

ТН-Р-3

Улога нековалентних интеракција у модификовању особина високоенергетских материјала

Душан Ж. Вељковић, Данијела С. Кретић, Душан П. Маленов, Ивана С. Вељковић*, Драган Б. Нинковић**, Снежана Д. Зарић

Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија

**Универзитет у Београду - Институт за хемију, технологију и металургију, Његошева 12, Београд, Србија*

***Иновациони центар Хемијског факултета, Студентски трг 12-16, Београд*

У овом раду смо испитивали утицај нековалентних интеракција на електростатичке потенцијале и осетљивост ка детонацији одабраних високоенергетских молекула. Резултати прорачуна рађених на М06/сс-РVDZ нивоу су показали да водоничне везе значајно утичу на вредности електростатичког потенцијала и осетљивост ка детонацији високоенергетских молекула. У случајевима када високоенергетски молекул игра улогу акцептора водоника, вредности електростатичког потенцијала изнад центара високоенергетских молекула се смањују за 20-25%. Ово даје могућност за коришћење водоничног везивања за модификовање осетљивости високоенергетских молекула.

Истраживање спроведено уз подршку Фонда за науку Републике Србије, ПРОМИС, #6066886, CD-HEM.

Role of non-covalent interactions in modification of properties of high energetic materials

Dušan Ž. Veljković, Danijela S. Kretić, Dušan P. Malenov, Ivana S. Veljković*, Dragan B. Ninković**, Snežana D. Zarić

University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg, 12- 16, Belgrade, Serbia

**University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia*

***Innovation center of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia.*

In this work we studied influence of non-covalent interactions on the electrostatic potentials and impact sensitivity of selected high energetic molecules (HEM). Study was performed using quantum chemical calculations on model systems and crystal structures of selected HEMs. Results of M06/cc-PVDZ calculations showed that hydrogen bonding significantly affects electrostatic potential values and impact sensitivities of HEMs. In cases in which HEM molecules act as hydrogen atom acceptors, electrostatic potential values in the centers of HEM molecules decreases by 20-25%. This gives opportunity for modification of impact sensitivities of HEM molecules.

This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM.