

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ – ХЕМИЈСКИ ФАКУЛТЕТ НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ

Предмет: Извештај о оцени научне заснованости и оправданости предложене теме за израду докторске дисертације **Јелене И. Мичев**, мастер хемичара.

Поштоване колегинице и колеге,

На редовној седници Наставно-научног већа Универзитета у Београду – Хемијског факултета, одржаној 11. јуна 2026. године (одлука број 384/2), изабрани смо за чланове Комисије за подношење извештаја о оцени научне заснованости и оправданости предложене теме за израду докторске дисертације кандидата **Јелене И. Мичев**, мастер хемичара, пријављене под насловом: „**Теоријско проучавање утицаја халкогених и пниктогених интеракција на детонабилност нитроароматичних експлозива**“ На основу поднете документације, као и увида у досадашњи рад кандидата, подносимо Наставно-научном већу Хемијског факултета следећи:

ИЗВЕШТАЈ

А. БИОГРАФСКИ ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ

Јелена И. Мичев је рођена 13.02.1996. године у Београду. Основну школу „Прва обреновачка основна школа“ завршила је у Обреновцу као ученик генерације. Након тога је уписала и завршила средњу школу „Гимназија у Обреновцу“, природно-математички смер.

Хемијски факултет Универзитета у Београду, смер Хемија, уписала је 2016. године и дипломирала 2020. године са просечном оценом 8,53. Дипломски рад под називом: „Поређење електростатичких потенцијала високоенергетског молекула 1,3,5-тринитробензена и хелатних комплекса никла, цинка и кобалта“ одбранила је 2020. године под менторством др Душана Вељковића.

Мастер студије завршила 2021. године на матичном факултету и истом смеру са просечном оценом 10,00. Мастер рад под називом „Утицај величине ароматичног система на карактеристике нитроароматичних енергетских молекула“ одбранила је под менторством др Душана Вељковића.

Докторске студије на Хемијском факултету Универзитета у Београду уписала је 2022. године.

Као наставник хемије у „Пољопривредно-хемијској“ школи у Обреновцу, радила је шест месеци. У периоду од 2022. до 2024. године, радила је као оперативни инжењер у Служби за хемијску анализу горива и продуката сагоревања у Термоелектрани Никола Тесла Б, где је била ангажована на одржавању и организацији рада лабораторије. Њене активности су обухватале рад на калориметрима, спровођење термогравиметријске анализе (TGA), испитивање топовости пепела, анализу хемијског састава узорака пепела применом XRF методе, одређивање садржаја угљеника, водоника, азота и сумпора (CHNS анализа), као и припрему узорака, обраду резултата и израду лабораторијских извештаја, уз спровођење контроле квалитета у складу са важећим стандардима и интерним процедурама.

Од 2024. године, запослена је у звању истраживач-приправник у Институту за нуклеарне науке „Винча“ – Институт од националног значаја за Републику Србију Универзитета у Београду, под руководством др Гвоздена Тасића на истраживачкој теми под називом: „Развој и имплементација нових материјала, метода и протокола у области превенције, заштите и ефикасног одговора на потенцијалне ХБРН акциденте“. У оквиру научноистраживачког рада, спроводи истраживања применом квантно-хемијских метода на органска једињења, са посебним фокусом на нитроароматичне, високоенергетске материјале.

Поред научноистраживачког рада, учесник је два међународна истраживачка пројекта из програма HORIZON под називом: „Strengthening CBRNE Talent Development and Cross-Sector Innovation for a Safer Future“, Grant no. 101217399 Од 01.06.2025. и „Boosting CBRNE Innovation in Southern CEE: Building a Resilient Ecosystem through Fostering Academy-Industry Collaboration“, Grant no. 101214954 Од 01.06.2025.

Б. ОБЈАВЉЕНИ НАУЧНИ РАДОВИ И САОПШТЕЊА

Јелена И. Мичев, (девојачко Радовановић), коаутор је два научна рада објављена у часописима међународног значаја, од којих је један рад објављен у водећем међународном часопису категорије M21, а један у међународном часопису категорије M22. Поред тога, аутор је два саопштења представљена на међународним научним скуповима, од којих је једно саопштење категорије M33, а једно категорије M34. Такође, коаутор је једног поглавља у монографији, односно тематском зборнику, категорије M14.

ORCID ID: 0009-0007-1555-796X

Радови у врхунским међународним часописима (M21)

1. Danijela S. Kretić, **Jelena I. Radovanović** and Dušan Ž. Veljković, Can the sensitivity of energetic materials be tuned by using hydrogen bonds? Another look at the role of hydrogen bonding in the design of high energetic compounds, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2021, 23, 7472-7479. doi.org/10.1039/D1CP00189B

Радови у истакнутим међународним часописима (M22)

1. Ivana S. Veljković, **Jelena I. Radovanović** and Dušan Ž. Veljković, How aromatic system size affects the sensitivities of highly energetic molecules? RSC Adv., 2021,11,32533-32540. doi.org/10.1039/D1RA06482G

Саопштење са међународног скупа штампано у целини М33

1. **Radovanović J.**, Veljković D., Tasić G., Ječmenica Dučić M., Lazović I., Cumbo A., Structural and electronic response of new nitroaromatic compounds to solvent polarity: A DFT study, Proceedings of the 3rd International Conference on Chemo and Bioinformatics (ICCBKIG 2025), 2025, ISBN 978-86-82172-05-5. <https://doi.org/10.46793/ICCBKIG25.644R>

Саопштење са међународног скупа штампано у изводу М34

1. **Radovanović J. I.**, Veljković I. S., Veljković D. Ž., *Influence of pnictogen interactions on the sensitivity of nitroaromatic high-energy molecules*, Proceedings of the 11th Conference of Young Chemists of Serbia, 2025, ISBN 978-86-7132-090-0.

Поглавља у монографијама и тематским зборницима М14

1. Tasić G., Ječmenica Dučić M., **Radovanović J.**, Veljković D., Katnić Đ., Prediction of detonation performance and stability of new class high energetic materials, Thematic Conference Proceedings: Investigating and Proving Contemporary Forms of Crime – Scientific Approaches, XIV International Scientific Conference “Archibald Reiss Days”, Belgrade, Serbia, 7–8 November 2024, University of Criminal Investigation and Police Studies, 2025

В. ОБРАЗЛОЖЕЊЕ ТЕМЕ

1. Научна област: Хемија

Ужа научна област: Општа и неорганска хемија

2. Предмет научног истраживања

Предмет научног истраживања предложене докторске дисертације обухвата квантохемијско и кристалографско проучавање утицаја халкогених и пниктогених интеракција на детонабилност нитроароматичних експлозива. У оквиру ове докторске дисертације испитиваће се утицај нековалентних интеракција халкогеног и пниктогеног типа на неке од најважнијих индикатора детонабилности као што су вредности енергије дисоцијације најслабије везе у молекулима нитроароматичних експлозива, вредности позитивног електростатичког потенцијала у централним регијама молекулске површине али и геометрија нитро групе у односу на раван

ароматичног прстена. Посебна пажња ће бити посвећена анализи утицаја халкогених и пниктогених интеракција на енергију дисоцијације одабраних хемијских веза имајући у виду да је дисоцијација најслабије везе (углавном угљеник – азот веза) почетни корак у иницијацији процеса детонације нитроароматичних високоенергетских молекула. Поред тога, биће испитан утицај ових нековалентних интеракција на вредности електростатичког потенцијала у центру нитроароматичних молекула и изнад угљеник-азот везе с обзиром да је присуство области позитивног електростатичког потенцијала у овим регијама нитроароматичних молекула један од најважнијих индикатора високе детонабилности молекула. Детаљно ће бити анализирани разлике између интермолекулских и интрамолекулских халкогених и пниктогених интеракција у погледу њиховог утицаја на наведене индикаторе детонабилности, укључујући и вредности енергије дисоцијације најслабије везе, електростатичког потенцијала у одабраним регионима молекулске површине, вредности Вибергових индекса за угљеник – азот везе као и одабраних геометријских параметара који могу да утичу на детонабилност молекула. Енергије халкогених и пниктогених интеракција у кристалним структурама и модел системима које садрже типичне нитроароматичне молекуле биће израчунате применом веома прецизних квантохемијских метода (CCSD(T)/CBS), док ће њихова природа бити разјашњена помоћу прорачуна декомпозиције енергије. На основу резултата квантохемијских прорачуна и анализе геометријских параметара из кристалних структура биће проучавана веза између енергије и геометрије ових нековалентних интеракција и детонабилности нитроароматичних молекула.

