

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ДОНЕЦЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА
ІНСТИТУТ ФІЗИКО-ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ І ВУГЛЕХІМІЇ
ІМ. Л. М. ЛИТВИНЕНКА НАН УКРАЇНИ**

ХІМІЧНІ ПРОБЛЕМИ СЬОГОДЕННЯ



**Десята Українська наукова конференція
студентів, аспірантів і молодих учених
з міжнародною участю**

ЗБІРНИК ТЕЗ ДОПОВІДЕЙ

ДО 80-РІЧЧЯ ДОННУ ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТУСА



**27–29 березня 2017 р.
м. Вінниця**

УДК 54(06)
ББК Гя431
Х 46

*Затверджено Вченою радою Донецького національного університету
імені Василя Стуса (протокол № 3 від 23.02.2017 р.)
Посвідчення про реєстрацію УкрІНТЕІ № 104 від 27.02.2017 р.*

Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2017): збірник тез доповідей Десятої Української наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених з міжнародною участю, 27–29 березня 2017 р., м. Вінниця / Донецький національний університет імені Василя Стуса; редколегія: О. М. Шендрик (відп. ред.) [та ін.]. – Вінниця, ТОВ "Нілан-ЛТД", 2017. – 324 с.

З 27 по 29 березня 2017 року в Донецькому національному університеті імені Василя Стуса відбулася Десята Українська наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених з міжнародною участю «Хімічні проблеми сьогодення» (ХПС-2017).

У збірнику опубліковані результати досліджень, які виконані в навчальних закладах та наукових установах України, Республіки Білорусь, Казахстану, Узбекистану, Російської Федерації, Словачії, Естонії, Німеччини, Франції, Сполучених Штатів Америки в галузі аналітичної, квантової, неорганічної, органічної, фізичної, медичної та фармацевтичної хімії, біохімії, хімічної освіти, хімічної інженерії, хімії полімерів і композитів.

Підтримка конференції:

ТОВ «УкрХімАналіз»
Науково-сервісна фірма «ОТАВА»
«Украинские аэрозоли»
ТОВ «Хімлаборреактив»
Приватне підприємство «Інструмент-Сервіс»
«АЛСІ-ХРОМ»
ТОВ «Мікслаб»
ТОВ «НВП «Укроргсинтез»

Редакційна колегія: О. М. Шендрик (відп. ред.)

С. В. Жильцова
Й. О. Опейда
С. В. Радіо
Г. М. Розанцев
О. М. Швед

Адреса редколегії: 21021, м. Вінниця, вул. 600-річчя, 21, хімічний факультет Донецького національного університету імені Василя Стуса.

ISBN 978-966-924-470-3

© ДонНУ імені Василя Стуса, 2017
© Колектив авторів, 2017
© О. М. Шендрик (відп. ред.), 2017
© ТОВ «Нілан-ЛТД», 2017

ПРОГРАМНИЙ ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ

Голова – д-р хім. наук, проф. *Шендрик Олександр Миколайович*, декан хімічного факультету Донецького національного університету імені Василя Стуса

Заступник голови, Вчений секретар – канд. хім. наук, доц. *Жильцова Світлана Віталіївна*, Донецький національний університет імені Василя Стуса

Беспалько Юлія Миколаївна – канд. хім. наук, доц., Донецький національний університет імені Василя Стуса

Богза Сергій Леонідович – д-р хім. наук, проф., старш. наук. співроб., Інститут органічної хімії НАН України

Гетьман Євген Іванович – д-р хім. наук, проф., Донецький національний університет імені Василя Стуса

Короткіх Микола Іванович – д-р хім. наук, проф., голов. наук. співроб., Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

Куш Ольга Василівна – канд. хім. наук, доц., старш. наук. співроб., Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

Лесишина Юлія Остапівна – канд. хім. наук, доц., Донецький національний університет імені Василя Стуса

Матвієнко Анатолій Григорович – д-р хім. наук, проф., провідн. наук. співроб., Інститут органічної хімії НАН України

