

**COLLECTION OF RESEARCH PAPERS**

of the 6th International Research and Practical Conference

**CHEMICAL TECHNOLOGY:  
SCIENCE, ECONOMY AND PRODUCTION**

**ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ**

VI Міжнародної науково-практичної конференції

**ХІМІЧНА ТЕХНОЛОГІЯ:  
НАУКА, ЕКОНОМІКА ТА ВИРОБНИЦТВО**



МІНІСТЕРСТВО  
ОСВІТИ І НАУКИ  
УКРАЇНИ



Фармак



ISSN 2786-4898

Міністерство освіти і науки України  
Сумський державний університет  
Шосткинський інститут Сумського державного університету  
Центральний науково-дослідний інститут  
озброєння та військової техніки збройних сил України  
Публічне акціонерне товариство «Фармак»  
Управління освіти Шосткинської міської ради  
Виконавчий комітет Шосткинської міської ради

## COLLECTION OF RESEARCH PAPERS

of the 6th International Research and Practical Conference

### CHEMICAL TECHNOLOGY: SCIENCE, ECONOMY AND PRODUCTION



## ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

VI Міжнародної науково-практичної конференції  
**ХІМІЧНА ТЕХНОЛОГІЯ:  
НАУКА, ЕКОНОМІКА ТА ВИРОБНИЦТВО**

(м. Шостка, 23-25 листопада 2022 року)



Суми

Сумський Державний Університет

2022

УДК 66.01

Редакційна колегія:

Головний редактор Закусило Р.В., доцент кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, к.т.н., доцент.

Заступник головного редактора Павленко О.В., ст. викладач кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, к.т.н.

Відповідальний секретар Скуба Ю.Г. фахівець кафедри економіки та управління Шосткинського інституту Сумського державного університету

Члени редакційної колегії:

Лукашов В.К. – професор кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, д.т.н., професор;

Тур О.М. – завідувач кафедри економіки та управління, к.е.н.;

Худолей Г.М. – завідувач кафедри системотехніки і інформаційних технологій, к.т.н.;

Бондар Н.Ю. – доцент кафедри економіки та управління, к.філ.н.;

Тимофіїв С.В. – ст. викладач кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, к.х.н.

Збірник наукових праць VI Міжнародної науково-практичної конференції «Хімічна технологія: наука, економіка та виробництво», м. Шостка, 23 - 25 листопада 2022 року. – Суми : Сумський державний університет, 2022. – 267 с.

ISSN 2786-4898.

Збірник містить наукові праці учасників VI Міжнародної науково-практичної конференції «Хімічна технологія: наука, економіка та виробництво», що складаються з узагальнених матеріалів науково-дослідних робіт науковців різних галузей виробництв та наукових закладів України.

У збірнику висвітлюються актуальні питання спеціальної хімічної технології і виробництва боєприпасів, утилізації відходів виробництв різних галузей, енергозбереження, моделювання технологічних процесів, соціально-економічні аспекти виробництва та природокористування в умовах війни.

Збірник корисний робітникам хімічної промисловості, науковим співробітникам, аспірантам і студентам спеціальностей хіміко-технологічного та соціально-економічного профілів, фахівцям інформаційних технологій виробництва.

Наукові праці учасників конференції подаються в авторській редакції.

© Шосткинський інститут  
Сумського державного університету, 2022  
© Сумський державний університет, 2022

## SYNTHESIS AND DETERMINATION OF PROPERTIES OF HIGH-ENERGY COMPLEX COMPOUNDS CONTAINING 1,3-DIAMINOPROPANE

W. Kołodziej, K. Pawlus

Silesian University of Technology, Gliwice, Poland  
werokol490@student.polsl.pl, klaudia.pawlus@polsl.pl

High-energy complex compounds are products that consist of transition metals, an oxidizing anion and a ligand which is which is responsible for the release of energy stored during during the decomposition process. The process of forming complex compounds mainly involves the exchange of water molecules that are in the coordination zone of the central ion or atom for another ligand introduced into solution. The work on new explosives stems from higher expectations for the safety of using as well as storing these substances. The compounds discussed have the potential to exhibit high-energy properties, the main idea of the work was to get rid of toxic metals such as lead or mercury from the various energetic composition [1].

The work involved the synthesis of energetic coordination compound that includes a perchlorate oxidizing anion, metal (copper, iron, nickel and zinc) and a complexing agent, 1,3-diamidionopropane (DP). Parameters such as explosion temperature, friction susceptibility were determined during the experiments. The structures of the obtained compounds were confirmed by infrared spectroscopy and by scanning electron microscopy.

Complex compounds were obtained in the form of crystals, which are dark blue in color. The synthesis was carried out using 1,3-diaminopropane, copper perchlorate hexahydrate and solvents; ethanol, methanol and 2-propanol. Water solutions were prepared in round-bottomed flask in which 1.09 g of salt (depending on the metal salt used) and 29 ml of demineralized water were introduced. The flask was placed in a water bath and then the solution was stirred using a mechanical stirrer for 10 minutes. After the metal salt was completely dissolved, the ligand was added in even portions with a total volume of 0.33 ml. After adding the entire volume of the ligand, the solution was then stirred for a additional 30 minutes. During the addition of successive portions of the ligand, a change in the color of the solution from light blue to dark blue could be noticed. Finally, the flask with the solution was transferred to a rotary evaporator in an effort to precipitate the product. The resulting product was then recrystallized using a suitable solvent. The slides were left at room temperature to evaporate solvent.

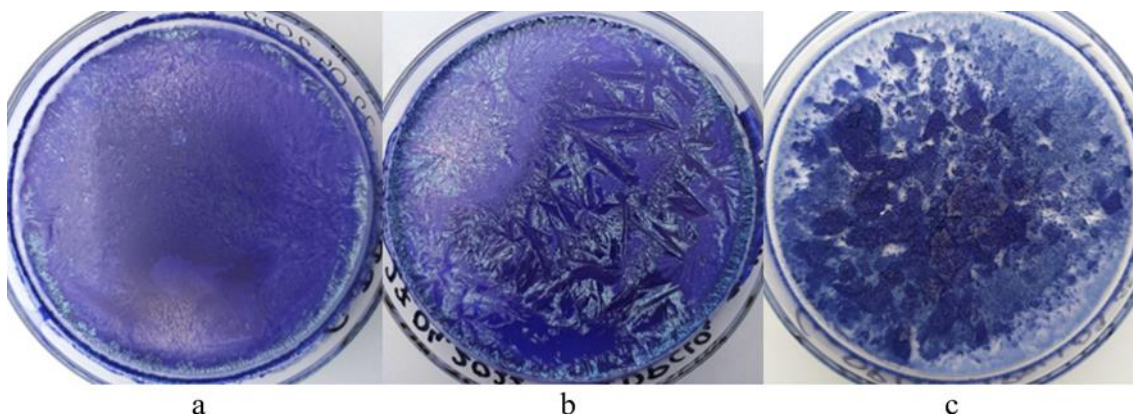


Figure 1 Petri dishes with sediment, consecutively: a -  $\text{Cu}(\text{DP})_4(\text{ClO}_4)_2$  with ethanol, b -  $\text{Cu}(\text{DP})_4(\text{ClO}_4)_2$  with methanol and c -  $\text{Cu}(\text{DP})_4(\text{ClO}_4)_2$  with 2-propanol

The identity of the compounds was confirmed using ATR-FTiR spectroscopy. It is a combination of two research techniques: infrared spectroscopy and microscopy, which makes it possible to analyze compounds after by analyzing the spectra. The technique involves directing infrared rays at a material with a high refractive index and the sample under study. The beam of light falls on the sample, and the values of the absorbed wavelength depend on the molecular vibrations of the substance [2]. The tables show analyses of the spectra of the compounds tested. Each absorption peak corresponds to a specific chemical bond, and the amine (NH) and methine (CH) functional groups were detected in each sample. With this method, the chemical identity of the synthesized compounds was confirmed by the presence of characteristic C-H and N-H bonds.

Table 1 Peak values and their interpretation for Cu(DP)<sub>4</sub>(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> with ethanol

Range [cm <sup>-1</sup> ]	Type of vibration [v,δ]	Intensity [vs,s,m,w]	Shape	Conclusions
1592	δ	m	sharp	deformation N-H
2901	v	w	sharp	tensile C-H
2967	v	w	sharp	tensile C-H
3266	v	s	sharp	stretching N-H
3318	v	s	sharp	stretching N-H

Table 2 Peak values and their interpretation for Cu(DP)<sub>4</sub>(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> with methanol

