounds)*
- *Prof. dr. Xavier Rocquefelte at the University of Nantes, France (DFT calculation)*
- *Prof. dr. Denis Arčon at the University of Ljubljana, Slovenia (EPR study)*
- *Prof. dr. Zvonko Jagličić at the University of Ljubljana, Slovenia (SQUID measurement)*
- *Prof. dr. Silvia Gross at the University of Padova, Italy (XPS)*
- *Dr. Fabia Gozzo at the Paul Scherrer Institute, Switzerland (neutron and synchrotron X-ray diffraction)*
- *Dr. Zorica Crnjak Orel at the National Institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia (bulk characterization)*
- *Dr. Mile Ivanda at Ruđer Bošković Institute, Zagreb (Raman measurement)*
- *Dr. Jasminka Popović at Ruđer Bošković Institute, Zagreb (XRD)*
- *Doc. dr. Željko Skoko at Dept. of Physics, PMF, Zagreb (TEM measurement)*

RECENZIJE

Recenzent međunarodnih znanstvenih agencija

ACS- Petroleum Research Fund, Austrian Science Fund, Czech Science Foundation, National Research Council (Romania), Swiss National Science Foundation.

Recenzent međunarodnih znanstvenih časopisa

Crystal Growth & Design, Chemistry of Materials, Chemistry- A European Journal, The European Physical Journal, Journal of Alloys and Compounds, Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of the American Chemical Society, Materials Research Bulletin, Journal of Materials Chemistry A, C, Physica B, Dalton Transactions, Crystal Engineering Communications, Nanoscale, The Journal of Physical Chemistry C, Langmuir, Scripta Materialia Materials, Small, RSC Advances.

Cjelina B –Projektni prijedlog

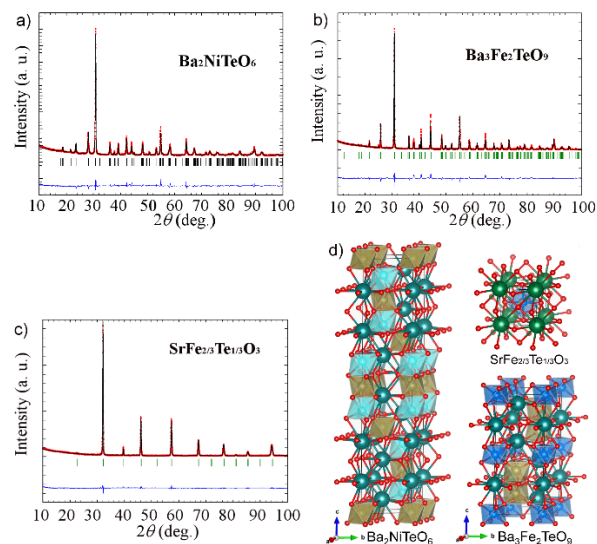
Dio a. Trenutno stanje u istraživanome području (opišite trenutno stanje u istraživanom području kroz izravnu povezanost s predloženim istraživanjem, opišite kako će predloženo istraživanje doprinijeti razvitku područja istraživanja te koji je jedinstveni doprinos predloženoga istraživanja).

Zbog postojećih trendova prema minijaturizaciji uređaja i povećanju gustoće zapisa podataka, glavni je današnji izazov u nanoelektronici postao dobivanje manjih podesivih uređaja s multifunkcionalnošću integriranom u jedan sustav materijala [1-5]. Kako su i feromagnetizam i feroelektricitet ključni u mnogim aspektima moderne tehnologije, zahtjevi za materijalima koji pokazuju oba svojstva predstavljaju veliku fundamentalnu i tehnološku važnost [4, 6-8]. Ipak, kad se u jednofaznom materijalu pojavljuje dva ili više fero-svojstava i ako su ta svojstva blisko povezana, takvo međudjelovanje može proizvesti novi učinak koji se manifestira kao električna polarizacija uslijed primjene magnetskoga polja ili, obratno, magnetizacija u električnom polju [9-12]. Stoga je očito da će istraživanje usmjereno dizajniranju novih multiferoičnih materijala biti prilika za razvoj učinkovite kontrole magnetizacije i polarizacije te pospješiti i dalje njihov razvoj. Ovo je istraživačko područje pokrenuto u u šezdesetim godinama prošlog stoljeća, međutim, ono je ponovno oživjelo 2003 godine. Izravan razlog za to bio je otkriće velike feroelektrične polarizacije u epitaksijalno sintetiziranom tankom filmu BiFeO_3 [13] i jake magnetoelektrične sprege u TbMnO_3 i TbMn_2O_5 [14, 15]. Ova su nova otkrića prekinula tradicionalno razmišljanje o multiferoicima i otvorila nova vrata industriji: *ako vanjska magnetska polja mogu kontrolirati naboj i primijenjeni napon može kontrolirati spinove – novi uređaji različitih funkcija mogu biti napravljeni*. Ipak, koegzistencija uređenoga električnoga dipola i uređenoga spina u jednom sustavu pokazala se jako teško izvedivom [16]. Štoviše, uspješna intrinzična kombinacija tih dvaju uređenja ne jamči jaku magnetoelektričnu spregu i odgovarajuću uzajamnu kontrolu, a što je upravo osnova željene multikontrole [17]. Nasuprot jednofaznim multiferoicima, multiferoični kompozitni materijali, koji sadrže i feroelektrične i feri/feromagnetske faze, tipično donose veliki odziv magnetoelektrične sprege na temperaturama višim od sobne što je vrlo poželjno za tehnološku primjenu [18]. Najjednostavniji pristup za postizanje multiferoičnosti u jednofaznom materijalu je kombinacija dviju strukturnih jedinica koje odvojeno funkcioniraju. Međutim, ovo ne dovodi nužno do jake magnetoelektrične sprege; poznati su primjeri borati poput $\text{GdFe}_3(\text{BO}_3)_4$ [19]. Značajan napredak ostvaren je zadnjih godina te su sintetizirani neki novi multiferoici u kojima je feroelektricitet induciran geometrijskim izobličenjem [20], spiralnim spinskim uređenjem [21] ili uređenjem naboja unutar struktura [22].

Većina novih publikacija koje opisuju multiferoike bazirana je na materijalima koji su strukturno slični perovskitima. Međutim, kao mogući kandidati za multiferoike postoji i obitelj kompleksnih oksida baziranih na teluriju koji imaju strukture slične ilmenitu i korundu. Na razini kristalokemije, takvi materijali imaju neke dodatne prednosti. Prvo, brojnost različitih kristalografskih kationskih mjesta veća je nego u perovskita (npr. 5 nezavisnih mjesta za Co u Co_3TeO_6 [23]), što povećava mogućnost supstitucija koje bi potakle magnetska međudjelovanja. Nadalje, za neke je od tih spojeva poznato da pokazuju nesrazmjerna polarna stanja koja mogu pogodovati sprezi između magnetskoga i feroelektričnoga uređenja [24]. Perovskiti koji sadrže Bi i Pb kao velike katione sa svojim $6s^2$ elektronima dobri su kandidati za pripremu magnetoelektrika perovskitnog tipa strukture [25]. Idealna perovskitna struktura sastava ABO_3 je kubična, ali se teško dobiva i obično se dobiva obilje deformiranih struktura [26]. Neki dvostruki perovskiti s različitim B-kationima $\text{A}_2\text{B}'\text{B}''\text{O}_6$ poznati su feroelektrici [24]. Uzimajući u obzir moguće kombinacije A i B kationa, mogu se očekivati mnogi članovi obitelji A_2BTeO_6 ili A_2BWO_6 , no samo su neki opisani u literaturi, uglavnom bez detaljne strukturne karakterizacije [11]. Međutim, prošla je istraživačka grupa predlagatelja ovog projekta posebno razvijenim sol-gel postupkom u vodenom mediju uspješno sintetizirala nekoliko spojeva baziranih na Te, A_2BTeO_6 i $\text{A}_3\text{B}_2\text{TeO}_9$ [11a]. Slika 1(d) prikazuje kristalne strukture pripremljenih spojeva s posebnim naglaskom na koordinacijski oktaedar oko B' i B'' mjesta. Primjerice, $\text{Ba}_3\text{Fe}_2\text{TeO}_9$ sa 6H-perovskitnom strukturom sastoji se od dimerskih jedinica koje dijele plohu $(\text{Fe,Te})\text{O}_6$ oktaedra, a dimeri su međusobno povezani duž osi c dijeleći jedan kut FeO_6 oktaedra, dok se u slučaju $\text{Ba}_2\text{NiTeO}_6$ struktura sastoji od trimera koji dijele plohu, $\text{Ni}_2\text{TeO}_{12}$, koji su povezani preko TeO_6 oktaedara tvoreći pritom tipični 12-slojni perovskitni motiv. Struktura $\text{SrFe}_{2/3}\text{Te}_{1/3}\text{O}_3$ može se opisati kao 3D mreža poliedara SrO_{12} koji dijele plohu

s izoliranim (Fe,Te)O₆ oktaedrima lociranim u središtu strukture. Slike 1(a)-1(c) pokazuju Rietveldovu metodu utočnjavanja proučavanih perovskita te pokazuju ispravni fazni sastav.

U skladu s poznatim kriterijem [9], ne bi bilo neobično da se pojave spontano polarizirana stanja u perovskitima koji sadrže Te^{VI} zbog razlike u veličini i valenciji između B' (magnetski aktivni ion) i B'' (Te^{VI}) iona. Može se pretpostaviti da je postojanje malih i jako nabijenih kationa Te čimbenik koji podupire nastanak električnoga dipola u strukturi. Slična argumentacija je vjerojatno prikladna i za perovskite koji sadrže W^{VI}.



Slika 1.: Rietveldova metoda utočnjavanja sintetiziranih spojeva: Ba₂NiTeO₆ (a), Ba₃Fe₂TeO₉ (b) i SrFe_{2/3}Te_{1/3}O₃ (c). (d) Kristalne strukture miješanih telurata Ba₂NiTeO₆, Ba₃Fe₂TeO₉ and SrFe_{2/3}Te_{1/3}O₃. Ba atomi prikazani su sivo-plavom bojom, Sr atomi zelenom, Te atomi zlatnom, Ni atomi tirkiznom a Fe atomi plavom. Oktaedarska mjesta B' i B'' atoma istaknuta su obojenim poliedrom.

Kao što je zamjetno u literaturi, prvootkriveni i najbolje istraženi multiferoični sustavi i dalje pripadaju anorganskim spojevima [24]. Međutim, u zadnje se vrijeme područje istraživanja proširilo i na organske spojeve [27]: kombinacija ovih dviju grupa spojeva otvorila je nove puteve postizanja multiferoičnosti uključujući organsko-anorganske hibride i metaloorganske mreže (MOF-ove) [28]. MOF-ovi prednjače u hibridnim materijalima i privlače široku pažnju jer uživaju prednosti i s organske (kiralnost i prilagodljivost) i s anorganske strane (svojstva *d* i *f* podljusaka potrebna za magnetizam) što spojeno u jedno daje materijale koji imaju velike stabilnosti, podesive metrike, organsku funkcionalnost i poroznost [29-34]. Jedno od prvih istraživanja magnetskih i feroelektričkih svojstava MOF-ova izvedeno je na obitelji metanoata; Kobayashi *et al.* pronašli su feroelektricitet u poroznoj mreži [Mn₃(HCOO)₆] s vodom, metanolom i etanolom kao polarnim gostima [35, 36]. Cheetham *et al.* izvještavaju o klasi multiferoičnih MOF-ova tipa [(CH₃)₂NH₂][M(HCOO)₃] (*M* = Mn, Fe, Co, Ni i Zn) [37, 38] u kojima magnetski članovi pokazuju magnetizam od 8 do 36 K i antiferoelektričnost od 160 do 185 K [39]. Nedavno Stroppa, Jain i suradnici [40] izvješćuju o možda i prvom pravom multiferoičnom metaloorganskom sustavu [(CH₃)₂NH₂][Cu(HCOO)₃] u kojem Jahn-Tellerov učinak i antiferodistorzije međudjeluju potičući feroelektričnu polarizaciju koja je spregnuta sa slabim feromagnetizmom sustava. Teoretski predviđaju i to da bi sustav baziran na Cr, perovskitne ABX₃ topologije [C(NH₂)₃]M[(HCOO)₃], trebao biti novi hibridni multiferoik s vrlo velikim slabo-feromagnetskim komponentama spregnutim u feroelektricitet [41]. Isti autori proveli su i DFT simulacije na novim MOF-ovima koji sadrže Mn [CH₃CH₂NH₃][Mn[(HCOO)₃] i pokazali da dipolni momenti organskih A-kationa povećavaju feroelektričnu polarizaciju za 2 μC/cm² dok odabirom drugačijih organskih A-kationa postoji mogućnost podešavanja feroelektrične polarizacije i njena povećavanja čak do 6 μC/cm² [42]. Veliki magnetoelektrični učinak opažen je i za [(CH₃)₂NH₂][Fe(HCOO)₃] gdje osrednje električno polje od 3.3 kV/cm može inducirati jaku promjenu (više od 50 %) u magnetizaciji [43]. Opažen magnetoelektrični učinak povezan je s pozicioniranjem vodikovih mostova koji su pomaknuti električnim poljem

tijekom hlađenja. Korelacija između vodikovih mostova i magnetskog reda može se razumjeti u okvirima utjecaja vodikovih mostova na put superzamjene (Fe-O-C-O-Fe) [44]. Postalo je očito da je za MOF-ove perovskitne ABX_3 topologije, gdje metalni kationi povezani ligandima tvore BX_3 kostur, a amonijevi ioni zauzimaju šupljine, moguće iskoristiti velike razlike A ili X organskih grupa kako bi se podesila multiferoična svojstva. Gao i suradnici objavili su da metanoatne strukture tipa $[NH_4][M(HCOO)_3]$ ($M = Mn, Fe, Co, Ni$ i Zn) pokazuju paraelektrične i feroelektrične fazne prijelaze između 191 i 254 K, a koji su pokrenuti prijelazima red-nered amonijevih kationa i njihovim razmještajem u strukturnim kanalima, u kombinaciji sa „spin canted“ antiferomagnetskim uređenjem od 8 do 30 K [45]. Nekoliko je grupa istraživalo funkcionalne metal-metanoat sustave s različitim protoniranim aminima kao što su metilamonij $CH_3NH_3^+$ [46], azetidinijev kation u $[(CH_2)_3NH_2][Cu(HCOO)_3]$ [47], gvanidijev kation u $[C(NH_2)_3][Cu(HCOO)_3]$ [48] kao i veće linerane protonirane di-, tri- i tetraamine (poput *N,N*-dimetiletilediamina) [49-51]. Svi spomenuti MOF-ovi privlače pažnju radi velikih dielektričkih anomalija i magnetoelektričnog multiferoiciteta. Nedavno je pronađen i novi manganov metanoat $(C_3N_2H_5)[Mn(HCOO)_3]$, koji sadrži kation s peteročlanim imidazolskim prstenom [52]. Pri niskim temperaturama, imidazolski kationi pokazuju kooperativno uređenje koje rezultira antiparalelnim uređenjem njihovih električnih dipolnih momenata. Dodatno, ovaj spoj Mn(II) je antiferomagnetičan ispod 9 K, s lagano nekolinearnim rasporedom svojih magnetskih momenata što vodi k slabom feromagnetizmu.

