

The explosive sensitivity on the complex formation of 3-nitro-1,2,4-triazol-5-one and metal ions based on density functional study

Saprizal Hadisaputra, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20447925&lokasi=lokal>

Abstrak

The explosive sensitivity upon the formation of supramolecular interaction between the nitro group of 3-nitro-1,2,4-triazol-5-one (NTO) and metal ions ($Mn^+ = Li^+, Na^+, Be^{2+}$ and Mg^{2+}) has been investigated using Density Functional Theory at B3LYP/6-311++G** level of theory. The bond dissociation energy (BDE) of the C1-N6 trigger bond has also been discussed for the NTO monomer and the corresponding complexes. The interaction and bond dissociation energy of the C6-N7 trigger bond follow the order of $NTO-Be^{2+} > NTO-Mg^{2+} > NTO-Li^+ > NTO-Na^+ > NTO$ monomer. The enhancement of the trigger bond dissociation energy in comparison with the NTO monomer correlates well with the complex interaction energies, trigger bond length, and charge transfer. The analyses of electron density shifts have shown that the electron density of the nitro group shifts toward the C1-N6 trigger bond upon the formation of the supramolecular interaction. As result, the trigger bond is strengthened and the sensitivity of NTO is reduced.

Some of the calculated results agree with the experimental values.

Sensitivitas Peledak Akibat Pembentukan Kompleks 3-Nitro-1,2,4-Triazol-5-One dan Ion Logam berdasarkan

Teori Fungsional Kerapatan. Sensitivitas peledak yang terbentuk dari interaksi supramolekuler senyawa 3-nitro-

1,2,4-triazol-5-one (NTO) dan ion logam ($Mn^+ = Li^+, Na^+, Be^{2+}$ and Mg^{2+}) telah dipelajari menggunakan Teori

Fungsional Kerapatan pada tingkatan teori B3LYP/6-311++G**. Energi pemutusan ikatan pada ikatan pemicu ledakan

(C1-C6) juga telah dipelajari untuk monomer NTO dan senyawa kompleksnya. Energi ikat dan energi pemutusan ikatan

mengikuti urutan: $NTO-Be^{2+} > NTO-Mg^{2+} > NTO-Li^+ > NTO-Na^+ > monomer NTO$. Peningkatan energi pemutusan

ikatan berbanding lurus dengan energi ikat, panjang ikatan pemicu ledakan dan transfer muatan. Analisis perubahan

kerapatan elektron menunjukkan bahwa kerapatan elektron gugus nitro berpindah pada ikatan C1-N6 ketika kompleks terbentuk. Hal ini menyebabkan ikatan pemicu ledakan menjadi semakin kuat sehingga sensitivitas NTO menjadi berkurang. Hasil kajian teoritis ini sesuai dengan hasil kajian eksperimen.