Мельниченко Василь Іванович – канд. хім. наук, доц., Донецький національний університет імені Василя Стуса

Опейда Йосип Олексійович – д-р хім. наук, проф., голов. наук. співроб., Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

Радіо Сергій Вікторович – канд. хім. наук, доц., Донецький національний університет імені Василя Стуса

Ранський Анатолій Петрович – д-р хім. наук, проф., Вінницький національний технічний університет

Редько Андрій Миколайович – канд. хім. наук, старш. наук. співроб., Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

Рибаченко Володимир Іванович – д-р хім. наук, проф., провідн. наук. співроб., Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

Розанцев Георгій Михайлович – д-р хім. наук, проф., Донецький національний університет імені Василя Стуса

Чеканов Максим Олександрович – канд. хім. наук, старш. наук. співроб., Інститут молекулярної біології і генетики НАН України, засновник компанії ТОВ «УкрХімАналіз»

Фрасинюк Михайло Сергійович – канд. хім. наук, старш. наук. співроб., Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України

Хижан Олена Ісаївна – канд. хім. наук, доц., Національний університет біоресурсів і природокористування України

Швед Олена Миколаївна – д-р хім. наук, доц., Донецький національний університет імені Василя Стуса

Шпанько Ігор Васильович – д-р хім. наук, проф., Донецький національний університет імені Василя Стуса

ЛОКАЛЬНИЙ ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ

Голова – д-р хім. наук, проф. *Шендрик Олександр Миколайович*, декан хімічного факультету Донецького національного університету імені Василя Стуса

Заступник голови – канд. хім. наук, доц. *Жильцова Світлана Віталіївна*, Донецький національний університет імені Василя Стуса

Зосенко Ольга Олександрівна – аспірант, Донецький національний університет імені Василя Стуса

Калінський Олександр Михайлович – аспірант, Донецький національний університет імені Василя Стуса

Капітанчук Андрій Сергійович – студент, голова студентського самоврядування хімічного факультету, Донецький національний університет імені Василя Стуса

Марійчак Олександра Юріївна – аспірант, голова Ради молодих учених хімічного факультету Донецького національного університету імені Василя Стуса

Ткач Анастасія Русланівна – студент, голова наукового департаменту хімічного факультету, Донецький національний університет імені Василя Стуса

Усачов Олег Михайлович – студент, Донецький національний університет імені Василя Стуса

Цяпало Олександр Степанович – науковий співробітник, Донецький національний університет імені Василя Стуса

Ютілова Ксенія Сергіївна – аспірант, Донецький національний університет імені Василя Стуса