Pronađeno je i da glomazni aminH⁺ kationi poput $(CH_3CH_2)_3NH^+$ djeluju kao negativni predlošci i uzrokuju nastajanje porozne strukture tipa $[M_3(HCOO)_6]$ [36, 53]. Sinteza, kristalne strukture, dielektrična i magnetska svojstva nove serije amonijevih metalnih metanoata tipa $[HONH_3][M(HCOO)_3]$ gdje je $M = Mn, Co, Ni, Zn$ i Mg također su već objavljena [54]. No, veći $HONH_3^+$ ioni u usporedbi s NH_4^+ rezultiraju jednostavnim dielektričnim svojstvima bez faznih prijelaza.

Tri magnetska iona (Mn, Co i Ni) pokazuju antiferomagnetsko dalekodosežno uređenje spin-canting pri Neelovim temperaturama od 8.8 K (Mn), 10.9 K (Co) i 30.5 K (Ni) i slabu spontanu magnetizaciju s Mn i Ni i jaku s Co. Izvješteno je i o ugrađivanju hidrazinija kao kationa u amonij-metal-metanoat strukturu tipa $[NH_2NH_3][M(HCOO)_3]$ ($M = Mn, Zn, Co, Mg$) [55] uz spontane polarizacijske vrijednosti procijenjene na 3.58 (Mn, 110 K), 3.48 (Zn, 110 K), 2.61 (Co, 405 K) i 3.44 (Mg, 400 K) $\mu C/cm^2$ na osnovu razdvajanja naboja u polarnim strukturama. Spojevi s Mn i Co pokazuju spin-canted antiferomagnetsko dalekodosežno uređenje pri Néelovim temperaturama od 7.9 i 13.9 K. Stoga takve grupe spojeva pokazuju koegzistenciju električnih i magnetskih uređenja pri niskim temperaturama.

Iz ovog kratkog pregleda literature, vjerujemo da je pouzdano ustvrditi kako kemija MOF-ova, bogata, fleksibilna i raznolika, nudi privlačnu platformu u potrazi za intrinzičnim multiferoičnim sustavima. To je stoga jer je unutar MOF-ovih sistema moguće kontrolirati prirodu magnetske sprege zbog integriranja različitih metalnih iona, kratkih liganada, koliganada, predložaka (templata) te čak i radikalskih liganada koji sadrže određen stupanj spinske slobode [56]. Nedavno su sintetizirani azidom premošćeni (umjesto metanoata) perovskitni spojevi tipa $[(CH_3)_nNH_{4-n}][Mn(N_3)_3]$ ($n = 1-4$). Ti spojevi pokazuju magnetsko uređenje koje ovisi o vrsti kationa pri do 92 K [57]. Također, sustavi s vodikovim mostovima i/ili polarnim komponentama potrebnim za fero/antiferomagnetične materijale [27, 38, 58] mogu se sintetizirati i kontrolirati ako se pažljivo biraju njihovi dijelovi. Perovskitna arhitektura u organsko-anorganskim hibridima vodi k dodatnim molekularnim multiferoicima na temperaturama iznad sobne kao što su trietilamonijev tetrabromferat(III) s feroelektričnim i magnetskim faznim prijelazom pri cca. 360 K što rezultira jakim magnetodielektričnom spregom [59] [60].

Dio b. Ciljevi (opišite znanstvene ciljeve i očekivane rezultate)

Glavni cilj ovoga ambicioznoga i sveobuhvatnog projekta je razvoj novih složenih multiferoičnih materijala u smislu kemijskoga sastava, topologije i kristalne strukture. Ovim projektom predlažemo nastavak istraživanja koje je zasnovano na trenutno najsuvremenijim metodama sinteze u području spojeva perovskitnih arhitektura i daljnje istraživanje dizajniranjem novih MOF-ova upotrebom raznih još neistraženih ili barem nedovoljno istraženih strukturnih jedinica. Istraživački je plan dalje podijeljen u nekoliko glavnih koraka pri čemu svaki korak korespondira s obitelji ciljanih multiferoika bilo nekoliko grupa anorganskih kompleksnih oksida temeljenih na Te/W bilo različitim grupama multiferoičnih MOF-kandidata.

Teluratni/volframatni kompleksi dizajnirat će se u skladu sa sljedećim općim kemijskim formulama:

i) $A_2B(\text{Te/W})O_6$ (A = Ba, Pb, Sr, Ca; B = Mn, Cu, Co, Ni);

ii) $A_3B_2(\text{Te/W})O_9$ (A = Ba, Pb, Sr, Ca, Cd; B = Fe, Co, Ni, Cr, Mn).

Postojeći podaci o strukturnim, magnetskim i dielektričnim svojstvima ovih perovskita su rijetki te su stoga nužna daljnja detaljna istraživanja radi postizanja boljeg razumijevanja odnosa između strukture i svojstava. Perovskitni oksidi bazirani na željezu tipa $A_3\text{Fe}_2\text{TeO}_9$ (A = Ba, Sr, Ca, Cd) pokazuju prilično neobična magnetska svojstva [61, 62]. Pokazano je da magnetske karakteristike jako koreliraju sa stupnjem kemijskog reda u B-podrešetki između paramagnetskih i dijamagnetskih kationa. Međutim, trenutno dostupni eksperimentalni podaci nisu dostatni da bi se napravila korelacija između dielektričnih/magnetskih svojstava i strukturalnog izobličenja.

Dio projekta vezan za MOF-ove realizirat će se dizajniranjem sljedećih hibrida definiranih prema strukturnim jedinicama:

- i) **Troatomni ligandi poput cijanata, tiocijanata i selenocijanata (OCN^- , SCN^- , SeCN^-) kao i hidrogencijanamida NCNH^- i dicijanamida $\text{N}(\text{CN})_2^-$.** Ovi troatomni mostovi, poput metanoata, pokazuju jako bogatu i različitu koordinaciju te mogućnosti premoštavanja metalnih centara, što ih čini pogodnim za izgradnju različitih zanimljivih struktura; nisu predugi za magnetsko sprezanje i omogućavaju osrednje ili jako fero- ili antiferomagnetsko međudjelovanje [63].
- ii) **Kombinacija troatomnih liganada s ligandima poput glicinata ($\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-$) i propanoata ($\text{C}_2\text{H}_5\text{COO}^-$) koja može voditi k feroelektricitetu.** Magnetsko sprezanje spinova na većoj udaljenosti, što obično znači da su uključene više od 4 jednostruke veze, može biti jako slabo. Stoga, posve očekivano, većina multiferoičnih MOF-ova koristi metanoatne ili katkad azidne ligande. Druga je mogućnost, koju i predlažemo, priprema MOF-ova kombinacijom kratkih liganada koji omogućuju magnetsku spregu s ligandima za koje se zna da mogu prozvesti polarizaciju. Nekoliko spojeva s glicinom pokazuje dobru feroelektričnost [64]. Izvor njihove feroelektričnosti je ponajviše povezan s nerigidnošću zwitteriona glicina koji se lako transformiraju među brojnim rotacijskim konformerima zbog triju unutrašnjih rotacijskih stupnjeva slobode [65]. Slično kao s derivatima glicina, red-nered promjene terminalnih metilnih grupa propanoata imaju ključnu ulogu u feroelektričnim faznim prijelazima [65].
- iii) **Templatni kationi bazirani na različito supstituiranim sekundarnim ($\text{R}_1\text{R}_2\text{NH}$) i tercijskim aminima ($\text{R}_1\text{R}_2\text{R}_3\text{N}$), diaminima, poliaminima i različitim cikličkim aminima.** Templatna sinteza od velike je važnosti u modernoj kemiji. Dok koligandi mogu imati nekakav templatni učinak, kationi (ili anioni) mogu djelovati kao predložci koji usmjeravaju reakciju k nastajanju antionskih (kationskih) metaloorganskih mreža specijalnih struktura i privlačnoga magnetskog ponašanja [66, 67]. Metil- i etil-supstituirani monoamini dosta su istraživani kod multiferoičnih MOF-ova s metanskom kiselinom, a i dalje različito supstituiranim aminima (no ne tako glomaznim kao $(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2)\text{NH}^+$) kao i s cikličkim aminima i dalje pružaju nove mogućnosti istraživanja posebno u sprezi s ostalim troatomnim ligandima i/ili propanoatnim ili glicinatnim ligandima. Također, multiferoično ponašanje hibridnih organsko-anorganskih spojeva tipa $[\text{aminH}^+]_2\text{M}^{\text{III}}\text{X}_4$ ili $[\text{aminH}^+]\text{M}^{\text{III}}\text{X}_4$ obično se istražuju korištenjem jednostavnih monoamina dok su ostale mogućnosti rijetko istraživane.
- iv) **Prijelazni metalni centri poput V^{2+} i Cr^{2+} osjetljivi na zrak i $4d/5d$ prijelazni metali.** Manje ili više svi dosad poznati multiferoični MOF-ovi sadrže $3d$ prijelazne metale dok je istraživanje $4d/5d$ metala znatno manje razvijeno.
- v) **Razrijeđeni magnetski sustavi.** Dok je većina razrijeđenih magnetskih sustava koja se dosad istraživala čisto anorganska (npr. oksidi, fluoridi, hidroksidi ili poluvodiči i metalne i intermetalne faze), istraživanje na molekularnim sustavima dosta je ograničeno mada je poznato da takvi sustavi, u kojima su magnetične komponente zamijenjene ili razrijeđene nemagnetičnima, postupno prekidaju sprezanje ili međudjelovanje između magnetskih mjesta vodeći k promjeni i razvoju magnetskih struktura i svojstava [68].

Postoji svega nekoliko radova o razrijeđenim multiferoičnim MOF-ovima i to su: $[\text{CH}_3\text{NH}_3][\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}(\text{HCOO})_3]$, $[\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2][\text{FeIIIMI}(\text{HCOO})_6]$ ($M = \text{Mg, Mn, Fe, Co, Ni, Zn}$) $[\text{NH}_4][\text{M}_x\text{Zn}_{1-x}(\text{HCOO})_3]$ ($M = \text{Mn, Fe, Co}$) [69-71]. Uistinu, nakon razređenja cinka $[\text{NH}_4][\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}(\text{HCOO})_3]$ pokazuje sustavno smanjenje temperature pri faznim prijelazima od para- prema feroelektričnim fazama.

Uz nove MOF-ove, posebna će pažnja u ovom projektu biti posvećena dizajniranju novih organsko-anorganskih hibrida unutar obitelji $[\text{aminH}^+]_2\text{M}^{\text{II}}\text{X}_4$ i $[\text{aminH}^+]\text{M}^{\text{III}}\text{X}_4$ gdje je $M = 3d/4d$, a $X = \text{Cl, Br, I}$. Kako je nađeno u literaturi [60], ova klasa materijala predstavlja potencijalno vrlo privlačnu platformu za zanimljivo električno i magnetsko ponašanje. Novi hibridni materijali stvarat će se korištenjem različitih organskih kationa i razrijeđenih metalnih centara koji će se, nadajmo se, tijekom naših istraživanja MOF-ova, pokazati dobrim izborom za laku manipulaciju rezultirajućih struktura i njihovih magnetskih i električnih ponašanja.

Zaključno, glavni cilj predloženog projekta je istraživanje novih multiferoičnih materijala unutar metaloorganskih mreža te organsko-anorganskih hibrida. Nasuprot čisto anorganskih multiferoika, naši će materijali pokazati nova svojstva koja će ovisiti o prirodi metalnih centara, organskih kationa i prikladnih liganada. Planiramo ne samo proizvesti nove materijale nego i primijeniti različite analitičke tehnike radi utvrđivanja njihovih struktura i razumijevanja odnosa struktura i svojstava. Pored proširenja općeg znanja čovječanstva, ova bi istraživanja trebala pozitivno utjecati na racionalnije planiranje novih struktura/sustava u praktičnoj primjeni. Radi učinkovita razvoja fundamentalne znanosti i tehnologije u području novih magnetoelektrika privlačnih funkcionalnosti, međudjelovanja između električne polarizacije i spontane magnetizacije su ključna. No, usprkos svim dosašnjim nastojanjima tijekom prošle dekade, naše znanje o osnovama magnetoelektrike i dalje su ograničena. Nitko ne može sa sigurnošću pretpostaviti koji će materijal imati magnetoelektrična svojstva samo na osnovi teoretskih predviđanja ili, još važnije, podesiti njihova fizikalno-kemijska svojstva po želji bez skupe metode pokušaja i pogrešaka. Stoga su empirijska istraživanja važna i široko primjenjiva u potrazi za novim naprednim materijalima. Znanstveno istraživanje usmjereno k razvoju i ugađanju empirijskih pravila baziranih na kristalokemijskom pristupu stoga su vrlo važna.

Dio c. Metodologija

Istraživačka aktivnost unutar projekta pokrit će sve faze dizajniranja ciljanih spojeva, njihovu detaljnu strukturnu karakterizaciju i proučavanje njihovih magnetskih, električnih i spregnutih magnetoelektričnih svojstava.

1) Sinteza MOF-ova, organsko-anorganskih hibrida, volframata i telurata (u obliku monokristala i praha)

Koristit ćemo dva sintetska pristupa uglavnom primjenom termalne sinteze u otopinama (put kemije otopina) i mehanokemije kao dodatna pristupa. Napredna karakterizacija će poduprijeti rad, od sinteze, preko strukturnih fizikalno-kemijskih istraživanja produkata k mjerenjima električnih i magnetskih svojstava dobivenih krutina.

Solvotermalna sinteza (termalna sinteza u otopinama)

Reakcije solvotermalne sinteze su najčešće korištene te postoji dobro ustanovljena procedura za proizvodnju poroznih krutina poput MOF-ova. Ligandi, metalne prekursorske soli i amini (katkad će biti potrebna hidroliza amida), kombinirat će se u prisustvu različitih otapala te će biti tretirani pri različitim temperaturama u autoklavima pri autogenim tlakovima. Odabir otapala ovisit će o topljivosti izabrane metalne soli i organskoga prekursora u pojedinom otapalu. Tipično će se koristiti različiti alkoholi, DMSO, DMF, THF, dioksan i ostala polarna otapala. Ovim postupkom se očekuju visoki prinosi kristalnih produkata MOF-ova.

Mljevenje kugličnim mlinom (mehanokemijska sinteza)

Otvorene metalne strukture mogu se lako pripremiti mljevenjem kugličnim mlinom uz prednost da se ne koristi otapalo [72] mada ćemo dodavati i otapalo kao dodatnu komponentu radi mljevenja potpomognutog otapalom [73, 74]; u određenim slučajevima mljevenje će se izvoditi u prisustvu katalitičke količine jednostavnih anorganskih soli [74]. Standardna

procedura mljevenja koristit će se s posudicama i kuglicama od čelika, volframova karbida ili cirkonijeva oksida. Kako bi se postigli optimalni uvjeti sinteze, istraživat će se utjecaj drugih parametara na mehanokemijski postupak poput omjera smjese i mase kuglica, brzina vrtnje i ukupnog vremena mljevenja. Novi razvoj ove tehnike omogućuje promatranje mehanokemijskih pretvorbi u stvarnom vremenu pomoću izravne difrakcije visokoenergetskog sinkrotronskog X-zračenja [75]. Profil reakcije, stvaranje međuprodukata i međukonverzija topologije okvira dostupna je bez utjecaja na postupak mljevenja. Eksperimentalna postavka dostupna je s visokoenergijskom linijom zračenja ID15 na ESRF-u koju planiramo primijeniti po potrebi.