3. Основне хипотезе

Халкогене и пниктогене интеракције су нековалентне интеракције које се успостављају између електрофилних региона елемената из 16. односно 15. групе Периодног система елемената (халкогени и пниктогени елементи) везаних у молекулу и нуклеофилног региона неког другог елемента. [1, 2] Елементи који се најчешће срећу као акцептори електронске густине у халкогеним интеракцијама су кисеоник, сумпор и селен, док су елементи који се најчешће срећу као акцептори електронске густине у пниктогеним интеракцијама азот, фосфор и арсен. С обзиром на велику заступљеност азота и кисеоника у молекулима нитроароматичних експлозива и имајући у виду чињеницу да нековалентне интеракције значајно утичу на читав низ детонационих карактеристика експлозива, проучавање утицаја халкогених и пниктогених интеракција

на детонабилност нитроароматичних молекула може у великој мери допринети расветљавању фактора који утичу на осетљивост ове групе високоенергетских материјала.

Могућност практичне примене потенцијалних високоенергетских материјала (експлозива, горива и пиротехничких средстава) у великој мери је одређена двама карактеристикама: ефикасношћу и детонабилношћу. [3-5] Ефикасност високоенергетског материјала обухвата брзину и притисак детонације, док се детонабилност дефинише као осетљивост коју неки материјал показује према различитим врстама спољашњих утицаја (механички удар, загревање, електрична варница). [5] Један од најважнијих задатака приликом дизајнирања нових високоенергетских материјала јесте повећање ефикасности и смањење детонабилности ових молекула. [3-6] Ипак, постизање баланса између ефикасности и детонабилности експлозива није лако јер у највећем броју случајева експлозиви који се одликују високом ефикасношћу истовремено имају и високу детонабилност. [3] Разлог за ово лежи у чињеници да постоје многи заједнички фактори који на различите начине утичу и на детонабилност експлозива али и на њихову ефикасност. Један од таквих фактора је присуство нековалентних интеракција између молекула у кристалним структурама.[7] Док интрамолекулске привлачне интеракције између нитро групе и суседних атома и атомских група могу отежати одлазак нитро групе и на тај начин смањити детонабилност молекула, одбојне интеракције могу довести до нарушавања планарности између нитро групе и ароматичног прстена, а тиме довести до нарушавања делокализације и слабљења угљеник – азот везе. Познат је пример једног од најмање детонабилних конвенционалних експлозива, 2,4,6-триамино-1,3,5-тринитробензена (ТАТВ), у чијој структури постоји мрежа интрамолекулских водоничних веза између –NH₂ и –NO₂ група. Та мрежа интрамолекулских интеракција отежава дисоцијацију нитро групе и тиме у великој мери утиче на стабилност овог молекула. [8] С друге стране, уколико су нековалентне интеракције електростатичке природе, оне могу довести до измена у расподели наелектрисања изнад површине молекула. Имајући у виду да је присуство области израженог позитивног електростатичког потенцијала изнад централних регија молекула један од најважнијих индикатора високе детонабилности, овакве промене у расподели наелектрисања представљају још један пут којим халкогене и пниктогене интеракције могу утицати на детонабилност молекула. [3, 5]. Систематским испитивањем свих начина на који одређене групе

нековалентних интеракција утичу на детонабилност високоенергетских материјала могуће је успоставити сет правила на основу којих би се могао предвидети њихов претежни утицај на детонационе карактеристике молекула.

Поред тога, резултати постигнути у оквиру ове докторске дисертације ће бити од великог значаја за разумевање детонабилности хетероцикличних нитроароматичних експлозива, имајући у виду да су халкогени и пниктогени атоми у њима заступљенији него у класичним нитроароматичним молекулима.

У оквиру ове докторске дисертације биће проучен утицај халкогеног и пниктогеног везивања на детонабилност нитроароматичних експлозива, преко њиховог утицаја на најважније индикаторе и параметре детонабилности. Посебно ће бити разматрани утицаји интермолекулских и интрамолекулских интеракција као и случајеви у којима су нитроароматични молекули у саставу кокристала. На основу резултата теоријских истраживања спроведених у оквиру ове дисертације биће предложена нова правила за дизајнирање експлозива са смањеном детонабилношћу и задовољавајућом ефикасношћу.

