

**Srpsko hemijsko društvo**



**Serbian Chemical Society**

**59. Savetovanje  
Srpskog hemijskog društva**

**KRATKI IZVODI  
RADOVA**

**KNJIGA RADOVA**

**59<sup>th</sup> 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**  
59<sup>th</sup> 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](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

**Daniela Šojić Merkulov**

**Uređivački odbor/**Editorial Board

**Suzana Jovanović-Šanta, Stanislava Olič 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. Вељковић<sup>1</sup>, Александра Б. Ђуновић<sup>2</sup>, Душан Ж. Вељковић<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup> Иновациони центар Хемијског факултета у Београду, Студентски трг 12-16, Београд

<sup>3</sup> 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. Veljković<sup>1</sup>, Aleksandra B. Đunović<sup>2</sup>, Dušan Ž. Veljković<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup> Innovative Centre of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade

<sup>3</sup> 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).*