Sinteza kompleksnih telurata i volframata (u obliku praha)

Dva sintetska protokola primijenit će se za ovu sintezu: sol-gel postupak u prisustvu i odsustvu vode te sol-gel postupak potpomognut mikrovalovima. Sol-gel postupak u prisustvu vode poznat je kao ekološki prihvatljiv jer se kao otapalo koristi destilirana voda. Konačni spoj proizvodi se pomoću niza kemijskih reakcija uključujući hidrolizu početnih molekularnih prekursora i kasniju polikondenzaciju. Takav set reakcija relativno je brz s čestim pojavljivanjem amorfne materijala pa je naknadni toplinski tretman neizbježan radi postizanja kristaliničnosti. Put koji najviše obećava je sol-gel tehnika preko polimerizirajućeg kompleksa (PC) ili citratni put. Korištenjem sol-gel tehnika, dobivaju se prilično složeni miješani oksidni prahovi manjih veličina čestica i visoke kristaliničnosti. Kalcinacija je brza, a koriste se i relativno niske temperature u usporedbi s onima potrebnim za reakcije u čvrstom stanju.

No, zbog velikih brzina reakcije, često se događa formiranje amorfne konačnog produkta. S druge strane, u odsustvu vode događa se reakcija molekularnog metalnog oksida kao prekursora s organskim otapalom. Prednost ovoga puta povezana je s funkcijom organske komponente u reakcijskoj smjesi. Ne radi se samo o agensu koji unosi kisik potreban za metalni oksid već i o agensu koji jako utječe na konačnu morfologiju dobivenoga nanokristala, na površinska svojstva, sastav i kristalnu strukturu. Niske brzine reakcije, koje su posljedica umjerene reaktivnosti C-O veze, u kombinaciji sa stabilizirajućim učinkom organskih vrsta vode k stvaranju visokokristaliničnih produkata s jednolikom čestičnom morfologijom i veličinom čestica na nanoskali. Kako bi se ubrzao sintetski dio ovoga istraživanja, bit će korišten dodatni put u vidu sol-gel postupka potpomognutoga mikrovalovima [76]. Prednost ove metode je ta da lokalno superzagrijavanje otapala ili organskoga liganda vodi k "vrućim točkama" koje iniciraju kristalni rast diljem sustava. Nakon što kristalno sjeme počne rasti, prisutni se reaktant brzo troši. Veličina kristala može, stoga, biti varirana prilagođavanjem koncentracije reaktanata. Sposobnost mikrovalne tehnike da nadzire nukleacijski proces vodi k uskoj raspodjeli veličine čestica jer svi kristali nastaju odjednom.

(2) Rendgenska difrakcija, neutronska difrakcija te spektroskopske i termalne metode

Određivanje kristalne strukture

Očekuje se da će uzorci MOF-ova sintetizirani kemijom otopina kristalizirati kao monokristali pogodni za određivanje kristalne strukture. Za strukturnu karakterizaciju novih spojeva koristit će se difrakcija rendgenskoga zračenja na monokristalnom uzorku (XRD). Temperaturni raspon koji je na raspolaganju za mjerenje je između 90 i 400 K. Mali kristali, nepogodni za snimanje difrakcijom na monokristalu, mjerit će se pomoću CuK α zračenja dok će se MoK α zračenje koristiti za veće kristalite. Uzorci koji su nestabilni na zraku, ako budu pripremljeni, mjerit će se pri 90 K. U slučaju faznoga prijelaza, visokotemperaturne faze mjerit će se pri temperaturama do 400 K. Radi određivanja apsolutne strukture (po potrebi) Friedelovi će se parovi mjeriti korištenjem CuK α zračenja. Difraktometri su dostupni na Institutu "Ruđer Bošković" i mogu se koristiti uz malu naknadu.

Miješani teluratni i volframatni oksidi pripređivat će se u formi praha. Određivanje kristalne strukture iz polikristalnog uzorka pomoću difrakcije rendgenskoga zračenja na prahu (XRPD) i dalje predstavljaju izazov, ali i pružaju alternativu objašnjavanju onog dijela strukture uzorka koji se ne može dobiti iz monokristalnoga uzorka. U zadnjih nekoliko godina, kristalografija polikristalnih uzoraka je procvjetala primarno zahvaljujući razvoju instrumentacije kao i stalnom rastu broja učinkovitih i brzih metoda za odrađivanje kristalnih struktura prilagođenih polikristalnim uzorcima (direktna metode, „simulated annealing“, „big-bang big-crush“,

„genetic algorithm“, „charge flipping“ [77-82]). Indeksiranje uzoraka polikristalnih ogiba i određivanje parametara jedinične ćelije provest će se algoritmom NTREOR. Strukture polikristalnih uzoraka rješavat će se: *i*) direktnim metodama i/ili globalnom optimizacijom ugrađenom u paket EXPO [81], *ii*) direktnom prostornom metodom ugrađenom u program FOX [80]. Kad se budemo bavili težim strukturama, radit će se DFT izračuni kako bi se izabrala ispravna među sličnim i/ili jednako vjerojatnim strukturama koje nudi XRPD [83, 84]. Spomenuti softver, tj. računalne metode koje su ugrađene u nj, predstavljaju 5 vrhunskih alata dostupnih modernoj kristalografiji polikristalnih uzoraka. Strukturni modeli razrađivat će se pomoću HighScore Xpert Plus, TOPAS i Fullprofa [85]. Difraktometar praha dostupan za potrebe projekta nalazi se na Fizičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkoga fakulteta Sveučilišta u Zagrebu u nadležnosti dr. sc. Mirjane Bijelić, članice našeg projektnog tima.

Mikrostrukturalna karakterizacija

Ispitivanje mikrostrukture je važan dio pune strukturne karakterizacije sintetiziranih materijala napose onog u formi praha kad pojedini kristali zalaze u submikronske i nano veličine. Pretražna elektronska mikroskopija (SEM) koristit će se odmah po XRD analizi radi određivanja morfologije sintetiziranih prahova. Transmisijska elektronska mikroskopija (TEM) također će se koristiti u svrhu proučavanja morfologije i lokalne kristaliničnosti. Elementno mapiranje dodatno će se primijeniti za kompleksne teluratne (volframatne) prahove radi određivanja prostorne raspodjele elemenata. Potonje je posebno značajno u slučajevima uočavanja manjih faza XRD-om te će i ovako morfologija i kristaliničnost biti identificirani. Poradi realizacije ovog dijela projekta, na raspolaganju nam stoje dva napredna instrumenta: C_s - corrected TEM (JEOL AR-STEM) lociran na Kemijskom institutu u Ljubljani, Slovenija i SEM (FE-SEM JSM 7000F) na Institutu Ruđer Bošković.

Neutronska difrakcija

Neutronska difrakcija na prahu (NPD) važna je strukturalna proba za nedijamagnetske, a posebno multiferoične materijale. Zbog razlika između neutronske raspršenja kationa na B-mjestu, Te/W, i kisika, NPD će dati točnu informaciju o kemijskom sastavu, položajima atoma i stehiometriji. Uloga strukturalnih promjena magnetskih i dielektričkih svojstava ovih magnetoelektrika nije jasna. Stoga je precizno poznavanje nuklearnih i magnetskih struktura ovih spojeva od presudne važnosti za interpretaciju feriočnih i magnetskih svojstava. Skupljanjem podataka s NPD-a u temperaturnom rasponu od 1.5 do 295 K, magnetska struktura bit će posve određena.

Termalne i spektroskopske metode

Istovremena termalna gravimetrijska analiza (TGA) i diferencijalna termalna analiza (DTA), tijekom grijanja i hlađenja, neće se koristiti samo za procjenu sadržaja hlapljivih komponenata, termalne stabilnosti ili razgradnih karakteristika metalnih kompleksa već i za određivanje faznih prijelaza, kristaliničnosti ili oksidacijsko-redukcijskih procesa. Spektroskopska karakterizacija će se također provesti te će se u tu svrhu koristiti FTIR i Ramanska spektroskopija.

U ovu svrhu koristit će se sljedeći instrumenti:

- Mettler-Toledo TGA/DSC System (do 1600 °C)
- Shimadzu FTIR 8400S (4000-450 cm^{-1})
- Ramanski spektrometar (HORIBA Jobin Yvon model T64000).

Određivanje poroznosti i specifične površine materijala

Poroznost je jedna od najvažnijih karakteristika MOF materijala. Sinteza MOF-a uobičajeno rezultira nastankom poroznih kristalnih materijala čija struktura se može odrediti rendgenskom strukturnom analizom. Međutim, vrlo je velika vjerojatnost da će prilikom sinteze većih količina materijala (posebno ukoliko se koristi drugačija metodologija sinteze) nastati određene razlike u odnosu na strukturu jediničnog kristala; primjerice smanjenje volumena pora zbog prisustva otapala s niskim tlakom para, urušavanje pora, prisutnost molekula otapala u porama, prožimanje dviju mreža (interpenetracija) i drugo. Upravo iz navedenih razloga potrebno je koristiti napredne metode za određivanje karakteristika poroznih materijala (volumena,

veliĉine i distribucije veliĉine pora i površine materijala). Uobiĉajena metoda za određivanje ovih svojstava je mjerenje adsorpcijske izoterme koristeći neki plin kao adsorbens pri ĉemu se moŹe odrediti tip poroznosti (uspoređujući rezultate s IUPAC-ovom klasifikacijom). Adsorpcijska izoterma se moŹe odrediti pomoću instrumenata za određivanje veliĉine pora i površine (poznati kao BET). Dobiveni podaci se mogu analizirati dobro poznatom BET metodom (koristi se za određivanje površine), a veliĉina i volume pora mogu se odrediti razliĉitim matematiĉkim izvodima (npr. Horvath-Kawozoe, Saito-Foley za distribuciju veliĉine pora i GCMS simulacija za određivanje volumena pora). U kontekstu projekta SOLFERROMAT ova mjerenja mogu biti vrlo korisna za usporedbu karaktera pora i površine materijala s fizikalnim svojstvima kao Źto su magnetska i elektriĉna. Također, ovom metodom moŹe se usporediti karakter pora MOF-a dobivenih razliĉitim sintetskim postupcima (mehanokemijski i solvatotermalno).

(3) Mjerenje magnetskih i elektriĉnih svojstava

Mjerenje magnetskih i elektriĉnih svojstava i naknadna analiza njihovih korelacija sa strukturnim i mikrostrukturnim parametrima od presudne je vaŹnosti za projekt.

Detaljno magnetsko istraŹivanje poput ovisnosti magnetizacije o temperaturi, izotermalne magnetizacijske krivulje pri razliĉitim temperaturama, AC osjetljivost u širokom rasponu temperatura i razliĉitih frekvencija primijenjenih magnetskih polja dat će informaciju o magnetskim momentima/valentnim stanjima iona prijelaznih metala, jakosti mogućih meĹudjelovanja razmjene, temperaturama magnetskih prijelaza, koercitivnosti i remanencije te konstante anizotropije.

Magnetska svojstva istraŹivat će se na IMFM-u pod vodstvom Prof. dr. Zvonka Jagliĉića pomoću komercijalnog:

- Quantum Design MPMS-XL-5 SQUID magnetometra koji radi u rasponu od 2 K i 400 K u magnetskom polju do 5 T.

Za bazna elektriĉna i prijenosna svojstva materijala poput otpornosti, magnetootpornosti, Hallovog koeficijenta i termosnage koristit će se:

- Quantum Design PPMS sustav opremljen s 9 T supervodljivim magnetom koji radi u temperaturnom rasponu od 2 do 400 K.

Ne postoji dostupan komercijalan sustav za mjerenje magnetoelektriĉnog (ME) uĉinka. Stoga će se koristiti ruĉno izraĹden modul kao nadopuna MPMS-XL-5 SQUID magnetometra koji se već koristi u IMFM-u [86]. Modul omogućava prouĉavanje magnetskih svojstava materijala u prisustvu elektriĉnog polja i obratno: određivanje dielektriĉne konstante (Agilent 4192A LF LCR meter) pri korištenju MPMS-XL-5 kao izvora magnetskoga polja i kao ureĹaj za preciznu kontrolu temperature.

Dio d. Radni plan

PredloŹeni projekt je vrlo sloŹen, posljediĉno tome izazovan te se tematski i metodološki moŹe svrstati u nekoliko znanstvenih grana (fizika kondenzirane tvari, kemija ĉvrstog stanja, kemija materijala, znanost o materijalima) polja kemije i fizike, pa sukladno svojoj sloŹenosti ukljuĉuje više istraŹivaĉkih timova (2 iz Osijeka, 2 iz Zagreba i 1 iz Ljubljane) ĉiji su ĉlanovi:

Izv. prof. dr. sc. Igor Đerđ (Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku)

Doc. dr. sc. Berislav Marković (Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku)

Doc. dr. sc. Elvira Kovaĉ Andrić (Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku)

Dr. sc. Tomislav Balić, viši asistent (Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku)

Dr. sc. Brunislav Matasović, stručni suradnik (Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku)

Anamarija Šter, doktorand (Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku)

Doc. dr. sc. Dajana Gašo Sokaĉ (Prehrambeno-tehnološki fakultet Osijek)

Dr. sc. Goran Štefanić, znanstveni savjetnik (Institut Ruđer Bošković)

Dr. sc. Davor Ristić, znanstveni suradnik (Institut Ruđer Bošković)

Dr. sc. Mirjana Bijelić, viši tehničar (Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu)

Prof. dr. sc. Zvonko Jagličić (Institut za matematiku, fiziku in mehaniku, Univerza v Ljubljani).

I. Đerđ, M. Bijelić i Z. Jagličić su nedavno uspješno okončali istraživačku suradnju na znanstvenom projektu naziva: „Multifunctional complex metal tellurates: Structure property relationship study“ financiranom od strane *Unity through Knowledge Fund-a* što je rezultiralo objavom jedne znanstvene publikacije u časopisu visokog faktora odjeka (4.891), te drugoj publikaciji u postupku objavljivanja. I. Đerđ, G. Štefanić, B. Marković su trenutno angažirani na projektu istraživanja fotokatalitičkih svojstava različitih dopiranih nanostrukture tankih filmova ZnO, projektu koji je s jučerašnjim datumom (31. 05. 2016.) uspješno okončan s nekoliko kvalitetnih publikacija i jednom publikacijom u postupku objavljivanja u časopisu *Journal of Catalysis*. Bitno je konačno spomenuti da I. Đerđ i Z. Jagličić vrlo uspješno surađuju od 2006. godine na različitim projektima dizajna i istraživanja magnetskih materijala (13 zajedničkih publikacija ukupne citiranosti 334 puta).

Sve ove navedene prethodne uspješne suradnje pojedinih članova projektnog tima dokazuju efikasnost i međusobnu kompatibilnost i komplementarnost. Voditelj izv. prof. dr. sc. Igor Đerđ izdvojiti će minimalno 60% radnog vremena za provedbu projekta, T. Balić 40%, B. Marković, B. Matasović i G. Štefanić 30%, Z. Jagličić, M. Bijelić, E. Kovač Andrić i A. Šter 20% te D. Gašo Sokač i D. Ristić 10%.

U okviru projekta bit će zaposlen i doktorski student koji će aktivno sudjelovati u aktivnostima projekta. Zaduženja dokorskog studenta nisu specifično navedena u radnom planu jer se ne želi prejudicirati odluka o *a priori* odobrenju dodatnih sredstva HRZZ-a za zapošljavanje doktoranda koja će eventualno biti odobrena temeljem raspisa novog natječaja za financiranje doktorskih studenata. Smatra se da ostvarenje ciljeva iz radnog plana mogu garantirati isključivo članovi projektnog tima s dokazanom ekspertizom te da izvedivost projekta ne smije ovisiti o eventualnom angažmanu dokorskog studenta - stoga je radni plan takvim i načinjen. Također, treba imati na umu će doktorand tijekom prve godine trajanja projekta biti poprilično okupiran obavezama na doktorskom studiju Anorganske i strukturne kemije na PMF-u u Zagrebu (prisustvovanje na kolegijima, polaganje ispita i pisanje seminarskih radova). Očekuje se da će se krajem prve projektne godine vrlo intenzivno priključiti u većini aspekata istraživanja u okviru projekta, konkretno: sinteza telurata i volframata metodama otopinske kemije, sinteza određenih anorgansko-organskih hibrida solvotermalnom metodom, prikupljanje i obrada podataka PXRD, Rietveldova analiza, te interpretacija sveukupnih rezultata. Očekuje se da će do kraja treće projektne godine prikupiti većinu rezultata potrebnih za pisanje doktorske disertacije.