4. Циљ истраживања и очекивани резултати

Циљ истраживања која ће бити спроведена у оквиру ове докторске дисертације је проучавање утицаја халкогених и пниктогених интеракција на вредности најзначајнијих индикатора детонабилности нитроароматичних молекула. У те индикаторе превасходно спадају вредности енергије дисоцијације најслабије везе, присуство региона позитивног електростатичког потенцијала у централним областима проучаваних молекула и изнад C-NO₂ веза, степен одступања равни нитро групе од планарности у односу на ароматични прстен, топлоте формирања молекула као и други индикатори детонабилности. С обзиром да халкогене и пниктогене интеракције превасходно електростатичке природе оправдано је очекивати да ће приликом њиховог успостављања доћи до промена вредности електростатичких потенцијала молекула који учествују у тим интеракцијама. С друге стране, формирање интрамолекулских халкогених и пниктогених интеракција између нитро група и атома или група у њиховом суседству може отежати дисоцијацију нитро групе и на тај начин смањити детонабилност молекула.

У првом делу истраживања биће претражена Кембричка база кристалографских података и биће идентификоване све интермолекулске и интрамолекулске халкогене и

пниктогене интеракције у кристалним структурама високоенергетских нитроароматичних молекула. Биће анализирани најзаступљенији обрасци халкогеног и пниктогеног везивања у којима учествују наведени молекули, као и утицај ових нековалентних интеракција на вредности геометријских параметара који су од значаја за процену високоенергетских карактеристика нитроароматичних молекула (угао између равни у којима леже нитро група и ароматични прстен, дужина угљеник – азот везе и други). Посебно ће бити проучаване геометрије халкогених и пниктогених интеракција у случајевима различитих полиморфа нитроароматичних експлозива. Специјални случајеви хетероцикличних нитроароматичних молекула ће такође бити анализирани, имајући у виду да хетеро атоми често могу учествовати у додатним халкогеним односно пниктогеним интеракцијама, али и да могу значајно изменити расподелу електростатичког потенцијала на површини молекула чиме утичу на његову детонабилност. Проучавања кристалних структура ће се фокусирати на анализу одабраних геометријских параметара као што су угао између равни нитро-групе и ароматичног прстена и дужина најслабије везе у молекулу. Поред тога, биће анализирани и геометријски параметри који дефинишу начин паковања ових молекула у кристалној решетки. На основу анализе геометријских параметара биће одабрани типични примери кристалних структура са халкогеним и пниктогеним интеракцијама и они ће бити искоришћени за конструисање модел система за квантохемијске прорачуне.

У другом делу истраживања биће урађено квантохемијско проучавање енергија и геометрија халкогених и пниктогених интеракција које укључују одабране нитроароматичне молекуле. Прорачуни ће бити урађени како на геометријама молекула преузетим из кристалних структура, тако и на модел системима. Посебна пажња биће посвећена поређењу утицаја интрамолекулских и интермолекулских нековалентних интеракција на геометрије ових молекула. Биће испитана и природа халкогених и пниктогених интеракција применом прорачуна декомпозиције енергије. Поређењем резултата анализе кристалографских података из претходног дела истраживања и резултата квантохемијских прорачуна у гасној фази биће расветљен утицај кристалног паковања на геометрије и енергије халкогених и пниктогених интеракција у наведеним системима.

У трећем делу истраживања биће израчунати и анализирани најважнији индикатори детонабилности високоенергетских молекула коришћењем

квантнохемијских прорачуна као и прорачуна заснованих на Теорији функционала густине (*Density Functional Theory - DFT*). Најважнији индикатори детонабилности ових молекула су енергије дисоцијације најслабијих хемијских веза у молекулима, вредности електростатичког потенцијала у централним регијама молекула као и изнад најслабијих хемијских веза, Вибергови индекси израчунати за најслабије хемијске везе, топлоте формирања молекула, као и вредности енергија граничних орбитала (НОМО и LUMO орбитале). Вредности индикатора детонабилности биће израчунате за молекуле који учествују у халкогеним и пниктогеним интеракцијама, као и за оне који не учествују у оваквим интеракцијама. Поређењем резултата за ова два случаја биће расветљен утицај халкогених и пниктогених интеракција на детонабилност нитроароматичних молекула. Утицај присуства халкогених и пниктогених интеракција на детонабилност експлозива биће испитан и у квалитативном и у квантитативном смислу. Енергије и геометрије халкогених и пниктогених интеракција биће израчунате и анализиране и у доступним полиморфима нитроароматичних молекула преузетим из кристалних структура.

