

**Srpsko hemijsko društvo**



**Serbian Chemical Society**

**58. Savetovanje  
Srpskog hemijskog društva**

**KRATKI IZVODI  
RADOVA  
KNJIGA RADOVA**

**58<sup>th</sup> Meeting of  
the Serbian Chemical Society**

**Book of Abstracts  
Proceedings**

**Beograd 9. i 10. jun 2022. godine  
Belgrade, Serbia, June 9-10, 2022**

CIP - Katalogizacija u publikaciji - Narodna biblioteka Srbije, Beograd  
54(082)  
577.1(082)  
66(082)  
66.017/.018(082)  
502/504(082)  
СРПСКО хемијско друштво. Саветовање (58 ; 2022 ; Београд)  
Kratki izvodi radova ; [i] Knjiga radova / 58. savetovanje Srpskog  
hemijskog društva, Beograd 9. i 10. jun 2022. godine = Book of Abstracts  
[end] Proceedings = 58th meeting of the Serbian Chemical Society, Belgrade,  
June 9-10, 2022 ; [glavni i odgovorni urednik, editor Bogdan Šolaja]. -  
Beograd : Srpsko hemijsko društvo = Serbian Chemical Society, 2022 (Beograd  
: Razvojno-istraživački centar grafičkog inženjerstva TMF). - 226 str. :  
ilustr. ; 25 cm  
Radovi na srp. i engl. jeziku. - Tekst ćir. i lat. - Tiraž 30. -  
Bibliografija uz pojedine radove.  
ISBN 978-86-7132-079-5  
a) Хемија - Зборници b) Биохемија - Зборници c) Технологија -  
Зборници d) Наука о материјалима - Зборници e) Животна средина -  
Зборници  
COBISS.SR-ID 67900169

**58. SAVETOVANJE SRPSKOG HEMIJSKOG DRUŠTVA,**  
*Beograd, 9. i 10. jun 2022.*

**KRATKI IZVODI RADOVA/KNJIGA RADOVA**  
**58<sup>th</sup> MEETING OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY**  
*Belgrade, Serbia, 9-10 June 2022*  
**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](http://www.shd.org.rs), E-mail: [office@shd.org.rs](mailto:office@shd.org.rs)

**Za izdavača/For Publisher**

**Dušan Sladić**, predsednik Srpskog hemijskog društva

**Glavni i odgovorni urednik/ Editor**

**Bogdan Šolaja**

**Uređivački odbor/Editorial Board**

**Ivana Ivančev-Tumbas, Suzana Jovanović-Šanta, Aleksandra Tubić, Melina Kalagasidis Krušić**

**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**

**Godina izdanja: 2022.**

**Tiraž/ Circulation**

**30 primeraka/ 30 copies printing**

**ISBN 978-86-7132-079-5**

## **Naučni odbor**

Scientific Committee

**Bogdan Šolaja, predsednik/chair**

*Biljana Abramović*

*Katarina Anđelković*

*Vladimir Beškoski*

*Marija Gavrović-Jankulović*

*Branimir Grgur*

*Maja Gruden*

*Miloš Đuran*

*Vladislava Jovanović*

*Branimir Jovančićević*

*Melina Kalagasidis Krušić*

*Zorica Knežević-Jugović*

*Dragana Milić*

*Vesna Mišković-Stanković*

*Igor Opsenica*

*Ivanka Popović*

*Mirjana Popsavin*

*Niko Radulović*

*Slavica Ražić*

*Snežana Stanković*

*Gordana Stojanović*

*Dragica Trivić*

*Gordana Čirić-Marjanović*



## **Organizacioni odbor**

Organising Committee

**Dušan Sladić, predsednik/chair**

*Vladimir Beškoski*

*Slađana Đorđević*

*Ivana Ivančev-Tumbas*

*Konstantin Ilijević*

*Suzana Jovanović-Šanta*

*Branimir Jovančićević*

*Melina Kalagasidis Krušić*

*Dragana Milić*

*Vesna Mišković-Stanković*

*Andrea Nikolić*

*Igor Opsenica*

*Sanja Panić*

*Snežana Rajković*

*Goran Roglić*

*Slađana Savić*

*Života Selaković*

*Jelena Trifković*

*Aleksandra Tubić*

*Vuk Filipović*



**Savetovanje je podržalo /Supported by**

**Ministarstvo prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije**

*Ministry of Education, Science and Technological Development of Republic of Serbia*

## **Teorijsko proučavanje uticaja veličine aromatičnog sistema na osetljivost nitroaromatičnih eksploziva**

Ivana S. Veljković<sup>1</sup>, Jelena I. Radovanović<sup>2</sup>, Dušan Ž. Veljković<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Univerzitet u Beogradu - Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju - Institut od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju, Beograd, Srbija*

<sup>2</sup> *Univerzitet u Beogradu - Hemijski fakultet, Beograd, Srbija*

Jedna od ključnih osobina eksploziva koja utiče na njihovu osetljivost ka detonaciji jeste postojanje pozitivnog naelektrisanja u centralnom regionu molekula. Mape elektrostatičkih potencijala tetranitro derivata benzena, naftalena, antracena, tetracena i pentacena izračunate na PBE/6-311G\*\* nivou teorije ukazuju da produženje aromatičnog niza dovodi do smanjenja pozitivnih vrednosti naelektrisanja u centralnim delovima ispitivanih molekula.[1] Rezultati dobijeni analizom energija disocijacije hemijske veze su u skladu sa izračunatim mapama elektrostatičkog potencijala i ukazuju da se veličina aromaticnog sistema može upotrebiti za modifikaciju osetljivosti nitroaromatičnih eksploziva ka detonaciji.

## **Theoretical study of the influence of aromatic system size on the sensitivity of nitroaromatic explosives**

Ivana S. Veljković<sup>1</sup>, Jelena I. Radovanović<sup>2</sup>, Dušan Ž. Veljković<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *University of Belgrade - Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy - National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia*

<sup>2</sup> *University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia*

One of the key properties of explosives that makes them prone to detonation is a positive charge above the central regions of the molecular surface. Electrostatic potential maps were calculated for tetranitro-derivatives of benzene, naphthalene, anthracene, tetracene, and pentacene. Results of calculations performed at PBE/6-311G\*\* level show that with the increase in the number of condensed aromatic rings positive values of electrostatic potentials in the central regions of studied nitroaromatic molecules decreases.[1] Results obtained by bond dissociation energy analysis are consistent with the calculated electrostatic potential maps indicating that aromatic system size could be used as a tool to modify the sensitivity toward detonation of nitroaromatic explosives.

1. I. Veljković, J. Radovanović, D. Veljković, *RSC Adv.* **2021**, *11*, 31933.

*Acknowledgment: This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM*