

**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**

## **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 aromatičnog 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.

I. 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*