Plan aktivnosti, vezanih uz gore opisane specifične ciljeve istraživanja detaljno je razrađen u priloženom posebnom tabularnom dokumentu, te bismo ovdje dodatno komentirali faze realizacije projekta. Generalno projekt će se realizirati sekvencijalno pri čemu se izmjenjuju faze sinteze, strukturne karakterizacije, ispitivanja termičke stabilnosti, poroznosti te mjerenja magnetskih, dielektričnih i magnetoelektričnih svojstava.

1. Sinteza telurata, volframata i anorgansko-organskih hibrida (metaloorganske mreže) - zaduženi: A. Šter, E. Kovač Andrić, B. Matasović, T. Balić, D. Gašo Sokač, doktorand

Sve sintetske faze provedbe projekta provest će iskusni kemičari-sintetičari: A. Šter, E. Kovač Andrić, B. Matasović, T. Balić, D. Gašo Sokač, a prilikom stjecanja iskustva dobit će zaposleni doktorand. Suradnici posjeduju značajno iskustvo u pripravi novih materijala, a bitno je spomenuti da sinteza telurata i volframata ne ide *ab ovo*, već se naslanja na modificiranu vodenu sol-gel metodu prethodno razvijenu u bivšem laboratoriju voditelja projekta. Sinteze će se u početku raditi metodama otopinske kemije: citratna ruta, solvotermalna metoda u različitim otapalima poput acetona, dimetil sulfoksid, N,N-dimetilformamid, etanol, propanol, benzil alkohol, heksan, dietil eter. Nakon kupnje kugličnog mlina, sinteza MOF-ova će se vršiti mehanokemijski i mehanokemijski uz prisustvo odgovarajućeg otapala.

2. Rendgenska difrakcijska mjerenja i analiza – zaduženi: M. Bijelić, T. Balić, A. Šter, G. Štefanić, I. Đerđ, doktorand

XRPD mjerenja polikristalnih uzorka (na sobnoj temperaturi) provest će M. Bijelić. XRD mjerenja na jediničnim kristalima ukoliko se u toj formi sintetiziraju MOF-ovi provest će specijalizirana grupa na Institutu Ruđer Bošković na osnovu narudžbe i uz plaćanje. Strukturnu analizu prikupljenih podataka na polikristalima provest će T. Balić, A. Šter i I. Đerđ. PhD student će se također upoznati s osnovnim elementima strukturne analize – fazna identifikacija, kvantitativna fazna analiza, Rietveldovo utočnjavanje kristalne strukture, te osnove rješavanja strukture iz PXRD podataka. Strukturnu analizu podataka prikupljenih na jediničnom kristalu provest će G. Štefanić. Analiza oksidnih materijala će se provesti Rietveldovim utočnjavanjem (specijalnost I. Đerđa) s ciljem određivanja fazne čistoće, strukturnih i mikrostrukturnih parametara, izračun stupnja uređenja (antisite ordering), duljina M-O veza, M-O-M kutevi što je značajno za objašnjenje magnetskog međudjelovanja. Kod hibridnih spojeva situacija je dosta složena, jer će se ovdje morati rješavati i kristalna struktura što iz praškastog XRD-a je izuzetno teško i vremenski zahtjevno, no uz pomoć infracrvene spektroskopije, kemijske (elementne) analize i Ramanske spektroskopije je izvedivo. U slučaju potrebe određivanja magnetske strukture ispod temperature magnetskog prijelaza, I. Đerđ će zatražiti vrijeme za neutronska difrakcijska mjerenja na jednom od europskih sinkrotrona. Voditelj projekta već posjeduje iskustvo u mjerenjima na sinkrotronu budući da je sudjelovao u mjerenjima na sinkrotronu u Trstu (Elletra) i PSI, Villigen, Švicarska.

3. Termička i spektroskopska mjerenja- zaduženi: T. Balić, B. Marković, D. Ristić, PhD student

Termičku i FTIR spektroskopsku karakterizaciju provest će T. Balić, B. Marković i PhD student koji će im se pridružiti u kasnijoj fazi istraživanja. Svaki od sintetiziranih uzoraka će biti sniman (DTA/DSC/TG) u širokom temperaturnom području, odnosno od sobne temperature pa sve do točke taljenja. Za svaki spoj, ova procedura će biti ponovljena nekoliko puta da bi se provjerila temperaturna stabilnost i točnost predložene empirijske formule. Za sve uzorke snimit će se i FTIR te Ramanski spektri s ciljem provjeravanja koordinacije organskih skupina metalnom centru kod MOF-ova te valjanost određivanja prostorne grupe kod oksida.

4. Pretražna mikroskopija (SEM) –zadužen: G. Štefanić

Istraživanja pretražnom elektronskom mikroskopijom provest će G. Štefanić na Institutu Ruđer Bošković. Ta će se tehnika koristiti odmah nakon XRD analize radi određivanja morfologije i lokalne kristaliničnosti dobivenih nanomaterijala. Transmisijska elektronska mikroskopija (TEM) će se eventualno koristiti u svrhu proučavanja morfologije i lokalne kristaliničnosti (ekspertiza I. Đerđa). Elementno mapiranje dodatno će se primijeniti za kompleksne teluratne (volframatne) prahove radi određivanja prostorne raspodjele elemenata.

5. Određivanje poroznosti i specifične površine materijala- zadužen: T. Balić

Ova faza istraživanja je izuzetno bitna za realizaciju MOF dijela projekta i bit će realizirana nakon uspješne nabave BET instrumenta i pripadnih dodataka.

6. Magnetska mjerenja, određivanje dielektrične konstante i mjerenje magnetoelektričnog efekta- zaduženi: Z. Jagličić, I. Đerđ

Konačno jedna od najbitnijih faza realizacije ovog projekta povjerena je iskusnom dvojcu: Jagličić-Đerđ. Umjesto dodatnih pojašnjavanja samo bismo uputili recenzente na neke od brojnih zajedničkih radova spomenutog dvojca koji ilustriraju visoku profesionalnost i kvalitetu istraživanja.

Kritičku diskusiju svih dobivenih rezultata te donošenje konačnih zaključaka istraživanja provest će zajednički svi članovi istraživačkog tima. Radne sastanke koordinirat će voditelj projekta. U pisanju publikacije sudjelovat će svi članovi, ovisno o području ekspertize. Voditelj će zasigurno posvetiti minimalno 60% radnog vremena projektu, a predvidivo i više, jer je tematika predloženog projekta svojevrsni nastavak atraktivnih istraživanja iz prethodnog laboratorija glavnog istraživača.

Dio e. Resursi (uključujući troškove projektnoga prijedloga) ²

(Napomena: Kako bi se panelima za vrednovanje olakšala procjena resursa, strogo se preporučuje korištenje podataka navedenih u financijskome planu.)

3. Oprema					
A. Nova oprema					
3a.1. Planetarni mlin sa setom za mljevenje, vezano uz M1.1., M3.1., M5.1., M6.1., M19.1., M20.1., M21.1., M22.1., M33.1., M34.1.	150.000.00				150.000.00
3a.2. Analizator veličine pora i površine (BET), vezano uz M26.1., M37.1.		240.000.00			240.000.00
3a.3. Autoklav (45 ml) sa PTFE uloškom (dva seta), vezano uz M1.1., M3.1., M5.1., M6.1., M19.1., M20.1., M21.1., M22.1., M33.1., M34.1.	20.200.00				20.200.00
3a.4. Autoklav (23 ml) sa PTFE uloškom (dva seta) (two sets), vezano uz M1.1., M3.1., M5.1., M6.1., M19.1., M20.1., M21.1., M22.1., M33.1., M34.1.	17.800.00				17.800.00
3a.5. Sušionik, vezano uz M1.1., M3.1., M5.1., M6.1., M19.1., M20.1., M21.1., M22.1., M33.1., M34.1.	9.800.00				9.800.00
Ukupno A	197.800.00	240.000.00	0.00	0.00	437.800.00

Većina eksperimentalnih uređaja potrebnih za istraživanje u sklopu ovog projekta dostupni su u laboratorijima suradnika na projektu osim nekoliko uređaja koji će biti kupljeni u sklopu ovog projekta. Planetarni mlin, sušionik i autoklavi (stavke 3a.1., 3a.3., 3a.4. i 3a.5.) koristit će se u sklopu ovog projekta kao sastavni dio sintetskih postupaka za dobivanje perovskitnih materijala. Planetarni mlin koristi se za mehanosintezu te je za njegovu nabavku predviđeno 150.000,00 kn, a u sklopu cijene je predviđena i nabavka ahatnih nosača i kuglica koji su neophodni za sintezu u čvrstom stanju, posebno ako se radi o sintezi materijala s određenim udjelom metalnih kationa. Autoklavi će se koristiti za solvotermalnu sintezu te je predviđena kupnja 4 autoklava s ukupnim iznosom od 38.000,00 kn. U sklopu projekta predviđena je i nabava sušionika s kojim se mogu postići više temperature (do 300 °C) koji će se koristiti za solvotermalnu sintezu (za nabavku je predviđeno 9.800,00 kn). Svi uređaji predviđeni za nabavu u ovim kategorijama nisu dostupni na instituciji prijavitelja te su neophodni za provođenje sinteza perovskitnih materijala. Posljednji uređaj u ovoj kategoriji je Analizator veličine pora i površine (BET, Stavka 3a.2.) za koji je predviđena svota od 240.000,00 kn. Instrument je neophodan za karakterizaciju poroznih svojstava MOF materijala. Za ovaj instrument predviđena je i nadogradnja u trećoj godini projekta u iznosu od 120.000,00 kn koja će omogućiti ispitivanje adsorpcije raznih (CO₂, CH₄...) plinova na pripremljenim MOF materijalima.

4. Diseminacija i suradnja (do 70.000,00 kn)					
4.1. Sudjelovanje voditelja projekta na međunarodnoj Slo-Cro crystallographic meeting znanstvenoj konferenciji, vezano uz M15.1.		2.000.00			2.000.00
4.2. Sudjelovanje 3 člana projektnog tima na međunarodnoj znanstvenoj konferenciji, vezano uz M31.1.			54.000.00		54.000.00
4.3. Sudjelovanje 4 člana projektnog tima na međunarodnoj znanstvenoj konferenciji, vezano uz M41.1.				70.000.00	70.000.00
Ukupno 4	0.00	2.000.00	54.000.00	70.000.00	126.000.00

U prve dvije godine na diseminaciju rezultata će biti utrošena vrlo mala svota od 2.000,00 kn zbog značajne potrošnje sredstava na nabavku instrumenata i opreme. Tijekom treće i četvrte

² Prilagoditi stvarnom trajanju projekta.

godine projekta planirano je uložiti značajna sredstva na diseminaciju (54.000,00 u trećoj godini i 70.000,00 u četvrtoj godini). Sredstva će biti utrošena na sudjelovanja voditelja projekta i članova projektnog tima na međunarodnim znanstvenim konferencijama. Sudjelovanje na međunarodnim konferencijama vrlo je značajno kako za prezentaciju rezultata projekta tako i za stvaranje nove mreže suradnika čime se poboljšava dugoročna održivost projektne ideje.

1. Materijalni troškovi					
1.1. Kemikalije vezano uz M1.1., M3.1., M5.1., M6.1., M19.1., M20.1., M21.1., M22.1., M33.1., M34.1.	20.000.00		15.000.00	35.000.00	70.000.00
1.2. Otapala, vezano uz, M1.1., M3.1., M5.1., M6.1., M19.1., M20.1., M21.1., M22.1., M33.1., M34.1.	2.000.00		5.000.00	10.000.00	17.000.00
1.3. Plinovi vezano uz BET i TG/DSC analizu, M9.1., M25.1., M26.1., M36.1., M37.1.	1.000.00		5.000.00	10.000.00	16.000.00
1.4. Troškovi snimanja SEM i TEM vezano uz M2.2., M4.2., M7.2., M24.1., M24.2., M35.2., M35.3.	3.200.00		3.200.00	3.200.00	9.600.00
1.5. Troškovi snimanja jediničnih kristala vezano uz M18.1., M23.1., M35.1.			3.500.00	4.500.00	8.000.00
1.6. Redukcijski ventili, vezano uz M9.1., M25.1., M26.1., M36.1., M37.1.			3.000.00		3.000.00
1.7. Laboratorijski pribor i posude vezano uz M1.1., M3.1., M5.1., M6.1., M19.1., M20.1., M21.1., M22.1., M33.1., M34.1.	5.000.00		10.000.00	30.000.00	45.000.00
1.8. Terenski trošak vezan za mjerenja M2.2., M7.2., M11.1., M11.1., M11.2., M13.1., M14.1., M18.1., M24.1., M24.2., M27.1., M27.2., M29.1., M35.2., M35.3., M38.1., M39.1., M40.1.	10.000.00		14.000.00	25.000.00	49.000.00
Ukupno 1	41.200.00	0.00	58.700.00	117.700.00	217.600.00

Najveća stavka u materijalnim troškovima su kemikalije vezane za provedbu predviđenih sinteza u iznosu od 70.000,00 kn. Kemikalije koje će se koristiti su različite anorganske soli kao prekursori za sintezu perovskitnih materijala i metalne soli za sintezu MOF materijala. Također će se koristiti i organske kemikalije (primjerice diamine, poliamini, propionate i drugo). Za sinteze su također potrebna različita anorganska i organska otapala za koje je predviđen iznos od 17.000,00 kn. Određeni dio troškova predviđen je i za nabavku plinova i redukcijskih ventila potrebnih za rad BET i TG/DSC instrumenata (N₂, CO₂, O₂ i drugi), ukupnog iznosa 27.000,00 kn. Posebno su izdvojene stavke troškova analize SEM i TEM tehnikom te troškovi snimanja uzoraka jediničnih kristala rendgenskom difrakcijom zato što navedena oprema nije dostupna na instituciji prijavitelja niti suradnika. Ukupan planirani iznos za ove stavke je 17.600,00 kn. Posebna Stavka u materijalnim troškovima je i terenski trošak koji se odnosi na troškove putovanja, smještaja i dnevnica članova projektnog tima prilikom analize uzoraka SEM i TEM tehnikom, snimanja jediničnih kristala i snimanja neutronsom difrakcijom u ukupnom iznosu od 49.000,00 kn.

B. Troškovi doktorskog studija					
2b.1. Školarina, doktorski studij kemije, PMF, za suradnika doktoranda, vezano uz sve etape projekta			8.000.00	8.000.00	24.000.00
Ukupno B	0.00	0.00	8.000.00	8.000.00	24.000.00

Za cjelokupno vrijeme trajanja projekta biti će utrošeno 24.000,00 kn za potrebe školarine (8.000,00 kn godišnje) studenta doktoranda koji će upisati doktorski studij iz Kemije na na PMF-u u Zagrebu.

B. Servisno održavanje opreme					
3b.1. Održavanje TG/DSC sustava, vezano uz M9.1., M25.1., M36.1.			8.600.00	20.000.00	28.600.00
Ukupno B	0.00	0.00	8.600.00	20.000.00	28.600.00

Tijekom projekta planirano je servisno održavanje TGA/DSC instrumenta u kojem je predviđeno nabaviti potrošni materijal (posudice za snimanje, mjerači protoka) te je u ovoj stavci predviđeno 28.600,00 kn.