На основу резултата анализе геометријских података преузетих из кристалних структура, израчунатих енергија и геометрија халкогених и пниктогених интеракција као и израчунатих вредности најзначајнијих индикатора детонабилности високоенергетских нитроароматичних молекула биће систематски описан утицај присуства халкогених и пниктогених интеракција на детонабилност нитроароматичних експлозива. Овако добијени резултати биће анализирани у контексту могуће примене у дизајнирању експлозива које карактерише умерена детонабилност и висока ефикасност.

5. Методе истраживања

Кристалне структуре познатих нитроароматичних експлозива у којима се јављају халкогене и пниктогене интеракције биће преузете из Кембричке базе структурних података. Анализом кристалних структура биће одређене најчешће геометрије ових интеракција, њихов удео у укупним нековалентним интеракцијама у кристалној структури као и најчешћи обрасци халкогеног и пниктогеног везивања. Посебно ће бити анализирани дужине угљеник – азот веза и углови између равни нитро групе и равни ароматичног прстена, с обзиром да се ове величине доводе у везу са детонабилношћу нитроароматичних експлозива. Хиршфелдове мапе ће бити израчунате за све издвојене кристалне структуре у којима су присутне халкогене или

пниктогене интеракције. Структуре које су одређене помоћу методе неутронске дифракције ће бити идентификоване и засебно анализирани, с обзиром да ова метода пружа прецизне податке о положајима атома. На основу систематске анализе кристалографских података биће издвојени карактеристични примери кристалних структура са интрамолекулским и интермолекулским халкогеним и пниктогеним интеракцијама и они ће бити употребљени за дизајнирање модел система приликом каснијих квантохемијских прорачуна.

Применом квантохемијских прорачуна биће одређене енергије и геометрије халкогених и пниктогених интеракција у модел системима дизајнираним на основу анализе кристалних структура из Кембричке базе структурних података. Биће проучаване геометрије молекула добијене прорачунима оптимизације геометрије у газној фази, али и геометрије директно преузете из кристалних структура. Прорачуни ће бити рађени за примере познатих нитроароматичних експлозива као што су 1,3,5-тринитробензен; 2,4,6-тринитротолуен; 2,4,6-тринитрофенол, 2,4,6-тринитрофенилметилнитрамин али и за друге нитроароматичне молекуле, укључујући и примере хетероцикличних нитроароматичних експлозива (2,4,6-триамино-5-нитропиримидин-1,3-диоксид, 2,5-диамино-3,6-динитропиразин и други). Прорачунима декомпозиције енергије интеракција биће расветљена природа анализираних нековалентних интеракција.

За одабране молекуле нитроароматичних експлозива биће израчунате мапе електростатичких потенцијала за случајеве у којима они не учествују у халкогеном и пниктогеном везивању везивању, као и за случајеве у којима ови молекули граде наведене интеракције. Поређењем овако добијених резултата биће процењен утицај халкогеног и пниктогеног везивања на промену вредности електростатичких потенцијала у областима молекулске површине које су од значаја за процену детонабилности експлозива (централне регије молекулске површине и области изнад C-NO₂ веза).

Посебно ће бити анализирани случајеви нитроароматичних молекула у којима долази до формирања интрамолекулских халкогених и пниктогених интеракција између NO₂ група и супституената у њиховом суседству. Енергије дисоцијације C-NO₂ веза биће израчунате за примере геометрија у којима постоје халкогене и пниктогене интеракције и биће упоређене са енергијама дисоцијације ових веза у геометријама у којима не долази до формирања интрамолекулских интеракција наведеног типа. Поред

тога, биће упоређене и позитивне вредности електростатичког потенцијала изнад центра молекула и C-NO₂ веза за ова два случаја. На основу поређења добијених резултата биће систематски описан утицај интрамолекулских халкогених и пниктогених интеракција на детонабилност нитроароматичних молекула.

За теоријско израчунавање енергија халкогених и пниктогених интеракција биће коришћене квантохемијске методе високог нивоа (CCSD(t), MP2 и друге неопходне методе) као и методе засноване на Теорији функционала густине.

За оптимизације геометрије молекула, израчунавање вредности молекулског електростатичког потенцијала и енергије дисоцијације угљеник-азот везе у модел системима биће коришћене методе засноване на Теорији функционалне густине. Израчунате вредности енергије дисоцијације C-NO₂ везе биће упоређене са експерименталним вредностима из литературе за нитроароматичне молекуле за које су ови подаци доступни.

Комбиновањем резултата анализе кристалних структура са резултатима квантохемијских и DFT прорачуна енергија интеракција и вредности одабраних индикатора детонабилности биће квантитативно и квалитативно одређен утицај халкогених и пниктогених интеракција на детонабилност нитроароматичних молекула.

5. Актуелност проблематике у свету

Нековалентне интеракције имају велики утицај на особине високоенергетских материјала. [3] До сада је фокус истраживања у овој области био на водоничним везама, имајући у виду њихову заступљеност и значај за паковање молекула у кристалима. Ипак, у случају нитроароматичних молекула, заступљеност јаким водоничних веза углавном није велика имајући у виду да су најчешћи донори водоника C – H фрагменти. С друге стране, велика заступљеност елемената који учествују у халкогеним интеракцијама (кисеоник и нешто ређе сумпор) и пниктогеним интеракцијама (азот), указују да би и утицај ових интеракција на детонационе карактеристике нитроароматичних експлозива могао да буде значајан. С обзиром да укупни утицај нековалентних интеракција на детонабилност нитроароматичних молекула није у потпуности разјашњен, пре свега због тога што су истраживања углавном била фокусирана на водоничне везе, проучавање утицаја халкогених и пниктогених интеракција на детонабилност нитроароматичних молекула може у великој мери допринети расветљавању фактора који утичу на осетљивост ове групе високоенергетских материјала.

Овакав приступ има и потенцијалну практичну примену, с обзиром да су познати примери кокристална нитроароматичних експлозива где је након успостављања нековалентних интеракција дошло до промене детонабилности експлозива (упечатљив пример је кокристал који се састоји од молекула 2,4,6-тринитротолуена (TNT) и високоенергетског молекула CL20). [6, 9]

Додатно је важно истаћи да су халкогене и пниктогене интеракције електростатичке природе. Имајући у виду да детонабилност нитроароматичних молекула у великој мери зависи од вредности позитивног електростатичког потенцијала изнад централних регија молекулске површине, резултати овог истраживања би могли да допринесу развијању приступа за фино подешавање вредности електростатичког потенцијала и тиме и детонабилности ове групе високоенергетских молекула. [5]

Посебно је важно и испитивање утицаја интрамолекулских интеракција халкогеног и пниктогеног типа на детонабилност нитроароматичних експлозива, с обзиром да су претходна експериментална и теоријска истраживања показачла да интрамолекулске електростатичке интеракције могу значајно да утичу на смањење детонабилности појединих нитроароматичних експлозива. [8] Овакво свеобухватно испитивање укупног утицаја интермолекулских и интрамолекулских халкогених и пниктогених интеракција би, у комбинацији са већ познатим чињеницама о утицају водоничне везе, могло да буде искоришћено за формулисање сета правила на основу којих би се могао предвидети генерални утицај електростатичких нековалентних интеракција на детонационе карактеристике молекула.

Поред тога, резултати постигнути у оквиру ове докторске дисертације ће бити од великог значаја за разумевање детонабилности хетероцикличних нитроароматичних експлозива, имајући у виду да су халкогени и пниктогени атоми у њима заступљенији него у класичним нитроароматичним молекулима. [10]

6. Очекивани резултати

У складу са предметом и циљем научног истраживања предложене теме докторске дисертације, очекује се да докторанд:

- Изврши систематску претрагу Кембричке базе структурних података и идентификује кристалне структуре нитроароматичних високоенергетских молекула у којима су присутне халкогене и пниктогене интеракције;

