

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**  
**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА**  
**СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**27<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE**  
**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**Abstracts**

**Крагујевац – Kragujevac**  
**2021.**

## УЛОГА НЕКОВАЛЕНТНИХ ИНТЕРАКЦИЈА У КОНТРОЛИ ОСЕТЉИВОСТИ ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ МОЛЕКУЛА КА ДЕТОНАЦИЈИ

А. Б. Ђуновић<sup>а</sup>, Д. С. Кретић<sup>б</sup>, И. С. Вељковић<sup>с</sup>, Д. Ж. Вељковић<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Иновациони центар Хемијског факултета, Студентски трг 12-16, Београд,

<sup>б</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија, <sup>с</sup> Универзитет у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију, институт од националног значаја, Његошева 12, Београд, Србија

e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

Изразито позитивне вредности молекулског електростатичког потенцијала (MEP) у централним регијама високоенергетских молекула (HEM) представљају један од најважнијих фактора који утиче на осетљивост ових молекула ка детонацији [1,2]. Веома позитивне вредности електростатичког потенцијала су индикатор високе осетљивости енергетских молекула у односу на механички удар.

У овом раду су коришћени прорачуни засновани на теорији функционала густине (DFT) да би се осветлило утицај нековалентних интеракција у кристалним структурама експлозива на вредности електростатичког потенцијала одабраних нитроароматичних молекула. Да би се проучио утицај нековалентног везивања на електростатичке потенцијале испитиваних молекула, примери нитроароматичних једињења у којима постоји водонична и/или халогена веза издвојени су из Кембричке базе структурних података.

Резултати прорачуна рађених на M06/cc-PVDZ нивоу показали су да постоје значајне разлике у утицају водоничног везивања на електростатичке потенцијале енергетских молекула у зависности од тога да ли енергетски молекули играју улогу донора или акцептора водоника. У случају молекула 2,4,6-тринитрофенола (кристална структура КО-DYIM) који истовремено учествује у водоничном везивању као акцептор (O–H...O–N интеракција) и донор (O–H...O интеракција) атома водоника, израчуната вредност електростатичког потенцијала изнад центра површине молекула је 23,44 kcal/mol. Након уклањања молекула воде из окружења, вредност електростатичког потенцијала је порасла на 28,13 kcal/mol. Ове разлике у вредностима електростатичког потенцијала између водонично везаних и слободних HEM молекула пружају могућност контроле осетљивости ка детонацији ових високоенергетских једињења.

Истраживање спроведено уз подршку Фонда за науку Републике Србије, ПРОМИС, #6066886, CD-HEM. Министарство просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије, Евиденциони број: 451-03-9/2021-14/200168, 451-03-9/2021-14/200288 и 451-03-68/2021-14/200026.

[1] B. M. Rice, J. J. Hare, *J. Phys. Chem. A* **106** (2002) 1770–1783.

[2] P. Politzer, J. S. Murray, *Propellants Explos. Pyrotech.* **41** (2016) 414–425.

## ROLE OF NONCOVALENT INTERACTIONS IN THE CONTROL OF THE SENSITIVITY OF HIGH ENERGETIC MOLECULES TOWARDS DETONATION

A. B. Đunović <sup>a</sup>, D. S. Kretić <sup>b</sup>, I. S. Veljković <sup>c</sup>, D. Ž. Veljković <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Innovation center of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia

<sup>b</sup> University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg, 12-16, Belgrade, Serbia

<sup>c</sup> University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia

e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

Strongly positive values of Molecular Electrostatic Potential (MEP) in the central regions of the high energetic molecules (HEM) is one of the most important factors that affects the sensitivity of these molecules towards detonation [1,2]. Strong positive potential in the center of molecular surface is an indicator of high impact sensitivity of HEM molecule.

In this work, Density Functional Theory (DFT) calculations were used to reveal the influence of noncovalent interactions in crystal structures on the values of electrostatic potential above the central areas of selected nitroaromatic molecules. To examine the influence of noncovalent interactions on the electrostatic potential of HEM molecules in crystal structures, examples of hydrogen-bonded and halogen-bonded nitroaromatic molecules were searched in Cambridge Structural Database. Calculations were also done on model systems.

Results of the calculations performed using the M06/cc-PVDZ level of theory showed that there are significant differences in the influence of hydrogen bonding on the electrostatic potential of energetic molecules acting as hydrogen atom donors and hydrogen atom acceptors. In the case of 2,4,6-trinitrophenol molecule (extracted from KODYIM crystal structure) involved in hydrogen bonding as both hydrogen atom acceptor (O–H...O–N interaction) and hydrogen atom donor (O–H...O interaction) calculated value of electrostatic potential in the central portion of the molecular surface was 23.44 kcal/mol. After the removal of water molecules which were present in KODYIM crystal structure, value of electrostatic potential increased to 28.13 kcal/mol. These differences in electrostatic potential values for hydrogen-bonded and free HEM molecules give the opportunity for the control of impact sensitivities of HEM compounds.

This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM. This work was supported by the Serbian Ministry of Education, Science and Technological Development (Contract numbers: 451-03-9/2021-14/200168, 451-03-9/2021-14/200288 and 451-03-68/2021-14/200026).

[1] B. M. Rice, J. J. Hare, *J. Phys. Chem. A* **106** (2002) 17701783.

[2] P. Politzer, J. S. Murray, *Propellants Explos. Pyrotech.* **41** (2016) 414–425.