C. Usavršavanje voditelja projekta i suradnika					
2c.1. Sudjelovanje voditelja projekta na Panalytical days (workshop), mjesto će se tek odrediti, vezano uz M10.1	10.000.00				10.000.00
2c.2. Sudjelovanje doktoranda na tematskoj školi, vezano uz M41.2.				7.000.00	7.000.00
2c.3. Sudjelovanje jednog suradnika na tematskoj školi, vezano uz M41.2.				7.000.00	7.000.00
Ukupno C	10.000.00	0.00	0.00	14.000.00	24.000.00

U kategoriji usavršavanje predviđen je iznos od 24.000,00 kn koji će biti utrošen na usavršavanje studenta doktoranda i voditelja projekta na raznim školama i radionicama. Ovaj način usavršavanja posebno je važan za mlade znanstvenike koji na takav način imaju priliku upoznati sa najnovijim trendovima iz područja projektne problematike.

Potrebni resursi za uspješnu realizaciju projekta:

Sinteza:

Voditelj projekta I. Đerđ i suradnici na Odjelu za kemiju na raspolaganje će staviti potpuno suvremeno opremljen laboratorijski prostor sa svom potrebnom opremom: digestori, mlin za mehanokemijske reakcije (planiran u financijskom planu), analitičke vage, visokotemperaturne peći, 1 autoklav (4 dodatna planirana u nabavi), centrifuga, te potreban stakleni, keramički i plastični pribor.

Termička analiza:

Za potrebe projekta na raspolaganju će biti Mettler-Toledo TGA/DSC analyzer (do 1500 °C) i Shimadzu FT-IR (4000–350 cm⁻¹) spektrometar. Oprema za termičku analizu i spektroskopsku karakterizaciju smještena je na Odjelu na kemiju.

Strukturna analiza:

Za strukturnu karakterizaciju novih spojeva koristit će se difrakcija rendgenskoga zračenja na monokristalnom uzorku (XRD). Temperaturni raspon koji je na raspolaganju za mjerenje je između 90 i 400 K. Mali, kristali nepogodni za snimanje difrakcijom na monokristalu mjerit će se pomoću CuK α zračenja. Uzorci koji su nestabilni na zraku, ako budu pripremljeni, mjerit će se pri 90 K. Difraktometri su dostupni na Institutu "Ruđer Bošković" i mogu se koristiti uz malu naknadu. Miješani teluratni i volframatni oksidi pripređivat će se u formi praha. Određivanje kristalne strukture iz polikristalnog uzorka pomoću difrakcije rendgenskoga zračenja na prahu (XPRD) i dalje predstavljaju izazov, ali i pružaju alternativu objašnjavaivanju onog dijela strukture uzorka koji se ne može dobiti iz monokristalnoga uzorka. Difraktometar praha dostupan za potrebe projekta nalazi se na Odjelu za fiziku Prirodoslovno-matematičkoga fakulteta Sveučilišta u Zagrebu u nadležnosti dr. sc. Mirjane Bijelić, članice našeg projektnog tima.

Mikrostrukturna karakterizacija:

Pretražna elektronska mikroskopija (SEM) koristit će se odmah po XRD analizi. Transmisijska elektronska mikroskopija (TEM) također će se koristiti u svrhu proučavanja morfologije i lokalne kristaliničnosti. Elementno mapiranje dodatno će se primijeniti za kompleksne teluratne prahove radi određivanja prostorne raspodjele elemenata. Poradi realizacije ovog dijela projekta, na raspolaganju nam stoje dva napredna instrumenta: C_s- corrected TEM (JEOL AR-STEM) lociran na Kemijskom inštitutu u Ljubljani, Slovenija i SEM (FE-SEM JSM 7000F) na Institutu Ruđer Bošković.

Mjerenja magnetskih i električnih svojstava

Magnetska svojstva istraživat će se na IMFM-u pod vodstvom prof. dr. Zvonka Jagličića pomoću komercijalnog:

- Quantum Design MPMS-XL-5 SQUID magnetometra koji radi u rasponu od 2 K i 400 K u magnetskom polju do 5 T.

Za bazna električna i prijenosna svojstva materijala poput otpornosti, magnetootpornosti, Hallovog koeficijenta i termosnage koristit će se:

- Quantum Design PPMS sustav opremljen s 9 T supervodljivim magnetom koji radi u temperaturnom rasponu od 2 K do 400 K.

Dio f. Etička pitanja

Sva istraživanja koja financira Hrvatska zaklada za znanost moraju biti u skladu s relevantnim nacionalnim i međunarodnim propisima o etičnosti istraživanja.

Na mrežnoj stranici Zaklade (www.hrzz.hr) nalazi se tablica Etička pitanja. Ukoliko se na Vaše istraživanje primjenjuje neko od pitanja u tablici, molim da prijavi projektnog prijedloga, pod dodatna dokumentacije, priložite potvrdu nadležnoga etičkog povjerenstva o etičnosti istraživanja. Ako potvrda nije dostavljena prilikom prijave projektnoga prijedloga, može biti zatražena tijekom vrednovanja projekta.

Cjelina C- Suradnici i istraživačka skupina

Navedite sve suradnike (navedite i doktorske studente (D), poslijedoktorande (P) koji će biti zaposleni na projektu i konzultante)					
Ime	Prezime	Titula	Ustanova	Država	Godina stjecanja doktorata znanosti
Berislav	Marković	Doc. dr. sc.	Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku	Hrvatska	1996.
Elvira	Kovač Andrić	Doc. dr. sc.	Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku	Hrvatska	2010.
Dajana	Gašo Sokač	Doc. dr. sc.	Prehrambeno-tehnološki fakultet Osijek, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku	Hrvatska	2009.
Tomislav	Balić	Dr. sc.	Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku	Hrvatska	2013.
Brunislav	Matasović	Dr. sc.	Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku	Hrvatska	2010.
Anamarija	Šter	Doktorand/ asistent	Odjel za kemiju, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku	Hrvatska	
Goran	Štefanić	Dr. sc.	Institut Ruđer Bošković	Hrvatska	1997.
Mirjana	Bijelić	Dr. sc.	Fizički odsjek, PMF, Sveučilište u Zagrebu	Hrvatska	2016.
Davor	Ristić	Dr. sc.	Institut Ruđer Bošković	Hrvatska	2010.
Zvonko	Jagličić	Prof. dr.	Institute of Mathematics, Physics and Mechanics, University of Ljubljana	Slovenija	1996.
D					

*dodajte redove prema potrebi

Dio a. Istraživačka grupa (opišite uloge i zadaće članova istraživačke skupine, postotak vremena kojega će posvetiti projektnom prijedlogu) (najviše 1 stranica)

Igor Đerđ: Voditelj, 60% radnog vremena posvećenost projektu.

Zaduženja: Vodstvo projekta i istraživanja u svim stadijima realizacije od administriranja projekta, vođenja i usmjerevanja istraživanja, interpretacije i diskusije rezultata, njihova uspješna diseminacija; Strukturna analiza polikristalnih materijala Rietveldovom analizom rendgenskih difraktograma (FULLPROF program), TEM snimanja kao i interpretacija dobivenih rezultata te interpretacija rezultata magnetskih mjerenja.

Berislav Marković: 30% radnog vremena posvećenost projektu.

Zaduženja: Termička i spektroskopijska analiza sintetiziranih spojeva simultanim korištenjem termogravimetrijske analize i diferencijalne termičke analize u modu grijanja i hlađenja; Ispitivanje termičke stabilnosti i karakteristike degradacije metalnih kompleksa, određivanje eventualnog faznog prijelaza, kristalizacije ili oksidacijsko-redukcijskih procesa; FTIR spektroskopija za rasvjetljivanje prisutstva organskih moaitia i identifikacija eventualnog prisutstva rezidualne vode ili hidroksilne skupine.

Tomislav Balić: 40% radnog vremena posvećenost projektu.

Zaduženja: Solvothermalna sinteza MOF spojeva korištenjem slijedećih sintetskih parametara (liganada): (1) Triatomni ligandi; (2) Kombinacija triatomnih liganada s ligandima poput glicinata ($\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-$) i propionata ($\text{C}_2\text{H}_5\text{COO}^-$); (3) Predložni kationi (templated cations); Strukturna analiza polikristalnih uzoraka (rješavanje nepoznate kristalne structure direktnim metodama i globalnom optimizacijom korištenjem programa EXPO2014, te Rietveldovo utočnjavanje pomoću programa HighScore Plus); BET mjerenja i određivanje specifične površine poroznih MOF-ova.

Brunislav Matasović: 30% radnog vremena posvećenost projektu.

Zaduženja: Solvothermalna sinteza razrijeđenih magnetskih sistema poput: $[\text{CH}_3\text{NH}_3][\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}(\text{HCOO})_3]$, $[\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2][\text{Fe}^{\text{III}}\text{M}^{\text{II}}(\text{HCOO})_6]$ ($M = \text{Mg}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Zn}$) $[\text{NH}_4][\text{M}_x\text{Zn}_{1-x}(\text{HCOO})_3]$ ($M=\text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}$) te njihova rekristalizacija s ciljem dobivanja monokristala; Strukturna analiza polikristalnih uzoraka pomoću programa HighScore Plus.

Elvira Kovač Andrić: 20% radnog vremena posvećenost projektu.

Zaduženja: Mehanokemijska i otapalom potpomognuta mehanokemijska sinteza MOF spojeva korištenjem (1) Triatomni ligandi; (2) Kombinacija triatomnih liganada s ligandima poput glicinata ($\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-$) i propionata ($\text{C}_2\text{H}_5\text{COO}^-$); (3) Predložni kationi (templated cations); Strukturna analiza polikristalnih uzoraka pomoću programa HighScore Plus.

Anamarija Šter: 20% radnog vremena posvećenost projektu.

Zaduženja: Sol-gel sinteza kompleksnih metalnih telurata pomoću naše posebno razvijene metode što uključuje uporabu citratne kiseline kao kompleksirajućeg agensa; Strukturna analiza polikristalnih uzoraka: fazna identifikacija i izračun mikrostrukturnih parametara Rietveldovom metodom.

Dajana Gašo Sokač: 10% radnog vremena posvećenost projektu.

Zaduženja: Sol-gel sinteza kompleksnih metalnih tungstata (volframata) pomoću naše posebno razvijene metode što uključuje uporabu citratne kiseline kao kompleksirajućeg agensa; Strukturna analiza polikristalnih uzoraka: fazna identifikacija i izračun mikrostrukturnih parametara Rietveldovom metodom.

Goran Štefanić: 30% radnog vremena posvećenost projektu

Zaduženja: Pretražna elektronska mikroskopija sintetiziranih spojeva (FE-SEM JSM 7000F), ispitivanje lokalnog kemijskog sastava pomoću EDX-a.

Mirjana Bijelić: 20% radnog vremena posvećenost projektu.

Zaduženja: Snimanje XRD-a na praškastim uzorcima (Philips difraktometar praha PW 1820) te prateće radnje koje uključuju pripremu uzoraka za samo snimanje i pre-procesiranje snimljenih difraktograma.

Davor Ristić: 10% radnog vremena posvećenost projektu.

Zaduženja: Spektroskopsko istraživanje pripremljenih spojeva metodama Ramanske spektroskopije (HORIBA Jobin Yvon model T64000), analiza snimljenih spektara na osnovu očekivanih Ramanskih modova.

Zvonko Jagličić: 20% radnog vremena posvećenost projektu.

Zaduženja: SQUID mjerenja priređenih materijala (kombinacija mjerenja DC i AC magnetske susceptibilnosti) i interpretacija dijela snimljenih rezultata; Određivanje dielektrične konstante, mjerenje temperaturne i frekvencijske ovisnosti iste, mjerenje magnetoelektričnog vezanja.

Doktorand: – izrada doktorske disertacije u okviru projekta. Zaduženja doktoranda nisu nabrojana u radnom planu jer se smatra da uspješnost projekta nikako ne bi smjela ovisiti o eventualnom (ukoliko će biti odobrena dodatna sredstva za zapošljavanje doktoranda od strane HRZZ-a) uključivanju dokorskog studenta u projekt. Ukoliko bude odobren, doktorand će biti aktivno uključen u sve istraživačke aktivnosti s glavnim fokusom na sinteze i karakterizacije teluratnih i volframatnih perovskita.

Dio b. Životopisi suradnika

(vidjeti Upute za podnositelje projektnih prijedloga na natječaj Istraživački projekti IP-06-2016)

Berislav Marković, 116951: Životopis

Rođen 09. 09. 1957., Zagreb, Croatia

Curriculum

- 1996: Dr.sc. Prirodnih znanosti iz područja kemije, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu (mentor: Prof. dr. sc. P. Somasundaran/N. Kallay).
- 1991.-1993. Prijedoktorsko usavršavanje (Fulbrighthova stipendija) na **Columbia University**, New York, SAD.
- 1993.-1997. Znanstveni suradnik/postdoktorsko usavršavanje na **Columbia University**, New York, SAD (u grupi prof. P. Somasundarana)
- 1997.-2002. **Znanstveni suradnik/vođa grupe**, International Specialty Products, Wayne, New Jersey, USA
- 2003.-2004. Zamjenik direktora razvoja, Chromos d.d., Samobor, Hrvatska
- 2004.-danas **Docent** Odjela za kemiju Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera, Osijek, Hrvatska.

Područje istraživanja i znanstveni interes

- Sinteza, analiza i rendgenska strukturna analiza kompleksa molibdena
- Koloidna kemija, nanomaterijali, biokompatibilni materijali
- Primjena koloida u razvoju kozmetičkih sirovina i gotovih proizvoda; karakterizacija disperzija optičkim i akustičnim metodama; transdermalno djelovanje aktivnih tvari u kozmetici; fizikalno-kemijska karakterizacija disperzija, polimera i polimernih smjesa.
- Sinteza i rendgenska strukturna analiza Schiffovih baza i njihovih kompleksa s prijelaznim metalima

Znanstvene aktivnosti

- 30-tak izlaganja (usmenih i posterskih) na međunarodnim i domaćim skupovima.

- Mentor 1 PhD studenta, 2 MSc studenta i više od 30 studenata na diplomskim i završnim radovima.
- Recenzent za časopise (Colloids and Surfaces, Inorganica Chimica Acta...), znanstvene agencije (NSF - SAD, NZZ/HRZZ, MZOS).
- Voditelj više znanstvenih (NZZ, ISP - SAD) i razvojnih projekata.

