

Srpsko hemijsko društvo



Serbian Chemical Society

**59. Savetovanje
Srpskog hemijskog društva**

**KRATKI IZVODI
RADOVA**

KNJIGA RADOVA

**59th Meeting of
the Serbian Chemical Society**

**Book of Abstracts
Proceedings**

**Novi Sad 1. i 2. jun 2023. godine
Novi Sad, Serbia, June 1-2, 2023**

CIP- Katalogizacija u publikaciji
Narodna biblioteka Srbije, Beograd

59. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA,
Novi Sad, 1. i 2. jun 2023.

KRATKI IZVODI RADOVA/KNJIGA RADOVA
59th MEETING OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY

Novi Sad, Serbia, 1-2 June 2023

BOOK OF ABSTRACTS/PROCEEDINGS

Izdaje/Published by

Srpsko hemijsko društvo/Serbian Chemical Society

Karnegijeva 4/III, 11000 Beograd, Srbija

tel./fax: +381 11 3370 467; www.shd.org.rs, E-mail: office@shd.org.rs

Za izdavača/For Publisher

Dušan Sladić, predsednik Srpskog hemijskog društva

Glavni i odgovorni urednik/ Editor

Daniela Šojić Merkulov

Uređivački odbor/Editorial Board

Suzana Jovanović-Šanta, Stanislava Olić Ninković, Ksenija Pavlović, Aleksandar Oklješa

Priprema za štampu i štampa/Prepress and printing

Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva Tehnološko-metalurškog

fakulteta, Beograd / Research and Development Centre of Printing Engineering, Belgrade

Tiraž/ Circulation

30 primeraka/ 30 copies printing

ISBN 978-86-7132-081-8

Naučni odbor

Scientific Committee

Daniela Šojić Merkulov,
predsednik/chair

Dušan Sladić

Vesna Mišković Stanković

Olgica Nedić

Dragica Trivić

Slađana Alagić

Snežana Rajković

Aleksandar Bojić

Dušanka Milojković Opsenica

Dejan Opsenica

Maja Radetić

Branka Petković

Ljiljana Vojinović Ješić

Igor Opsenica

Milan Vraneš

Biljana Šmit

Sanja Panić

Jovana Francuz

Ivan Ristić

Milena Krstić

Vesna Despotović

Dragana Tomašević Pilipović

Marija Nikolić

Branislav Šojić

Tamara Premović



Organizacioni odbor

Organising Committee

Suzana Jovanović-Šanta,
predsednik/chair

Srđan Miletić

Zorica Stojanović

Bojana Srećo Zelenović

Ksenija Pavlović

Aleksandar Oklješa

Mirjana Radanović

Tamara Ivetić

Stanislava Olić Ninković

Danica Jović

Mirjana Petronijević

Ružica Ždero Pavlović

Sofija Bekić

Snežana Papović

Jelena Bajac

Ana Đurović

Tatjana Jurić

Tatjana Majkić

Jelena Tanasić

Tijana Marjanović

Marija Kostić



Savetovanje je podržalo /Supported by

Ministarstvo nauke, tehnološkog razvoja i inovacija Republike Srbije

Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia

Теоријско проучавање утицаја халогених супституената на осетљивост полицикличних нитроароматичних експлозива

Ивана С. Вељковић¹, Александра Б. Ђуновић², Душан Ж. Вељковић³

¹ Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију – Институт од националног значаја за Републику Србију, Његошева 12, Београд

² Иновациони центар Хемијског факултета у Београду, Студентски трг 12-16, Београд

³ Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд

Позитивне вредности електростатичких потенцијала на површини високоенергетских молекула представљају добар индикатор њихове детонабилности. У овом раду смо на основу прорачуна енергија дисоцијације веза и електростатичких потенцијала анализирали утицај присуства халогених супституената на детонационе особине одабраних динитронафталена са халогеним супституентима. Резултати *ab initio* прорачуна указују да халогени супституенти могу да утичу на геометрију нитро-група и да доведу до смањења стабилности најслабијих C-N веза. Халогени супституенти такође утичу на вредности електростатичких потенцијала у централним деловима површине испитиваних молекула.

Theoretical study of the influence of halogen substituents on sensitivity of polycyclic nitroaromatic explosives

Ivana S. Veljković¹, Aleksandra B. Đunović², Dušan Ž. Veljković³

¹ University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Njegoševa 12, Belgrade

² Innovative Centre of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade

³ University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade

Positive values of electrostatic potential on the surface of high-energy molecules are a good indicator of the high sensitivity towards detonation. Here we used Bond Dissociation Energy and Molecular Electrostatic Potential calculations to predict the influence of the halogen substituents on the detonation properties of selected halogen-containing dinitronaphthalenes. Results of *ab initio* calculations indicated that halogen substituents may affect the geometry of the nitro- groups and lead to decreased stability of the weakest C-N bonds. Presence of halogen substituents also affects the values of the electrostatic potentials in the central regions of the molecular surfaces.

Acknowledgment: This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM. This research has been financially supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia (Contract No: 451-03-47/2023-01/200026, 451-03-47/2023-01/200288 and 451-03-47/2023-01/200168).