**Прост однос енергије дисоцијације везе и просечног раздвајања наелектрисања са осетљивошћу на удар код нитро експлозива**

Ђенг Миј, Фнгћи Ђао1, Сију Ши1 и Шиехаи Џи\*

*Кључна Лабораторија за Хемију Меких и Функционалних Материјала при MOE, Школа за Хемијско Инжењерство, Нанџинг Универзитет за Науку и Технологију, Нанџинг 210094, Н. Р. Кина*

*1* *Лабораторија за Науку и Технологију Сагоревања и Експлодирања, Шиански Истраживачки Институт за Модерну Хемију, Шиан 710065, Н. Р. Кина*

*Извод:* Енергије дисоцијације везе (BDE) најслабијих веза код 33 експлозива израчунате су и анализиране користећи B3LYP метод са 6-311++G\*\* базисним скупом. Поређење BDE и осетљивости на удар *H*50 показује да раскидање најслабије везе игра значајну улогу у иницирању детонације. Коришћење GGA апроксимације са PBE методом и DFT-D поправком, симулација сабијених TNT и RDX кристала показује да неравнотежа површине електростатског потенцијала (ESP) доводи до деформације молекула и до нестабилности експлозива при ударним притисцима. Просечно раздвајање наелектрисања (П) у молекулима је израчунато и употребљено да се прикажу ESP баланси. На основу BDE, П и експерименталних *H*50, утврђене су просте квантитативне корелације структуре и осетљивости за нитро хетероцикле, нитрамине, пикрил хетероцикле односно нитро аромате. Релација фитовања је једноставна а ипак статистички значајна и са само две варијабле. Коефицијенти корелације R2 већи су од 0,8 са F>F\*\*(0,05) (95% интервалом поверења).

*Кључне речи:* потенцијал електростатске површине; нитро експлозиви; теорија функционала густине; енергетска једињења.