Znanstvene publikacije

19 znanstvenih radova u CC časopisima (WoS - 399 citations, h=8), 1 knjiga, 3 poglavlja u knjigama, 5 ostalih znanstvenih radova, 1 patent

1. D. MacDonald, N. Deo, **B. Marković**, M. Stranick, and P. Somasundaran, Adsorption and Dissolution Behavior of Human Plasma Fibronectin on Thermally and Chemically Modified Titanium Dioxide, *Biomaterials*, 2002, **23**, 1269.
2. D. MacDonald, **B. Marković**, M. Allen, P. Somasundaran, and A.L. Boskey, Surface Analysis of Human Plasma Fibronectin Adsorbed to Commercially Pure Titanium Materials, *Journal of Biomedical Materials Research*, 1998, **41**, 120.
3. M.E. Rerek, H. Chen, **B. Marković**, D. Van Wyck, P. Garidel, R. Mendelsohn and D.J. Moore, Phytosphingosine and Sphingosine Ceramide Headgroup Hydrogen Bonding: Structural Insights Through Thermotropic Hydrogen/Deuterium Exchange, *J. Phys. Chem.* 2001, **B 105**, 9355.
4. D. MacDonald, **B. Marković**, A.L. Boskey and P. Somasundaran, Physico-Chemical Properties of Human Plasma Fibronectin Binding to Well Characterized Titanium Dioxide, *Colloids and Surfaces B: Biomaterials*, **11**, 1998, 131. B. Kamenar, M. Penavić, B. Korpar-Čolig and **B. Marković**, Preparation and Crystal Structure of Two Oxomolybdenum Complexes with Dimethoxyethane, *Inorg. Chim. Acta*, 1982, **65(6)**, L245.
5. N. Stubičar, **B. Marković**, A. Tonejc and M. Stubičar, Crystal Growth of Lead Fluoride Phases Using the Constant Composition Method. III. Effect of pH and Ionic Strength, *Journal of Crystal Growth*, 1993, **130**, 300.
6. B. Kamenar, M. Penavić and **B. Marković**, Structure of Triammonium μ -formato-(O,O')-di- μ -oxo-bis-[diformato(oxo)molybdate(V)], *Acta Crystallogr.*, 1987, **C43(12)**, 2275.
7. T. Balić, **B. Marković**, J. Jazwinski, D. Matković-Čalogović, Synthesis and Structural Characterization of Microporous N_4O_4 - Donor Schiff Base Macrocycle: Study of Host-guest Interactions and Iodine Sorption, *Microporous and mesoporous materials*, 2016, **226**, 53.
8. T. Balić, B. Matasović, **B. Marković**, A. Šter, M. Štivojević, D. Matković-Čalogović, Synthesis, Structural Characterization and Extraction Studies of 17-, 18-, 19- and 20-membered N_2O_2 -Donor Macrocyclic Schiff Bases, *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*, 2016, 1-10.

Elvira Kovač-Andrić, 245614: Životopis

Rođena 25. 05. 1975., Tenja, Hrvatska

Curriculum

- 2010 Dr. sc. iz područja kemije, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu.
- 2014-danas Docent, Sveučilište Josip Juraj Strossmayer, Osijek, Hrvatska.

Područje istraživanja i znanstveni interes

Atmosferska kemija, Znanost o okolišu, Kemija kompleksnih spojeva

Znanstvene aktivnosti

- Sudjelovanje na 7 međunarodnih skupova.
- Recenzent na nekoliko CC časopisa

- Sudjelovanje u organizaciji XXIII. Hrvatskog skupa kemičara i kemijskih inženjera

Znanstvene publikacije

7 znanstvenih publikacija (CC). Citirani (WoS) =52 puta, h-indeks=4;
Zadnjih 5 godina: 5 publikacija (3 Q2, 1 Q3, 1 Q4), prosječan IF radova u posljednjih 5 godina = 1.6

1. Gvozdić, V., **Kovač-Andrić, E.**, Brana, J. (2011) Influence of Meteorological Factors NO₂, SO₂, CO and PM₁₀ on the Concentration of O₃ in the Urban Atmosphere of Eastern Croatia. Environ. Model. Assess. 16 491-501.
2. **Kovač-Andrić, E.**, Gvozdić, V., Herjavić, G., Muharemović, H. (2013) Assessment of ozone variations and meteorological influences in a tourist and health resort area on the island of Mali Lošinj (Croatia). Environ. Sci. Pollut. Res. 20 5106-5113.
3. **Kovač-Andrić, E.**, Gvozdić, V., Muharemović, H. (2013) Assessment of Variations of O₃ Concentrations in Kopački Rit Nature Park, Eastern Croatia. Croat. Chem. Acta 86 (1) 109-115.
4. **Kovač-Andrić, E.**, Radanović, T., Topalović, I., Marković, B., Sakač, N. (2013) Temporal Variations in Concentrations of Ozone, Nitrogen Dioxide, and Carbon Monoxide at Osijek, Croatia. Advances in Meteorology, Volume 2013, Article ID 469786.
5. **Kovač-Andrić, E.**, Arh, G. (2015) Atmospheric VOCs measurement in Nature Reserve Kopački rit, Croatia. Air Quality, Atmosphere & Health. (DOI 10.1007/s11869-015-0374-z).

Dajana Gašo-Sokač, 231541: Životopis

Rođena 27. 04. 1974., Remscheid, Njemačka

Curriculum

1998. Dipl. ing. prehrambene tehnologije, Prehrambeno-tehnološki fakultet, Sveučilište J.J. Strossmayera u Osijeku
2003. Mr. sc područje prirodnih znanosti, polje kemija, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
2009. Dr. sc područje prirodnih znanosti, polje kemija, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Sveučilište u Zagrebu
- 2012.-danas **Docent**, Prehrambeno-tehnološki fakultet, Sveučilište J.J. Strossmayera u Osijeku

Područje istraživanja i znanstveni interes

Organska kemija, sinteza heterocikličkih spojeva, nove metode sinteze, sinteza pod utjecajem mikrovalnog zračenja, mehanokemija

rješavanje kristalnih struktura pomoću difrakcije na monokristaličnim uzorcima, TG/DSC analiza, FT-IR spektroskopija.

Znanstvene aktivnosti

Suradnik na 3 projekta:

1. 0113006 Interakcije u sustavu metalni ambalažni materijal-hrana.
2. 291-0580000-0169 Kemijski senzori za primjenu u biomedicine, hrani i zaštiti okoliša.
3. 073-0731674-1673 Utjecaj oksidativnog stresa na organizaciju i funkciju biljnih stanica i tkiva.

Znanstvene publikacije

14 znanstvenih radova u CC časopisima (WoS) (citirani 87 puta, h- index 6, prosječni IF radova u posljednjih 5 godina 2.09), 2 poglavlja u knjigama

1. D. Gašo-Sokač, M. Katalinić, Z. Kovarik, V. Bušić, S. Kovač, Synthesis and evaluation of novel analogues of vitamin B₆ as reactivators of tabun and paraoxon inhibited acetylcholinesterase. *Chemico-Biological Interactions*, 187 (2010) 234-237.
2. M. Cetina, A. Nagl, D. Gašo-Sokač, S. Kovač, V. Bušić, D. Saftić, Extensive Intramolecular and Intermolecular Interactions in Two Quaternary Salts of the Pyridoxal Oxime. *J Chem Crystallogr.* 42 (2012) 7 752-758.
3. Dj. Josic, L. Breen, J. Clifton, M. Srajer Gajdošik, D. Gašo-Sokač, M. Rucevic, E. Müller. Separation of proteins from human plasma by sample displacement chromatography in hydrophobic interaction mode. *Electrophoresis* 33 (2012) 1842-1849.
4. M. Šrajer Gajdošik, D. Gašo-Sokač, H. Pavlović, J. Clifton, L. Breen, L. Cao, J. Giacometti, Đ. Josić, Sample preparation and further proteomic investigation of the inhibitory activity of pyridinium oximes to Gram-positive and Gram-negative food pathogens. *Food Res. Int.* 51 (2013) 1, 46-52.
5. V. Bušić, D. Gašo-Sokač, S. Kovač, Novel and Cleaner Synthesis of Pyridinium Salts from Pyridoxal Oxime and Substituted Phenacyl Bromides. *Croatica chemica acta.* 86 (2013) 3, 331-334.
6. D. Gašo-Sokač, V. Bušić, M. Cetina, M. Jukić, An Efficient Synthesis of Pyridoxal Oxime Derivatives Under Microwave Irradiation. *Molecules.* 19 (2014) 6, 7610-7620.

Tomislav Balić, 297026: Životopis

Rođen 4. 1. 1982, Đakovo

Curriculum

- 2013. Dr. sc. iz područja kemije, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu.
- 2007.-2013. Asistent, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku, Odjel za kemiju
- 2013.-danas Viši asistent, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku, Odjel za kemiju;

Područje istraživanja i znanstveni interes

Koordinacijska kemija, Kemija makrocikličkih spojeva, Host-Guest kemija, Porozni materijali, Rendgenska strukturna analiza (monokristalični i polikristalični uzorci), rješavanje kristalnih struktura pomoću difrakcije na monokristaličnim uzorcima, TG/DSC analiza, FT-IR spektroskopija.

Znanstvene aktivnosti

- 8 izlaganja na konferencijama.
- *Suradnik na 2 projekta*
 1. „*The use of nanomaterials in the construction of potentiometric surfactant sensors for industrial and environmental applications*“ (projekt Hrvatske zaklade za znanost) - project; voditelj. dr. sc. M. Sak-Bosnar
 2. „*Laboratory for dispersions and materials*“ (projekt Hrvatske zaklade za znanost)-project; voditelj dr. sc. B. Marković

Znanstvene publikacije

8 znanstvenih publikacija (CC). Citirani (WoS)=7 puta, h-indeks=1;
Zadnjih 5 godina: **6 znanstvenih publikacija** (1 Q1, 2 Q2)

1. **Balić, T.**, Marković, B., Jaźwiński, J., Matković-Čalogović, D.: *Synthesis and structural characterization of microporous N4O4-donor Schiff base macrocycle: Study of host-guest interactions and iodine sorption*, Microporous and Mesoporous Materials **226** (2016) 53-60.
2. **Balić, T.**, Marković, B., Jaźwiński, J., Matković-Čalogović, D.: *Synthesis and structural characterization of new N₂O₂-donor Schiff base macrocycles and their silver(I) coordination polymers*, Inorganica Chimica Acta, **435** (2015) 283-291.
3. **Balić, T.**, Marković, B., Medvidović-Kosanović, M.: *Electrochemical and structural analysis of a novel symmetrical bis-Schiff base with herringbone packing motif*. Journal of Molecular Structure, **1084** (2015).
4. Medvidović-Kosanović, M., **Balić, T.**, Marković, B., Šter, A.: *Comparison of the electrochemical properties of two structurally different novel bis-Schiff bases* International Journal of Electrochemical Science, **10** (2015) 63-83.
5. **Balić, T.**, Marković, B., Balić, I.: *4-[5-(4-Formylphenoxy)pentoxy]benzaldehyde*, Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online, **68**(2012) o2

Brunislav Matasović, 268656: Životopis

Rođen 25. 3. 1979., Osijek, Hrvatska

Curriculum

2003. Dipl.ing kemije; Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu.
2010. Dr. sc. iz znanstvenog polja kemije, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu.

Područje istraživanja i znanstveni interes

- glavna: atmosferska kemija, radijacijska kemija, statistika
- sporedna: taložni procesi, surfaktanti, medicinska kemija, atmosfersko modeliranje

Znanstvene publikacije

- Objavio **10 znanstvenih radova** (8 CC). Radovi su citirani (WoS) **14** puta, h-indeks 2, PROSJEČAN IF radova u posljednjih 5 god = **1.5**.

1. **B. Matasović**, M. Bonifačić, Reductive Halogen Elimination from Phenol by Organic Radicals in Aqueous Solutions; Chain Reaction Induced by Proton-Coupled Electron Transfer, *J. Phys. Chem. A*, **111** (2007) 8622 – 8628.
2. **B. Matasović**, M. Bonifačić, Reductive Dehalogenation of 5-Bromouracil by Aliphatic Organic Radicals in Aqueous Solutions; Electron Transfer and Proton-Coupled Electron Transfer Mechanisms, *Rad. Phys. Chem.*, **80** (2011) 750 – 754.
3. **B. Matasović**, T. Cvitaš, L. Klasinc, On Photochemical Air Pollution Potential in Southern California Derived from Ozone Data from 16 Monitoring Stations, *Croat. Chem. Acta*, **85** (2012) 71 – 76.
4. **B. Matasović**, L. Klasinc, T. Cvitaš, Growth Period Photochemical Pollution over the UK Based on Ozone Data 1990 – 2006, *Croat. Chem. Acta*, **86** (2013) 57 – 64.
5. I. Ljubić, **B. Matasović**, M. Bonifačić, An Efficient Buffer-Mediated Control between Free Radical Substitution and Proton-Coupled Electron Transfer: Dehalogenation of Iodoethane by α -Hydroxyethyl Radical in Aqueous Solution, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **15(41)** (2013) 18001 – 18011.
6. **B. Matasović**, L. Klasinc, S.P. McGlynn, Analysis of ozone data in Colorado from 2000 –

2005 by Photochemical Pollution Indicators, *Croat. Chem. Acta*, **86** (2013) 325 – 329.

7. **B. Matasović**, G. Herjavić, L. Klasinc, T. Cvitaš, Analysis of Ozone Data from the Puntijarka Station for the Period from 1989 to 2009, *J. Atmos. Chem.*, **71** (2014) 269 – 282.

8. T. Balić, **B. Matasović**, B. Marković, A. Šter, M. Štivojević, Synthesis, structural characterization and extraction studies of 17-, 18-, 19- and 20- membered N₂O₂-donor macrocyclic Schiff bases, *J. Incl. Phenom. Macro.*, accepted 2016.

Anamarija Šter, 339183: Životopis

Rođena 05. 09. 1985., Osijek, Hrvatska

Curriculum

- 2010. Prof. biologije i kemije, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku.
- 2012.-2013. Stručni suradnik na Katedri za opću i anorgansku kemiju, fizikalnu kemiju i metodiku nastave kemije
- 2013. - danas Asistent iz znanstvenog područja Prirodnih znanosti, znanstvenog polja kemija, znanstvene grane anorganska kemija, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku, Odjel za kemiju

Područje istraživanja i znanstveni interes

- Izučavanje mehanizama i kinetika taloženja različitih oblika hidrata kalcijeva oksalata (kalcijev oksalat monohidrat, kalcijev oksalat dihidrat, kalcijev oksalat trihidrat) povezana s patološkom biomineralizacijom
- Voltametrijske tehnike (ciklička i diferencijalna pulsna)
- Rendgenska strukturna analiza (polikristalični uzorci)
- TG/DSC analiza
- FT-IR spektroskopija

Znanstvene aktivnosti

- 3 izlaganja na konferencijama

Znanstvene publikacije

2 znanstvene publikacije (CC).

1. Medvidović-Kosanović, M., Balić, T., Marković, B., **Šter, A.**: *Comparison of the electrochemical properties of two structurally different novel bis-Schiff bases*, *Int. J. Electrochem. Sci.*, 10 (2015) 63-83.

2. Balić, T., Matasović, B., Marković, B., **Šter, A.**, Štivojević, M., Matković-Čalogović, D.: *Synthesis, structural characterization and extraction studies of 17-, 18-, 19- and 20-membered N₂O₂-donor macrocyclic Schiff bases*, *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.*, (2016) ; 1-10.

Goran Štefanić, 227030: Životopis

Rođen 23. 12. 1967., Zagreb, Hrvatska

Curriculum

- 1992: Dipl. ing. chem., Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
- 1997: Dr. sc., Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
- 1993- danas, Institut Ruđer Bošković
- 2002.-2003.- Gost profesor na Sveučilištu u Denveru, Denver, Colorado, SAD
- 2005. Tečaj primjene programa MAUD u Rietveldovoj analizi, Riva Del Garda (TN), Italija

Područje istraživanja i znanstveni interes

Nanoznanost (sinteza i *karakterizacija*); *Čvrste otopine*; Primjena metoda usklađivanja difrakcijskih slika praha i pretražnog elektronskog mikroskopa u analizi strukturnih defekata; Sinteza i primjena cirkonijevih keramika; Mehanokemija

Znanstvene aktivnosti

Nagrade: 2015: Nagrada Instituta Ruđer za značajnu publikaciju u 2013. godini

2014: Nagrada Zavoda za kemiju materijala za najbolju publikaciju u 2013. godini

2012: Nagrada Instituta Ruđer za značajnu publikaciju u 2011. godini

Projekti: 2016-2017: Glavni istraživač na Hrvatsko-Slovenskom bilateralnom projektu: "Processing of High-performance Zirconia Bioceramics for Dental Application"

2015-2016: Glavni istraživač na Hrvatsko-Francuskom bilateralnom projektu: "Impact of surface defects in yttria-stabilized zirconia on catalytic oxidation of carbon monoxide"

2013-2014: Glavni istraživač na Hrvatsko-Njemačkom bilateralnom projektu: "Ultrasml metal oxide semiconductor nanoparticles for energy storage: synthesis and advanced characterization"; MZOS-DAAD

1997-2000: Glavni istraživač na projektu za mlade znanstvenike: "Physico-chemical and structural properties of ZrO₂ and HfO₂"

1996-2013: Istraživač na MZOS projektu: "Synthesis and microstructure of metal oxides and oxide glasses", glavni istraživač dr.sc. Svetozar Musić (do 2011.), dr. sc. Mira Ristić (od 2011.)