- Анализира најзаступљеније обрасце интермолекулског и интрамолекулског халкогеног и пниктогеног везивања у кристалним структурама нитроароматичних експлозива, као и њихову повезаност са геометријским параметрима значајним за процену детонабилности;
- Одреди утицај халкогених и пниктогених интеракција на вредности енергије дисоцијације најслабијих хемијских веза, пре свега C–NO₂ веза, које представљају један од кључних индикатора осетљивости нитроароматичних високоенергетских молекула;
- Испита утицај наведених нековалентних интеракција на расподелу молекулског електростатичког потенцијала, посебно у централним регијама молекулске површине и у областима изнад C–NO₂ веза, које су од значаја за процену детонабилности;
- Израчуна и анализира енергије и геометрије халкогених и пниктогених интеракција применом квантохемијских метода високог нивоа и метода заснованих на теорији функционала густине;
- Упореди утицај интрамолекулских и интермолекулских халкогених и пниктогених интеракција на одабране индикаторе детонабилности нитроароматичних молекула;
- Анализира утицај кристалног паковања, полиморфизма и присуства кокристалних форми на геометрију, енергију интеракција и детонабилност одабраних нитроароматичних експлозива;
- Дефинише везу између природе, јачине и геометрије халкогених и пниктогених интеракција и вредности параметара који указују на детонабилност нитроароматичних високоенергетских молекула;
- Предложи правила која могу допринети рационалном дизајнирању високоенергетских материјала са смањеном детонабилношћу и задовољавајућом ефикасношћу.

Очекивани резултати ове дисертације имају фундаментални и потенцијално примењени значај. Фундаментални допринос огледа се у систематском разумевању улоге халкогених и пниктогених интеракција у структурној организацији и детонабилности нитроароматичних високоенергетских молекула. Посебан значај имаће утврђивање односа између нековалентних интеракција, геометрије нитро група, јачине најслабијих хемијских веза, расподеле електростатичког потенцијала и других индикатора

детонабилности. На овај начин биће допуњено постојеће знање о факторима који утичу на стабилност и осетљивост нитроароматичних експлозива.

Примењени значај истраживања огледа се у могућности да се добијени резултати искористе као основа за рационалније пројектовање нових високоенергетских материјала. Дефинисањем утицаја халкогених и пниктогених интеракција на детонабилност биће могуће предложити смернице за дизајн молекула и кристалних форми које би имале повољнији однос између ефикасности и осетљивости. Овај аспект је од посебног значаја за развој безбеднијих високоенергетских материјала, код којих је циљ постизање задовољавајућих детонационих карактеристика уз смањену осетљивост на спољашње утицаје.

7. Литература

Литература ће током рада бити проширена у складу са потребама истраживања.

1. B. Lin, H. Liu, I. Karki, E. C. Vik, M. D. Smith, P. J. Pellechia, K. D. Shimizu, [Pnictogen Interactions with Nitrogen Acceptors](#), *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, **62**, e202304960.
2. I. Fiduccia, D. Ricci, C. Rizzo, A. Pace, I. Pibiri, [Non-canonical \$\sigma\$ -hole interactions: halogen, chalcogen, and pnictogen bonds in biomolecular structure and drug design](#), *Coord. Chem. Rev.*, 2026, **552**, 217515.
3. P. Politzer, J. S. Murray, [High Performance, Low Sensitivity: Conflicting or Compatible?](#), *Propellants Explos. Pyrotech.* 2016, **41**, 414.
4. R. V. Kent, R. A. Wiscons, P. Sharon, D. Grinstein, A. A. Frimer, A. J. Matzger, [Cocrystal Engineering of a High Nitrogen Energetic Material](#), *Cryst. Growth Des.*, 2018, **18**, 219.
5. P. Politzer, J. S. Murray, [Some molecular/crystalline factors that affect the sensitivities of energetic materials: molecular surface electrostatic potentials, lattice free space and maximum heat of detonation per unit volume](#), *J Mol Model*, 2015, **21**, 25.
6. G. Liu, S.-H. Wei, C. Zhang, [Review of the Intermolecular Interactions in Energetic Molecular Cocrystals](#), *Cryst. Growth Des.* 2020, **20**, 7065.
7. A. B. Đunovića, D. Ž. Veljković, [Halogen bonds as a tool in the design of high energetic materials: evidence from crystal structures and quantum chemical calculations](#), *CrystEngComm*, 2021, **23**, 6915-6922.
8. A. L. Shoaf, C. A. Bayse, [Trigger bond analysis of nitroaromatic energetic materials using wiberg bond indices](#), *J. Comput. Chem.* 2018, 39, **19**, 1236-1248.
9. H. Li, Y. Shu, S. Gao, L. Chen, Q. Ma, X. Ju, [Easy methods to study the smart energetic TNT/CL-20 co-crystal](#). *J Mol Model* 2013, **19**, 4909–4917.