5-ГІДРОКСИМІНО-4-ІМІНО-1,3-ТІАЗОЛІДИН-2-ОН – НОВИЙ ПЕРСПЕКТИВНИЙ РЕАГЕНТ ДЛЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧНОГО ВИЗНАЧЕННЯ Rh(III) <i>Шевчук Д. Ю., Ридчук П. В., Тимошук О. С.</i>	42
БІОХІМІЯ / BIOCHEMISTRY	43
ОСОБЛИВОСТІ ЕКСТРАКЦІЇ ВОДОРОЗЧИННИХ КОМПОНЕНТІВ ВІВСЯНОЇ СОЛОМИ <i>Гайова Л. В., Родигіна І. В., Родигін М. Ю.</i>	44
СИНТЕЗ 1,3-ДИГІДРОКСИ-2Н-БЕНЗІМІДАЗОЛ-2-ОНУ ТА ГЕНЕРУВАННЯ НІТРОКСИЛЬНОГО РАДИКАЛА <i>Компанець М. О., Гордєєва І. О., Зосенко О. О., Шендрик О. М., Куш О. В., Опейда Й. О.</i> 45	
3-(ГІДРОКСИМІНО)ПЕНТАН-2,4-ДІОН В РАДИКАЛЬНИХ РЕАКЦІЯХ <i>Зосенко О. О., Компанець М. О., Каменєва Т. М., Панаріна Ю. О., Шендрик О. М.</i> . 46	
КАТАЛІЗОВАНЕ ЛАККАЗОЮ ТРАМЕТЕС VERSICOLOR ОКИСНЕННЯ 7,8-ДИГІДРОКСИ-4-ГІДРОКСИМЕТИЛКУМАРИНУ <i>Лаховець К. М., Цяпало О. С., Лесишина Ю. О., Фрасинюк М. С., Шендрик О. М.</i> .. 47	
ВИРТУАЛЬНИЙ РЕГИСТРАТОР ФОТОМЕТРИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ В ИЗУЧЕНИИ МЕДЛЕННЫХ РЕАКЦИЙ <i>Лахтаренко Н. В., Богатырева Е. В., Холмовой Ю. П.</i>	48
MOLECULAR SYSTEMS OF BIOTRANSFORMATION AND METAL STORAGE OF BIVALVE MOLLUSK IN THE EXPOSURE TO NANOFORM OF ZINC OXIDE <i>Mykhalska V., Martyniuk V., Kubashok Z., Maletska I., Kharchuk A., Soltys I.</i>	49
ЗНАЧЕННЯ ГІДРОГЕН СУЛЬФІДУ У ФОРМУВАННІ НЕАЛКОГОЛЬНОЇ ЖИРОВОЇ ХВОРОБИ ПЕЧІНКИ, АСОЦІЙОВАНОЇ З ГІПЕРГОМОЦИСТЕЇНЕМІЄЮ <i>Некрут Д. О., Заїчко Н. В.</i>	50
АКТИВНІСТЬ 2,2-АЗИНО-БІС(3-ЕТИЛБЕНЗТІАЗОЛІН-6-СУЛЬФОНОВОЇ) КИСЛОТИ ЯК МЕДІАТОРА ЛАККАЗИ ТРАМЕТЕС VERSICOLOR <i>Плешингер Т. С., Бураков І. М., Цяпало О. С., Лесишина Ю. О., Шендрик О. М.</i>	51
ФЕНОЛЬНІ СПОЛУКИ ЕТАНОЛЬНИХ ЕКСТРАКТІВ ГРИБІВ LENTINUS EDODES <i>Рябошанко О. Л., Лесишина Ю. О., Цяпало О. С., Кублинська І. А.</i>	52
СПОНТАННИЙ РОЗПАД ФТАЛІМІД-Н-ОКСИЛЬНИХ РАДИКАЛІВ РІЗНОЇ СТРУКТУРИ <i>Степаненко Г. М., Андрєєв О. В., Літвінов Ю. С., Компанець М. О., Куш О. В., Опейда Й. О.</i> 53	
КВАНТОВА ХІМІЯ / QUANTUM CHEMISTRY	55
ОЦЕНКА КОНФОРМАЦИОННОЙ ЗАСЕЛЕННОСТИ (R)-4-МЕНТЕНОНА <i>Белкина Н. В., Вакулин И. В.</i>	56
CRYSTAL GROWTH MORPHOLOGY AS A CRITERION OF IMPACT SENSITIVITY FOR POLYCRYSTALLINE EXPLOSIVES <i>Bondarchuk S. V.</i>	57
МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕДІНКИ ПРОПАНДІОВОЇ КИСЛОТИ ЯК НУКЛЕОФІЛЬНОГО РЕАГЕНТА В РЕАКЦІЇ З ХЛОРМЕТИЛОКСИРАНОМ <i>Калінський О. М., Завидовський О. І., Швед О. М., Беспалько Ю. М.</i>	58
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ТЕТРАЭДРИЧЕСКОГО ПРОМЕЖУТОЧНОГО ПРОДУКТА В РЕАКЦИЯХ РАСЩЕПЛЕНИЯ ЭФИРОВ УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ 1,3-ДИМЕТИЛ-2-(ГИДРОКСИМИНОМЕТИЛ)-ИМИДАЗОЛИЙ ЙОДИДОМ <i>Михеенко В. М., Сердюк А. А., Капитанов И. В.</i>	59
РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ГЕОМЕТРИИ ДЛЯ ТАУТОМЕРНЫХ ФОРМ АНТРОНА КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ <i>Сердюк А. А., Пастернак Е. Н., Касянчук М. Г.</i>	60

CRYSTAL GROWTH MORPHOLOGY AS A CRITERION OF IMPACT SENSITIVITY FOR POLYCRYSTALLINE EXPLOSIVES

Bondarchuk S. V.