1992-1996: Istraživač na MZOS projektu: "Study of metal oxides, oxide glasses and zeolites", glavni istraživač dr.sc. Svetozar Musić

Plenarna predavanja: 2015: "Stabilization of High-Temperature ZrO₂ Polymorphs at Room Temperature", Saint-Gobain, Cavillion, Francuska (19. 05. 2015).

2001: "Factors influencing the stability of low temperature tetragonal ZrO₂" na Institutu Fritz Haber Društva Max Planck, Berlin (11. lipnja 2001).

Popularizacija znanosti: 2016-2013. *Voditelj punkta "Pogled u nevidljivi svijet" na*

Otvorenim danima instituta Ruđer Bošković, prikaz rada pretražnog elektronskog mikroskopa

2011.- Održavanje popularnih predavanja "Svijet materijala" na hrvatskom radiju, u osnovnim i srednjim školama, te na Otvorenim danima instituta "Ruđer Bošković"

Znanstvene publikacije

>50 publikacija citiranih u bazi Current Contents; više od >850 citata (>650 citata bez samocitiranja autora); H-index = 19; Glavni autor na 30 publikacija

Mirjana Bijelić, 353726: Životopis

Rođena 14. 10. 1973., Požega, Hrvatska

Curriculum

2001. Magistra edukacije fizike i politehnike, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

2013.-2016. Poslijediplomski studij iz područja kemija, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

2016. **Dr. sc. prirodnih znanosti, područje kemija**, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

2001.-danas Viši tehničar, Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Područje znanstvenog interesa

Rendgenska strukturna analiza (XRD), Transmisijska elektronska mikroskopija/Elektronska difrakcija (TEM/SAED), Rješavanje struktura polikristalnih uzoraka, Rietveldova metoda, Metalni oksidi, Nanomaterijali, Funkcionalni materijali (Lionske baterije), Sol-gel kemija, Otopinska kemija

Znanstvena aktivnost

- **Član Organizacijskog odbora** :16. Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting, Petrčane, Croatia, 13 – 17 Lipnj 2007, 17. Slovenian-Croatian- Crystallographic Meeting, Ptuj, Slovenia, 19 - 22 Lipanj 2008, 18. Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting, Varaždin, Croatia, 17 - 21 Lipanj 2009, 19. Slovenian-Croatian-Crystallographic Meeting, Strunjan, Slovenia, 16 - 20 Lipanj 2010, 20. Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting, Baška, Croatia, 15 - 19 June, 2011, 21. Slovenian-Croatian- Crystallographic Meeting, Pokljuka, Slovenia, 16 - 20 Lipanj 2012, 22. Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting, Biograd, Croatia, 12 - 16 Lipanj 2013, 23. Slovenian-Croatian- Crystallographic Meeting , Logarska dolina, Slovenia, 18 - 22 Lipanj 2014, 24. Croatian-Slovenian Crystallographic Meeting, Bol, Croatia, 21 – 25 Rujan 2016
- **Član Organizacijskog odbora** 29. European Crystallography Meeting, Rovinj 2015.
- **Sudjelovanje u organizaciji** 41. međunarodne fizičke olimpijade, Zagreb 2010.

Znanstvene publikacije

- **7 znanstvenih radova u časopisima koje citira baza Current Contents (CC)**
 - **1 znanstveni rad u ostalim časopisima**
 - **5 kongresnih priopćenja u časopisu koji citira CC**
 - **14 priopćenja u knjigama sažetaka s različitih domaćih i međunarodnih kristalografskih i mikroskopskih konferencija**
1. **M. Bijelić**, X. Liu, Q Sun, A. B. Djurišić, H. M. Xie, A. M. C. Ng, C. Suchomski, I. Djerdj, Ž. Skoko, J. Popovic. *J. Mater. Chem. A*. 3 (2015) 14759
 2. A. Tonejc, D. Medaković, S. Popović, A. Jaklin, **M. Bijelić**, I. Lončarek. *Croat. Chem. Acta*. 87 (2014) 143
 3. M. Vrankić, K. Žagar, **M. Bijelić**, J. Popović, B. Gržeta, S. Kurajica. *J. Phys. Chem. Solids*. 75 (2014) 1240
 4. J. Popović, B. Gržeta, E. Tkalčec, A. M. Tonejc, **M. Bijelić**, C. Goebbert. *Mater. Sci. Eng., B - Sol. Stat. Mater. Advanc. Techn.* 176 (2011) 98
 5. M. Mustapić, D. Pajić, N. Novosel, E. Babić, K. Zadro, M. Cindrić, J. Horvat, Z. Skoko, **M. Bijelić**, A. Shcherbakov. *Croat. Chem. Acta*. 83 (2010) 275
 6. I. Djerdj, A. Tonejc, **M. Bijelić**, M. Buljan, V. U. Desnica, R. Kalish. *Mater. Sci. Eng., C* 26 (2006) 1202
 7. I. Djerdj, A. M. Tonejc, **M. Bijelić**, V. Vraneša, A. Turković. *Vacuum*. 80 (2005) 3

Davor Ristić, 290651: Životopis

Rođen 7. 12. 1982., Osijek, Hrvatska

Curriculum

2006.	Diplomirani inženjer fizike, Prirodoslovno Matematički Fakultet Sveučilišta u Zagrebu
2010.	Doktorat iz Fizike kondenzirane materije, Prirodoslovno Matematički Fakultet Sveučilišta u Zagrebu
2010. – 2013.	Postdok na Istituto di Fotonica e Nanotecnologie- Consiglio Nazionale delle Ricerche, Trento, Italija
2013. – danas	Znanstveni suradnik Laboratorij za molekulska fiziku i sinteze novih materijala, Zavod za fiziku materijal, Institut Ruđer Bošković

Područje znanstvenog interesa

- Fotonika, sferni mikrozonatori, Ramanova spektroskopija

Znanstvena aktivnost**Suradnik na 2 projekta:**

4. 2010-2013 "Novel silicon based materials for optoelectronics"; Voditelj: D. Ristić; Financira: FP7 "People" - "Campaign Marie Curie" – COFUND, by Provincia Autonoma di Trento (PAT project).
5. 2007-2012 "Fizika i primjena nanostrukture i volumne tvari", Voditelj: K. Furić, Financira MZOS Republike Hrvatske

Znanstvene publikacije**26 znanstvenih radova u CC časopisima (WoS) (citirani 207 puta, h- index 7)**

7. D. Ristić, M. Mazzola, A. Chiappini, A. Rasoloniaina, P. Féron, R. Ramponi, G. C. Righini, G. Cibiel, M. Ivanda, and M. Ferrari, Tailoring of the free spectral range and geometrical cavity dispersion of a microsphere by a coating layer, *Optics Letters*, 39, 5173–5176 (2014).
8. D. Ristić, A. Rasoloniaina, A. Chiappini, P. Féron, S. Pelli, G. Nunzi Conti, M. Ivanda, G. C. Righini, G. Cibiel and M. Ferrari, "About the role of phase matching between a coated microsphere and a tapered fiber: experimental study" , *Optic Express*, 21, 20954–20963 (2013).
9. D. Ristić, M. Ivanda, G. Speranza, Z. Siketić, I. Bogdanović-Radović, M. Marciuš, M. Ristić, O. Gamulin, S. Musić, K. Furić, G. C. Righini, M. Ferrari, Local Site Distribution of Oxygen in Silicon-Rich Oxide Thin Films: A Tool to Investigate Phase Separation, *J. Phys. Chem. C*, 116, 10039–10047 (2012).
10. G.C. Righini, Y. Dumeige, P. Féron, M. Ferrari, D. Ristić, S. Soria, Whispering gallery mode microresonators: fundamentals and applications, *La Rivista del Nuovo Cimento*, 34, 435 (2011).
11. D. Ristić, V. Holý, M. Ivanda, M. Marciuš, M. Buljan, O. Gamulin, K. Furić, M. Ristić, S. Musić, M. Mazzola, A. Chiasera, M. Ferrari and G.C. Righini, Surface characterization of thin silicon-rich oxide films, *J. Mol. Struct.*, 993, 214-218 (2011).

Zvonko Jagličić: Životopis

Rođen 29. 09. 1966., Murska Sobota, Slovenia

Curriculum

1990.-1996. Institute of Mathematics, Physics and Mechanics (IMFM)
1996. Dr. sc. iz polja fizike, University of Ljubljana
1997. - danas University of Ljubljana, Faculty of civil and geodetic engineering (FGG, as Full Professor from 2015) and IMFM

Područje istraživanja i znanstveni interes

- SQUID magnetometrija
- Molekularni magneti
- Kompleksne metalne legure
- Frustrirani sistemi
- Nanočestice
- Multiferoici
- Fizika građevinarstva

Znanstvene aktivnosti

- 2009.-2013. Pročelnik Odjela matematike i fizike, FGG
- 2009.-danas, Predstojnik Zavoda za fiziku IMFM
- Mentor 2 PhD studenta i 2 MSc studenta
- Voditelj nacionalnog programa i projekata: (2009.-danas) New imaging and analytic methods, (2004.-2007.) Study of magnetism in new complex materials, 9 bilateralnih projekata
- Gostujuće pozicije: Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB) Institute, Berlin, Institute for Inorganic Chemistry, University of Valencia, Forschungszentrum Julich GmbH, Germany, Korea Basic Science Institute, Slovak Academy of Sciences

Znanstvene publikacije

219 publikacija u WoS indeksiranim časopisima (preko 2000 citata, h=20)

1. Z. Wang, **Z. Jagličić**, Lu-Lu Han, G.L. Zhuang, G.G. Luo, S.Y. Zeng, C.H. Tunga and Di Sun, *CrystEngComm* **18**, 3462–3471, (2016).
2. I. Djerdj, J. Popović, S. Mal, T. Weller, M. Nuskol, **Z. Jagličić**, Ž. Skoko, D. Pajić, C. Suchomski, P. Voepel, R. Marschall, B. Kozlevčar, and B. M. Smarsly, *Crystal Growth & Design* **16**, 2535-2541, (2016).
3. A. Zorko, M. Pregelj, M. Gomilšek, **Z. Jagličić**, D. Pajić, M. Telling, I. Arčon, I. Mikulska, M. Valant, *Scientific reports* 2015, 7703-1-7703-7 (2015).
4. T. Đorđević, A. Wittwer, **Z. Jagličić**, I. Djerdj, *RSC advances* **5**, 18280-18287, (2015).
5. P. Koželj, S. Vrtnik, A. Jelen, S. Jazbec, **Z. Jagličić**, S. Maiti, M. Feuerbacher, W. Steurer, J. Dolinšek, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 107001-1-107001-5, (2014)
6. **Z. Jagličić**, D. Pajić, Z. Trontelj, J. Dolinšek, M. Jagodič, *Appl. phys. lett.* **102**, 242410-1-242410-4 (2013).
7. **Z. Jagličić**, M. Zentková, M. Mihalik, Z. Arnold, M. Drogenik, M. Kristl, B. Dojer, M. Kasunič, A. Golobič, M. Jagodič, *J. phys., Condens. matter* **24**, 056002 (2012)
8. A. Zorko, P. Jeglič, A. Potočnik, D. Arčon, A. Balčytis, **Z. Jagličić**, X. Liu, A.L. Tchougréeff, R. Dronskowski, *Phys. rev. lett.* **107**, 047208-1-047208-4, (2011).
9. **Z. Jagličić**, M. Jagodič, B. Grushko, E.S. Zijlstra, Th. Weber, W. Steurer, J. Dolinsek, *Intermetallics* **18** 623-632 (2010).
10. P. Malinowski, M. Derzsi, Z. Mazej, **Z. Jagličić**, B. Gawel, W. Lasocha, W. Grochala, Wojciech, *Angew. Chem.* **49**, 1683-1686, (2010).

Reference

1. Aguilar, Z., *Nanomaterials for Medical Applications*. Nanomaterials for Medical Applications. 2013.
2. Aricò, A.S., et al., *Nanostructured materials for advanced energy conversion and storage devices*. *Nature Materials*, 2005. **4**(5): p. 366-377.
3. Kotnala, R.K. and J. Shah, *Ferrite Materials: Nano to Spintronics Regime*, in *Handbook of Magnetic Materials*. 2015. p. 291-379.
4. Wolf, S.A., et al., *Spintronics: A spin-based electronics vision for the future*. *Science*, 2001. **294**(5546): p. 1488-1495.
5. Žutić, I., J. Fabian, and S.D. Sarma, *Spintronics: Fundamentals and applications*. *Reviews of Modern Physics*, 2004. **76**(2): p. 323-410.
6. Prinz, G.A., *Magnetoelectronics*. *Science*, 1998. **282**(5394): p. 1660-1663.
7. Scott, J.F., *Applications of modern ferroelectrics*. *Science*, 2007. **315**(5814): p. 954-959.
8. Ziese, M., *Extrinsic magnetotransport phenomena in ferromagnetic oxides*. *Reports on Progress in Physics*, 2002. **65**(2): p. 143-249.
9. Eerenstein, W., N.D. Mathur, and J.F. Scott, *Multiferroic and magnetoelectric materials*. *Nature*, 2006. **442**(7104): p. 759-765.
10. Cheong, S.W. and M. Mostovoy, *Multiferroics: A magnetic twist for ferroelectricity*. *Nature Materials*, 2007. **6**(1): p. 13-20.
11. Fiebig, M., *Revival of the magnetoelectric effect*. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2005. **38**(8): p. R123-R152.
- 11a. Djerdj, I., Popovic, J., Mal, S., Weller, T., Nuskol, M., Jagličić, Z., Skoko, Ž., Pajić, D., Suchomski, C., Voepel, P., Marschall, R., Kozlevčar B., Smarsly B. M., *Aqueous Sol–Gel Route toward Selected Quaternary Metal Oxides with Single and Double Perovskite-Type Structure Containing Tellurium*, *Cryst. Growth Des.*, 2016. **16**: p. 2535-2541.
12. Tokura, Y., *Multiferroics as quantum electromagnets*. *Science*, 2006. **312**(5779): p. 1481-1482.
13. Wang, J., et al., *Epitaxial BiFeO₃ Multiferroic Thin Film Heterostructures*. *Science*, 2003. **299**(5613): p. 1719-1722.
14. Hur, N., et al., *Electric polarization reversal and memory in a multiferroic material induced by magnetic fields*. *Nature*, 2004. **429**(6990): p. 392-395.
15. Kimura, T., et al., *Magnetic control of ferroelectric polarization*. *Nature*, 2003. **426**(6962): p. 55-58.
16. Scott, J.F. and R. Blinc, *Multiferroic magnetoelectric fluorides: Why are there so many magnetic ferroelectrics?* *Journal of Physics Condensed Matter*, 2011. **23**(11).
17. Wang, K.F., J.M. Liu, and Z.F. Ren, *Multiferroicity: The coupling between magnetic and polarization orders*. *Advances in Physics*, 2009. **58**(4): p. 321-448.
18. Nan, C.-W., et al., *Multiferroic magnetoelectric composites: Historical perspective, status, and future directions*. *Journal of Applied Physics*, 2008. **103**(3): p. -.
19. Balaev, A.D., et al., *Magnetic properties of trigonal GdFe₃(BO₃)₄*. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2003. **258-259**: p. 532-534.
20. Van Aken, B.B., et al., *The origin of ferroelectricity in magnetoelectric YMnO₃*. *Nat Mater*, 2004. **3**(3): p. 164-170.
21. Tokura, Y. and S. Seki, *Multiferroics with Spiral Spin Orders*. *Advanced Materials*, 2010. **22**(14): p. 1554-1565.
22. Van Den Brink, J. and D.I. Khomskii, *Multiferroicity due to charge ordering*. *Journal of Physics Condensed Matter*, 2008. **20**(43).
23. Becker, R., M. Johnsson, and H. Berger, *A new synthetic cobalt tellurate: Co₃TeO₆*. *Acta Crystallographica Section C*, 2006. **62**(8): p. i67-i69.
24. Khomskii, D.I., *Multiferroics: Different ways to combine magnetism and ferroelectricity*. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2006. **306**(1): p. 1-8.
25. Kanai, T., et al., *A Ferroelectric Ferromagnet Composed of (PLZT)_x(BiFeO₃)_{1-x} Solid Solution*. *Advanced Materials*, 2001. **13**(7): p. 487-490.
26. Bock, O. and U. Muller, *Symmetrieverwandtschaften bei Varianten des Perowskit-Typs*. *Acta Crystallographica Section B*, 2002. **58**(4): p. 594-606.