Range [cm <sup>-1</sup> ]	Type of vibration [v,δ]	Intensity [vs,s,m,w]	Shape	Conclusions
1591	δ	m	sharp	deformation N-H
2901	v	w	sharp	tensile C-H
2972	v	w	sharp	tensile C-H
3262	v	s	sharp	stretching N-H
3318	v	s	sharp	stretching N-H

Table 3 Peak values and their interpretation for Cu(DP)<sub>4</sub>(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> with 2-propanol

Range [cm <sup>-1</sup> ]	Type of vibration [v,δ]	Intensity [vs,s,m,w]	Shape	Conclusions
1591	δ	m	sharp	deformation N-H
2901	v	w	sharp	tensile C-H
2976	v	w	sharp	tensile C-H
3263	v	s	sharp	stretching N-H
3318	v	s	sharp	stretching N-H

Friction sensitivity testing of the obtained materials was carried out in accordance with the standard EN 13631-3 on a BAM friction apparatus (Peters friction apparatus). The test is carried out by placing the sample between a porcelain plate and a punch, during the test the pressure of the punch on the explosive is changed to determine the limiting parameters of interest. The upper insensitivity limit informs about the highest load at which no explosive reaction occurs, while the lower sensitivity limit is the value

informing about the lowest load at which an explosive reaction occurs [3]. The results of these measurements are shown in the Table 4.

Table 4 Lower limits of sensitivity and upper limits of insensitivity of compounds

Compounds	Lower sensitivity limit [N]	Upper limit of insensitivity [N]
Cu(DP) <sub>4</sub> (ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> with ethanol	59,4	58,8
Cu(DP) <sub>4</sub> (ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> with methanol	53,4	47,4
Cu(DP) <sub>4</sub> (ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> with 2-propanol	39,6	39,2

The flash point define as the lowest temperature at which spontaneous ignition of a material occurs [4]. The results are shown in the Table 5.

Table 5 Flash point test results

Compounds	Flash point [°C]
Cu(DP) <sub>4</sub> (ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> with ethanol	224,5
Cu(DP) <sub>4</sub> (ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> with methanol	218,1
Cu(DP) <sub>4</sub> (ClO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> with 2-propanol	219,4

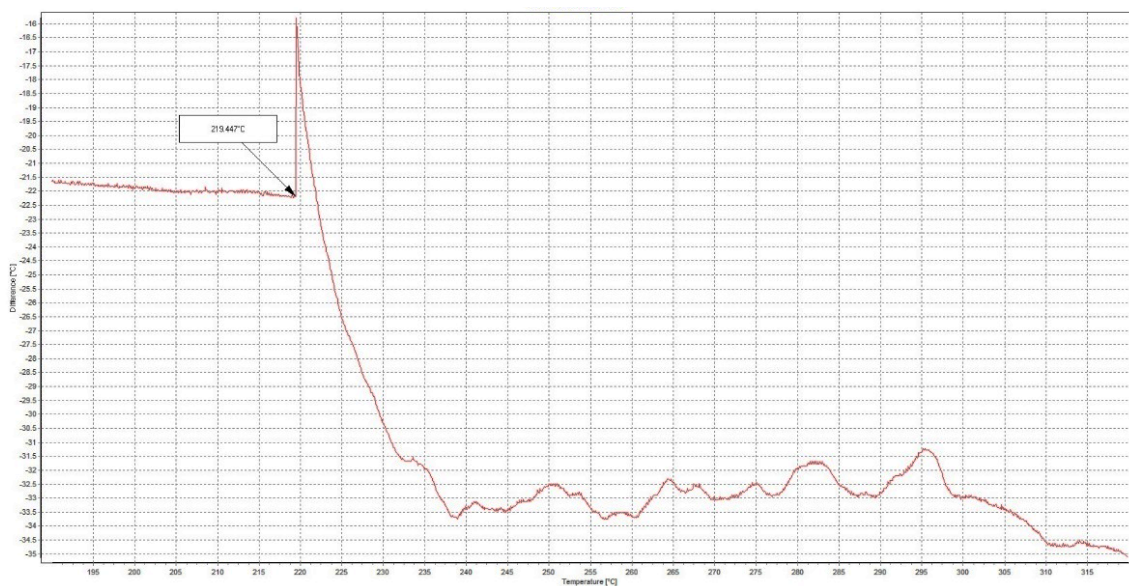


Figure 2 Explosion temperature for Cu(DP)<sub>4</sub>(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> with 2-propanol

Using a scanning electron microscope, images of the tested compounds were taken. The images in the microscope are created by scanning (hitting) the surface with an electron beam, thus obtaining an image from which the size, shape and distribution of the particles can be read. The attached images show differences in the porosity of the compounds [5].

