

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

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

**Изводи радова**

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

**Abstracts**

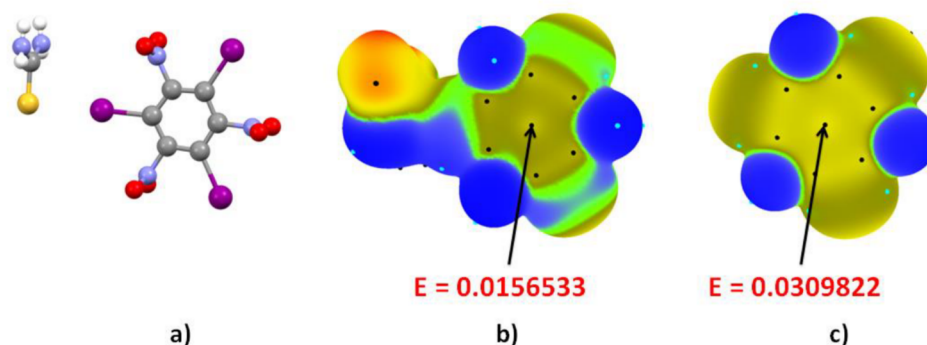
**Крагујевац – Kragujevac**  
**2021.**

## УТИЦАЈ ХАЛОГЕНОГ ВЕЗИВАЊА НА ОСЕТЉИВОСТ КА ДЕТОНАЦИЈИ ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ МОЛЕКУЛА

**Д. Б. Нинковић<sup>а</sup>, А. Б. Ђуновић<sup>а</sup>, Д. Ж. Вељковић<sup>б</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, e-mail: vdu-san@chem.bg.ac.rs

Предвиђање особина високоенергетских једињења помоћу метода Теорије функционала густине (DFT) је циљ великог броја теоријских студија [1]. Један од најзначајнијих алата за предвиђање осетљивости високоенергетских молекула ка детонацији су мапе електростатичког потенцијала (MEP). Познато је да молекули класичних С, Н, N, О - експлозива имају веома позитивне вредности електростатичког потенцијала у централним регионима површине молекула [2]. Иако је познато да водонично везивање може да утиче на осетљивост високоенергетских молекула [3], утицај халогеног везивања у молекулима који садрже атоме халогена још увек није расветљен.



**Слика 1.** а) Геометрија из кристалне структуре NANTEU, б) мапа електростатичког потенцијала за систем 1,3,5-тријодо-2,4,6-тринитробензен са тиоуреом и с) мапа електростатичког потенцијала за 1,3,5-тријодо-2,4,6-тринитробензен

У оквиру овог рада претражена је Кембричка база структурних података (CSD) у потрази за кристалним структурама експлозива који садрже халогене елементе. На основу анализе халогеног везивања у овим структурама, направљени су модел системи за DFT прорачуне и израчунате су мапе електростатичких потенцијала. Анализа резултата прорачуна је показала да се халогено везивање може користити за подешавање вредности електростатичких потенцијала изнад централних делова енергетских молекула. Резултати ове студије могу бити од значаја за развијање нових високоенергетских материјала који садрже халогене елементе.

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 и 451-03-9/2021-14/200288.

[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

[3] F. Ren, D. Cao, W. Shi, H. Gao, *J. Mol. Model.* **22**, (2016), 1 -8.

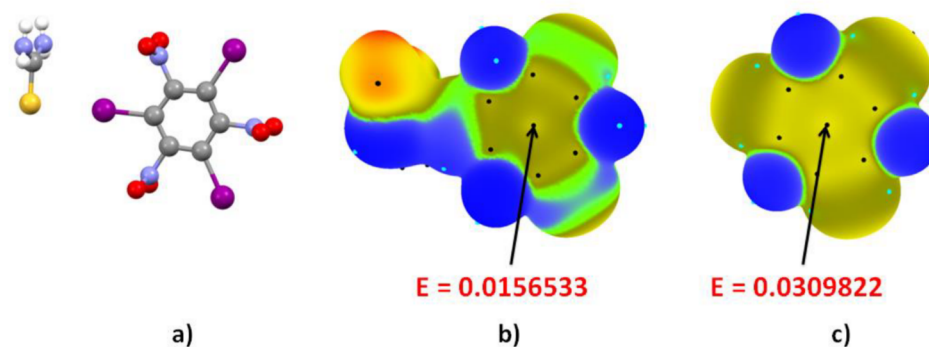
## INFLUENCE OF HALOGEN BONDING ON THE SENSITIVITY OF HIGH-ENERGY MOLECULES TOWARDS DETONATION

**D. B. Ninković<sup>a</sup>, A. B. Đunović<sup>a</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

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

Prediction of the characteristics of new energetic compounds using Density Functional Theory (DFT) calculations is the ultimate goal of many theoretical studies [1]. One of the most important tools for revealing the sensitivity of the energetic molecules is Molecular Electrostatic Potential (MEP). It is known that molecules of classical C, H, N, O-explosives have strongly positive electrostatic potential above the central areas of the molecular surfaces [2]. While it is known that hydrogen bonds do affect the electrostatic potential and sensitivity of the energetic molecules [3], influence of halogen bonds in halogen-containing energetic molecules is yet to be revealed.



**Figure 1.** a) Geometry of NAHTEY crystal structure, b) electrostatic potential map for 1,3,5-triiodo-2,4,6-trinitrobenzene bis(thiourea) system and c) electrostatic potential map for 1,3,5-triiodo-2,4,6-trinitrobenzene molecule. Energies of critical points are given in Hartree.

In this study, Cambridge Structural Database (CSD) was searched for the crystal structures of halogen-containing molecules of explosives. Based on the analysis of halogen bonding patterns in crystal structures, model systems for DFT calculations were made and electrostatic potential maps were calculated. Analysis of the results of the DFT calculations showed that halogen bonding could be used as a tool for adjusting the values of the energy of electrostatic potential above the center of the molecules of energetic materials. Results of this study could be of great importance for the development of the new halogen-containing energetic materials with improved sensitivity toward detonation.

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 and 451-03-9/2021-14/200288).

[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

[3] F. Ren, D. Cao, W. Shi, H. Gao, *J. Mol. Model.* **22**, (2016), 1 -8.