27. Horiuchi, S., et al., *Above-room-temperature ferroelectricity in a single-component molecular crystal*. *Nature*, 2010. **463**(7282): p. 789-792.
28. Rogez, G., N. Viart, and M. Drillon, *Multiferroic Materials: The Attractive Approach of Metal–Organic Frameworks (MOFs)*. *Angewandte Chemie International Edition*, 2010. **49**(11): p. 1921-1923.
29. Cheetham, A.K., G. Férey, and T. Loiseau, *Open-framework inorganic materials*. *Angewandte Chemie - International Edition*, 1999. **38**(22): p. 3269-3292.
30. Cheetham, A.K. and C.N.R. Rao, *There's Room in the Middle*. *Science*, 2007. **318**(5847): p. 58-59.
31. Férey, G. and A.K. Cheetham, *Prospects for giant pores*. *Science*, 1999. **283**(5405): p. 1125.
32. Kitagawa, S., R. Kitaura, and S.-i. Noro, *Functional Porous Coordination Polymers*. *Angewandte Chemie International Edition*, 2004. **43**(18): p. 2334-2375.
33. Rao, C.N.R., S. Natarajan, and R. Vaidyanathan, *Metal Carboxylates with Open Architectures*. *Angewandte Chemie International Edition*, 2004. **43**(12): p. 1466-1496.
34. Kuppler, R.J., et al., *Potential applications of metal-organic frameworks*. *Coordination Chemistry Reviews*, 2009. **253**(23–24): p. 3042-3066.
35. Cui, H., et al., *Ferroelectric Porous Molecular Crystal, [Mn₃(HCOO)₆](C₂H₅OH), Exhibiting Ferrimagnetic Transition*. *Journal of the American Chemical Society*, 2006. **128**(47): p. 15074-15075.
36. Cui, H.-B., et al., *Dielectric Properties of Porous Molecular Crystals That Contain Polar Molecules*. *Angewandte Chemie International Edition*, 2005. **44**(40): p. 6508-6512.
37. Jain, P., et al., *Order–Disorder Antiferroelectric Phase Transition in a Hybrid Inorganic–Organic Framework with the Perovskite Architecture*. *Journal of the American Chemical Society*, 2008. **130**(32): p. 10450-10451.
38. Jain, P., et al., *Multiferroic Behavior Associated with an Order–Disorder Hydrogen Bonding Transition in Metal–Organic Frameworks (MOFs) with the Perovskite ABX₃ Architecture*. *Journal of the American Chemical Society*, 2009. **131**(38): p. 13625-13627.
39. Wang, X.-Y., et al., *Perovskite-like Metal Formates with Weak Ferromagnetism and as Precursors to Amorphous Materials*. *Inorganic Chemistry*, 2004. **43**(15): p. 4615-4625.
40. Stroppa, A., et al., *Electric Control of Magnetization and Interplay between Orbital Ordering and Ferroelectricity in a Multiferroic Metal–Organic Framework*. *Angewandte Chemie International Edition*, 2011. **50**(26): p. 5847-5850.
41. Stroppa, A., et al., *Hybrid Improper Ferroelectricity in a Multiferroic and Magnetoelectric Metal–Organic Framework*. *Advanced Materials*, 2013. **25**(16): p. 2284-2290.
42. Di Sante, D., et al., *Tuning the Ferroelectric Polarization in a Multiferroic Metal–Organic Framework*. *Journal of the American Chemical Society*, 2013. **135**(48): p. 18126-18130.
43. Tian, Y., et al., *Cross coupling between electric and magnetic orders in a multiferroic metal-organic framework*. *Sci. Rep.*, 2014. **4**.
44. Tian, Y., et al., *Electric control of magnetism in a multiferroic metal–organic framework*. *physica status solidi (RRL) – Rapid Research Letters*, 2014. **8**(1): p. 91-94.
45. Xu, G.-C., et al., *Coexistence of Magnetic and Electric Orderings in the Metal–Formate Frameworks of [NH₄][M(HCOO)₃]*. *Journal of the American Chemical Society*, 2011. **133**(38): p. 14948-14951.
46. Wang, Z., et al., *Anionic NaCl-type frameworks of [MnII(HCOO)₃], templated by alkylammonium, exhibit weak ferromagnetism*. *Dalton Transactions*, 2004(15): p. 2209-2216.
47. Zhou, B., et al., *Giant Dielectric Anomaly of a Metal–Organic Perovskite with Four-Membered Ring Ammonium Cations*. *Angewandte Chemie International Edition*, 2011. **50**(48): p. 11441-11445.
48. Hu, K.-L., et al., *Metal–Organic Perovskites: Synthesis, Structures, and Magnetic Properties of [C(NH₂)₃][MII(HCOO)₃] (M=Mn, Fe, Co, Ni, Cu, and Zn; C(NH₂)₃= Guanidinium)*. *Chemistry – A European Journal*, 2009. **15**(44): p. 12050-12064.
49. Li, M.-Y., et al., *Metal–Organic Niccolite: Synthesis, Structures, Phase Transition, and Magnetic Properties of [CH₃NH₂(CH₂)₂NH₂CH₃][M₂(HCOO)₆] (M=divalent Mn, Fe, Co, Ni, Cu and Zn)*. *Chemistry – An Asian Journal*, 2011. **6**(11): p. 3084-3096.
50. Wang, Z., et al., *[CH₃NH₂(CH₂)₂NH₂CH₃][M₂(HCOO)₆] (M = MnII and CoII): Weak Ferromagnetic Metal Formate Frameworks of Unique Binodal 6-Connected (412.63)(49.66) Topology, Templated by a Diammonium Cation*. *Inorganic Chemistry*, 2007. **46**(21): p. 8439-8441.

51. Wang, Z., et al., *Formate-Based Magnetic Metal–Organic Frameworks Templated by Protonated Amines*. *Advanced Materials*, 2010. **22**(13): p. 1526-1533.
52. Pato-Doldan, B., et al., *Coexistence of magnetic and electrical order in the new perovskite-like $(C_3N_2H_5)[Mn(HCOO)_3]$ formate*. *RSC Advances*, 2013. **3**(44): p. 22404-22411.
53. Wang, Z.M., et al., *$[Fe_3(HCOO)_6]$: A Permanent Porous Diamond Framework Displaying H_2/N_2 Adsorption, Guest Inclusion, and Guest-Dependent Magnetism*. *Advanced Functional Materials*, 2007. **17**(9): p. 1523-1536.
54. Liu, B., et al., *A New Series of Chiral Metal Formate Frameworks of $[HONH_3][MII(HCOO)_3]$ ($M = Mn, Co, Ni, Zn, \text{ and } Mg$): Synthesis, Structures, and Properties*. *Inorganic Chemistry*, 2012. **51**(24): p. 13363-13372.
55. Chen, S., et al., *$[NH_2NH_3][M(HCOO)_3]$ ($M = Mn^{2+}, Zn^{2+}, Co^{2+}$ and Mg^{2+}): structural phase transitions, prominent dielectric anomalies and negative thermal expansion, and magnetic ordering*. *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2014. **1**(1): p. 83-98.
56. Miller, J.S., *Magnetically ordered molecule-based materials*. *Chemical Society Reviews*, 2011. **40**(6): p. 3266-3296.
57. Zhao, X.-H., et al., *Cation-Dependent Magnetic Ordering and Room-Temperature Bistability in Azido-Bridged Perovskite-Type Compounds*. *Journal of the American Chemical Society*, 2013. **135**(43): p. 16006-16009.
58. Hang, T., et al., *Metal-organic complex ferroelectrics*. *Chemical Society Reviews*, 2011. **40**(7): p. 3577-3598.
59. Cai, H.-L., et al., *Above-Room-Temperature Magnetodielectric Coupling in a Possible Molecule-Based Multiferroic: Triethylmethylammonium Tetrabromoferrate(III)*. *Journal of the American Chemical Society*, 2012. **134**(45): p. 18487-18490.
60. Kundys, B., et al., *Multiferroicity and hydrogen-bond ordering in $(C_2H_5NH_3)_2CuCl_4$ featuring dominant ferromagnetic interactions*. *Physical Review B*, 2010. **81**(22): p. 224434.
61. Schmid, H., *Multi-ferroic magnetoelectrics*. *Ferroelectrics*, 1994. **162**(1): p. 317-338.
62. Venevtsev, Y.N. and V.V. Gagulin, *Search, design and investigation of seignettomagnetic oxides*. *Ferroelectrics*, 1994. **162**(1): p. 23-31.
63. Wang, X.-Y., Z.-M. Wang, and S. Gao, *Constructing magnetic molecular solids by employing three-atom ligands as bridges*. *Chemical Communications*, 2008(3): p. 281-294.
64. Brennan, C.J., *A physical model for the electrical hysteresis of thin-film ferroelectric capacitors*. *Ferroelectrics*, 1992. **132**(1): p. 245-257.
65. Zhang, W. and R.-G. Xiong, *Ferroelectric Metal–Organic Frameworks*. *Chemical Reviews*, 2011. **112**(2): p. 1163-1195.
66. Brammer, L., *Hydrogen Bonds in Inorganic Chemistry: Application to Crystal Design*, in *Crystal Design: Structure and Function*. 2003, John Wiley & Sons, Ltd. p. 1-75.
67. Pilkington, M. and S. Decurtins, *A Rational Approach for the Self-Assembly of Molecular Building Blocks in the Field of Molecule-Based Magnetism*, in *Crystal Design: Structure and Function*. 2003, John Wiley & Sons, Ltd. p. 275-323.
68. Felser, C., G.H. Fecher, and B. Balke, *Spintronik: eine Herausforderung für Materialwissenschaften und Festkörperchemie*. *Angewandte Chemie*, 2007. **119**(5): p. 680-713.
69. Shang, R., et al., *Zinc-Diluted Magnetic Metal Formate Perovskites: Synthesis, Structures, and Magnetism of $[CH_3NH_3][MnxZn_{1-x}(HCOO)_3]$ ($x=0-1$)*. *Chemistry – An Asian Journal*, 2012. **7**(7): p. 1697-1707.
70. Zhao, J.-P., et al., *Magnetic Behavior Control in Niccolite Structural Metal Formate Frameworks $[NH_2(CH_3)_2][FeIIMII(HCOO)_6]$ ($M = Fe, Mn, \text{ and } Co$) by Varying the Divalent Metal Ions*. *Inorganic Chemistry*, 2010. **49**(22): p. 10390-10399.
71. Hagen, K.S., et al., *Intensely Colored Mixed-Valence Iron(II) Iron(III) Formate Analogue of Prussian Blue Exhibits Néel N-Type Ferrimagnetism*. *Journal of the American Chemical Society*, 2009. **131**(22): p. 7516-7517.
72. Friscic, T., *Supramolecular concepts and new techniques in mechanochemistry: cocrystals, cages, rotaxanes, open metal-organic frameworks*. *Chemical Society Reviews*, 2012. **41**(9): p. 3493-3510.
73. Yuan, F., et al., *Complex Ammine Titanium(III) Borohydrides as Advanced Solid Hydrogen-Storage Materials with Favorable Dehydrogenation Properties*. *Chemistry of Materials*, 2012. **24**(17): p. 3370-3379.

74. Friščić, T., et al., *Ion- and Liquid-Assisted Grinding: Improved Mechanochemical Synthesis of Metal–Organic Frameworks Reveals Salt Inclusion and Anion Templating*. *Angewandte Chemie International Edition*, 2010. **49**(4): p. 712-715.
75. Friscic, T., et al., *Real-time and in situ monitoring of mechanochemical milling reactions*. *Nat Chem*, 2013. **5**(2): p. 145-145.
76. Bilecka, I., I. Djerdj, and M. Niederberger, *One-minute synthesis of crystalline binary and ternary metal oxide nanoparticles*. *Chemical Communications*, 2008(7): p. 886-888.
77. Altomare, A., et al., *The dual-space resolution bias correction algorithm: applications to powder data*. *Journal of Applied Crystallography*, 2010. **43**(4): p. 798-804.
78. Altomare, A., et al., *EXPO2009: structure solution by powder data in direct and reciprocal space*. *Journal of Applied Crystallography*, 2009. **42**(6): p. 1197-1202.
79. Altomare, A., et al., *EXPO2013: a kit of tools for phasing crystal structures from powder data*. *Journal of Applied Crystallography*, 2013. **46**(4): p. 1231-1235.
80. Favre-Nicolin, V. and R. Cerny, *FOX, 'free objects for crystallography': a modular approach to ab initio structure determination from powder diffraction*. *Journal of Applied Crystallography*, 2002. **35**(6): p. 734-743.
81. Harris, K.D.M., R.L. Johnston, and B.M. Kariuki, *The Genetic Algorithm: Foundations and Applications in Structure Solution from Powder Diffraction Data*. *Acta Crystallographica Section A*, 1998. **54**(5): p. 632-645.
82. Palatinus, L., *The charge-flipping algorithm in crystallography*. *Acta Crystallographica Section B*, 2013. **69**(1): p. 1-16.
83. Djerdj, I., et al., *Nanocrystalline hybrid inorganic-organic one-dimensional chain systems tailored with 2- and 3-phenyl ring monocarboxylic acids*. *Journal of Materials Chemistry*, 2012. **22**(20): p. 10255-10265.
84. Kurajica, S., et al., *A structural investigation of tris(ethyl acetoacetate)aluminium (III)*. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 2014. **71**(2): p. 217-223.
85. Rodríguez-Carvajal, J., *Recent advances in magnetic structure determination by neutron powder diffraction*. *Physica B: Condensed Matter*, 1993. **192**(1–2): p. 55-69.
86. Rožič, B., et al., *Mixtures of Magnetic Nanoparticles and the Ferroelectric Liquid Crystal: New Soft Magnetoelectrics*. *Ferroelectrics*, 2012. **431**(1): p. 150-153.