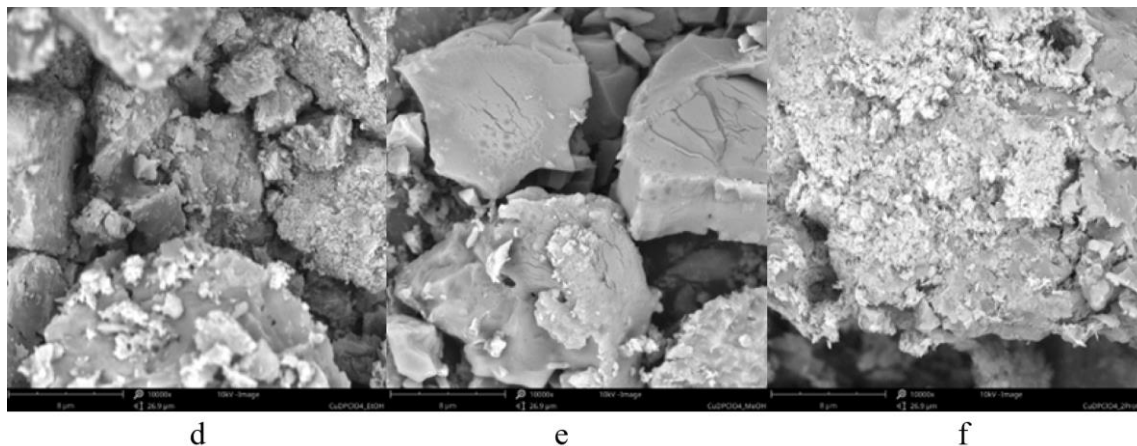


Figure 3 Images from a scanning electron microscope, in sequence: d –  $\text{Cu}(\text{DP})_4(\text{ClO}_4)_2$  with ethanol, e -  $\text{Cu}(\text{DP})_4(\text{ClO}_4)_2$  with methanol and f -  $\text{Cu}(\text{DP})_4(\text{ClO}_4)_2$  with 2-propanol

By using different solvents, compounds with different sensitivity parameters and different structures were obtained. Changing the solvent visibly affected the compound, as can be seen by comparing the SEM images of each composition, as well as after analyzing their sensitivity parameters. The compound exhibiting the highest value of friction sensitivity was  $\text{Cu}(\text{DP})_4(\text{ClO}_4)_2$  with 2-propanol and it has the lowest value of the upper insensitivity limit and lower insensitivity limit. Experiments have also been conducted on compounds containing transition metals such as iron, zinc and nickel, with an oxidizing anion such as perchlorate or nitrate(V).

An important aspect of the presented compounds is the absence in their structure of heavy metals such as mercury and lead, which are highly toxic metals. Research on these compounds is further carried out, among other things, impact sensitivity tests, mini GAP test and combustion will be performed. Once the research is completed, we conclude that these compounds will find applications as high explosive breakers.

#### References

1. Cudziło, S., and R. Szmigielski. "Synthesis and investigation of some di-(R-1, 2, 4-triazolato) copper (II) perchlorates." *Biuletyn Wojskowej Akademii Technicznej* 49.12 (2000): 5-17;
2. Szczerbowska-Boruchowska, Magdalena. "Mikrospektroskopia w podczerwieni z transformacją Fouriera w diagnostyce medycznej." *Pomiary Automatyka Kontrola* 53 (2007);
3. Maranda, Andrzej. "Metody badań wrażliwości materiałów wybuchowych na bodźce zewnętrzne w aspekcie przepisów ADR oraz norm polskich i europejskich." *Górnictwo i Geoinżynieria* 28.3/1 (2004): 349-360;
4. Rudy, W., R. Porowski, and A. Teodorczyk. "Metody określania temperatury zapłonu ciekłych substancji palnych i ich mieszanin." *Archiwum Spalania* 11.1-2 (2011): 67-87;
5. Płoszaj-Pyrek, Justyna. "Ocena zmian morfologii, składu chemicznego i struktury elektronowej powierzchni bakterii z wykorzystaniem skaningowego mikroskopu elektronowego oraz spektroskopu fotoelektronów." (2016).