Bogdan Khmelnsky Cherkasy National University
bondchem@cdu.edu.ua

An important property of a solid explosive is its impact sensitivity. This determines a minimum force (or energy) which is needed for initiation of detonation. To measure impact sensitivity one can apply conventional drop weight test. The result of such experiment, the h_{50} value (cm), determines a minimum drop height which is needed to reproduce 50 % of successful trials. Previously, a number of the quantitative structure-activity relationships (QSAR), including very complex artificial neural networks, were developed to predict the h_{50} values. These models are based on estimation of the molecular features (topological, electrostatic potential, volume, orbital information, etc) and provide satisfactory results.

On the other hand, the abovementioned QSAR models do not account the solid-state-derived properties of explosives. Conventional appearance of the drop weight test sample is granulated polycrystalline form. Thus, when dropped on the sample surface, the mechanical energy is shared through the contact points between separated neighboring crystals. The pressure formed upon dropping weight is extremely high in these points, which leads to changes in electronic band structure of the solid. Thus, it is clear that the crystal habit shape should affect the energy distribution efficiency and, subsequently, the impact sensitivity.

Hypothetically, the most closely packed polycrystalline materials should have ideally spherical habit shape. The real crystal habits are more or less deviated from the ideal spherical shape. Thus, the more the crystal habit deviates from sphericity, the more compressibility of this polycrystalline material is; graphically, this can be illustrated as in Fig. 1 a, b.

In the present report we introduce a measure of such deviation of the crystal habit shape (θ). This is based on the relation between the volume-surface ratio in an ideal sphere and a real crystal sample. Thus, if $V_1 = V_2$ and R is the radius of the sphere with V_1 (Fig. 1 a, b) than the crystal shape deviation (θ) can be expressed as the following.

$$\theta_1 = \frac{4\pi R^2}{V_{cryst}}; \theta_2 = \frac{S_{cryst}}{V_{cryst}}; \theta = \frac{\theta_2}{\theta_1} = \frac{S_{cryst}}{6^{2/3} V_{cryst}^{2/3} \pi^{1/3}}$$

In order to support this hypothesis, we have applied a series of calculations of the crystal morphology using the known crystal structures of the TKX-50 family explosives with the measured impact sensitivity. Figure 1 demonstrates the calculated results for highly explosive phenyldiazonium chloride (c) and insensitive tetrafluoroborate (d) as preliminary models. On the basis of the calculated results for the TKX-50 family explosives we can safely conclude that a dependence exists between the crystal habit shape and the corresponding h_{50} value.

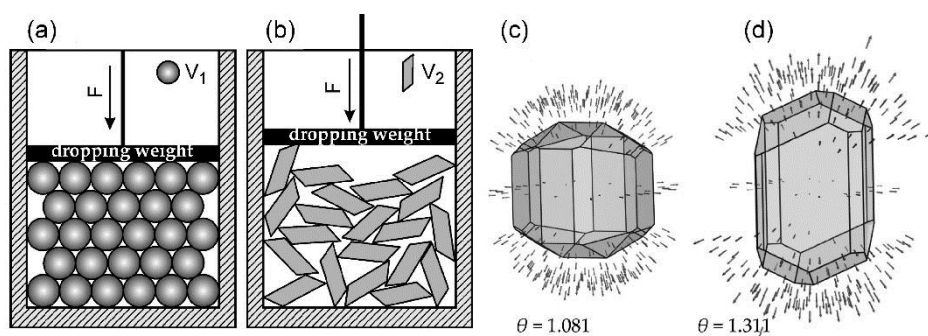


Fig. 1. The influence of the crystal habit shape on the energy distribution (a, b) and the calculated crystal habits for phenyldiazonium chloride (c) and tetrafluoroborate (d)