

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

Ispitivanje međumolekulskih interakcija računarskim simulacijama

Milana M. Zarić^{1,2}, Mirjana Lj. Kijevčanin³, Ivona R. Radović³

¹Univerzitet u Beogradu, Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Beograd, Srbija

²Univerzitet u Beogradu, Centar za hemiju i inženjering životne sredine, Centar izuzetnih vrednosti IHTM, Beograd, Srbija

³Univerzitet u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd, Srbija

Експериментална мерења и подаци су од суштинског значаја за пружање информација о својствима и понашању смеша. Међутим, компјутерски прорачуни у комбинацији са експерименталним мерењем могу пружити дубљи увид у понашање и интеракције на молекулском нивоу.¹ За течне бинарне смеше нековалентне интеракције су проучаване квантним хемијским прорачунима и молекулско-динамичким симулацијама. Истражен је утицај различитих функционалних група, попут двоструке везе са могућношћу π - π интеракције и -ОН групе са могућношћу водоничне везе. Поред тога, проучавали смо утицај геометрије молекула на својства бинарних смеша.

Investigation of intermolecular interactions using computer simulations

Milana M. Zarić^{1,2}, Mirjana Lj. Kijevčanin³, Ivona R. Radović³

¹University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia

²University of Belgrade, Centre of Excellence in Environmental Chemistry and Engineering – ICTM, Belgrade, Serbia

³University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia

Experimental measurement and data are essential for providing the information of properties and behavior of mixtures. However, the computer calculations combined with experimental measurement can provide a deeper insight of behavior and interactions at the molecular level¹. For liquid binary mixtures the non-covalent interactions were studied with quantum chemical calculations and molecular dynamic simulations. The influence of different functional groups, like the double bond with possibility for the π - π interactions and the -OH group with possibility for the hydrogen bonding was investigated. In addition, we studied the influence of the geometry of the molecule on the properties of binary mixtures.

1. M. M. Zarić, I. R. Radović, M. Lj. Kijevčanin, *J. Mol. Liq.* **2020**, 303,112486

Acknowledgment This work was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, Program DIJASPORA #6388652, PAMD, and the Ministry of Education, Science and Technological Development of the Republic of Serbia (Contract No. 451-03-47/2023-01/200026)