10. A. Aizikovich, A. Shlomovich, A. Cohena, M. Gozin, [The nitration pattern of energetic 3,6-diamino-1,2,4,5-tetrazine derivatives containing azole functional groups](#), *Dalton Trans.*, 2015, **44**, 13939-13946.

Г. ЗАКЉУЧАК

Комисија сматра да је предложена тема научно заснована и оправдана, као и да је у складу са актуелним светским истраживачким токовима у области опште и неорганске хемије, квантне хемије и хемије високоенергетских материјала. Очекује се да резултати овог истраживања пруже значајан допринос разумевању утицаја халкогених и пниктогених интеракција на детонабилност нитроароматичних експлозива, као и осветљавању везе између нековалентних интеракција, структуре молекула и најважнијих индикатора детонабилности. Посебан допринос истраживања огледаће се у систематској анализи интермолекулских и интрамолекулских халкогених и пниктогених интеракција у кристалним структурама нитроароматичних високоенергетских молекула, као и у процени њиховог утицаја на енергију дисоцијације најслабијих хемијских веза, расподелу молекулског електростатичког потенцијала, геометрију нитро група, Вибергове индексе и друге параметре значајне за процену осетљивости и стабилности ових молекула. Истраживање ће омогућити и боље разумевање улоге кристалног паковања, полиморфизма и кокристалних форми у промени детонабилности нитроароматичних експлозива. На основу добијених резултата очекује се дефинисање смерница које могу допринети рационалном дизајнирању високоенергетских материјала са смањеном детонабилношћу и задовољавајућом ефикасношћу. У складу са Законом о високом образовању и Статутом Хемијског факултета Универзитета у Београду, сматрамо да кандидаткиња испуњава све потребне услове за одобрење израде докторске дисертације. Стога, Комисија предлаже Наставно-научном већу Универзитета у Београду – Хемијског факултета да докторанду Јелени И. Мичев, мастер хемичару, одобри израду докторске дисертације под насловом:

„Теоријско проучавање утицаја халкогених и пниктогених интеракција на детонабилност нитроароматичних експлозива“.

За ментора се предлаже др Душан Вељковић, ванредни професор Универзитета у Београду – Хемијског факултета. Списак радова предложеног ментора, из ког се види да испуњава услове из Стандарда за акредитацију студијских програма докторских студија, дат је у Прилогу.

Комисија:

др Душан Вељковић, ванредни професор,
Универзитет у Београду - Хемијски факултет

др Весна Медаковић, доцент,
Универзитет у Београду - Хемијски факултет

др Гвозден Тасић, виши научни сарадник,
Институт за нуклеарне науке "Винча"
Институт од националног значаја за
Републику Србију, Универзитета у Београду

У Београду, 29.06.2026.

Прилог 1a: Изабрани радови (објављени у научним часописима са Science Citation Index - SCI листе) предложеног ментора др Душана Вељковића, ванредног професора Универзитета у Београду - Хемијског факултета

1. Veljković, I. S.; Đunović, A. B.; Veljković, D. Ž. Influence of halogen substituents on sensitivity towards detonation of polycyclic nitroaromatic high-energy molecules, *J Phys Org Chem*, 2024, 37(10), e4649.

<https://doi.org/10.1002/poc.4649>

2. Đunović, A. B.; Veljković, D. Ž. Halogen bonds as a tool in the design of high energetic materials: evidence from crystal structures and quantum chemical calculations. *CrystEngComm* 2021, 23, 6915–6922.

<https://doi.org/10.1039/D1CE00854D>

3. Veljković, I. S.; Kretić, D. S.; Veljković, D. Ž., Geometrical and energetic characteristics of Se⋯Se interactions in crystal structures of organoselenium molecules, *CrystEngComm*, 2021, 23, 3383-3390.

<https://doi.org/10.1039/D1CE00129A>

4. Kretić, D. S.; Veljković, I. S.; Đunović, A. B.; Veljković, D. Ž. Chelate Coordination Compounds as a New Class of High-Energy Materials: The Case of Nitro-Bis(Acetylacetonato) Complexes. *Molecules* 2021, 26, 5438.

<https://doi.org/10.3390/molecules26175438>

5. D. S. Kretić, V. B. Medaković, D. Ž. Veljković, How Do Small Differences in Geometries Affect Electrostatic Potentials of High-Energy Molecules? *Critical News from Critical Points, Crystals*, 2022, 12(10), 1455.

<https://doi.org/10.3390/cryst15080692>