Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U004269

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-12-2025

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шевченко Дмитро Сергійович
2. Dmytro S. Shevchenko

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: 102 Хімія

Дата захисту: 18-12-2025

Спеціальність за освітою: 161 Хімічні технології та інженерія

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 11214

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.15.25.07, 31.15.25.09, 31.15.31.05, 31.15.15, 31.15.25, 31.15.26

Тема дисертації:

1. Термодинамічні властивості 3-(1,5-диарил-1Н-пірол-2-іл)-пропанових кислот та їх розчинів в органічних розчинниках
2. Thermodynamic properties of 3-(1,5-diaryl-1H-pyrrol-2-yl)-propanoic acids and their solutions in organic solvents

Реферат:

1. Дисертаційне дослідження присвячене комплексному вивченню основних термодинамічних характеристик похідних 3-(1,5-диарил-1Н-пірол-2-іл)-пропанових кислот, зокрема згорання, утворення, плавлення, випаровування, сублімації, розчинення та змішування. Похідні полізаміщеного піролу є цінними сполуками у зв’язку зі здатністю до прояву біологічної активності та структурної модифікації, що робить їх перспективними у використанні як компоненти лікарських засобів. Однак, їх термодинамічні властивості залишаються практично невивченими, що зумовлюватиме труднощі прогнозування їхньої стабільності та реакційної поведінки, а також при оптимізації технологічних процесів синтезу, очищення, зберігання та транспортування. У першому розділі проаналізовано наукові праці, що висвітлюють дослідження нітрогеновмісних гетероциклічних сполук. Розглянуто термодинамічні характеристики як індивідуальних речовин, так і їх розчинів, а також аспекти їхньої біологічної активності. Розглянуто існуючі методи

аналітичного розрахунку термодинамічних параметрів утворення. Аналіз досліджень підтвердив перспективність застосування похідних піролу для фармацевтичної галузі завдяки їхній вираженій біологічній активності. За результатами огляду літературних джерел для проведення експериментальних досліджень було обрано наступні методи: бомбову калориметрію спалювання для визначення енергії згорання речовин; дериватографічний метод аналізу для визначення ентальпій фазових переходів та гравіметричний метод для встановлення температурної залежності розчинності сполук в органічних розчинниках. Для аналітичного розрахунку ентальпії утворення сполук у конденсованому та газоподібному стані обрано адитивні схеми групових внесків Домальського та Джобака, а також напівемпіричні методи (AM1, PM3, PM6, PM7, RM1) та композитний метод за T1-алгоритмом квантово-хімічного розрахунку. У другому розділі наведено перелік досліджуваних речовин, еталонів для калібрування робочого лабораторного обладнання та обраних органічних розчинників. Описано методики синтезу та ідентифікації будови досліджуваних похідних 3-(1,5-диарил-1H-пірол-2-іл)-пропанових кислот. Здійснено попередню оцінку ймовірної біологічної активності сполук, що підтвердила їхній потенціал застосування як компонентів лікарських засобів. Наведено опис експериментальних методик і обладнання, зокрема бомбової калориметрії спалювання, дериватографії та гравіметрії. Описано математичний апарат статистичної обробки даних для забезпечення достовірності отриманих результатів. У третьому розділі описано процедури калібрування і перевірки надійності роботи застосованого лабораторного обладнання та експериментального визначення термодинамічних властивостей досліджуваних індивідуальних речовин. Надійність роботи калориметра спалювання B-08-MA та дериватографа Q-1500 D системи Paulik-Paulik-Erday було підтверджено проведенням низки експериментальних досліджень з використанням вторинного еталону (біфенілу). Методом бомбової калориметрії спалювання вперше експериментально визначено енергії згорання восьми похідних 3-(1,5-диарил-1H-пірол-2-іл)-пропанових кислот та на основі яких розраховано стандартні енергії, ентальпії згорання та утворення у конденсованому стані. Диференційно-термічний аналіз дозволив розрахувати ентальпії плавлення за температури плавлення досліджуваних речовин. За даними термогравіметричного аналізу визначено ентальпії випаровування кислот в інтервалі температур, за якого сполуки перебували у рідкому стані до початку термоокисної деструкції. Гравіметричним методом встановлено температурні залежності розчинності досліджуваних сполук в органічних розчинниках різної полярності: метилацетаті, етилацетаті, пропан-2-оні, ацетонітрилі, пропан-1-олі, пропан-2-олі, бутан-1-олі та ізобутанолі. У четвертому розділі описано перерахунки ентальпії фазових переходів досліджених похідних 3-(1,5-диарил-1H-пірол-2-іл)-пропанових кислот до 298,15 K із застосуванням двох методів перерахунку ентальпії випаровування. Для подібних арилпірольних сполук, у яких плавлення ускладнене термоокисною деструкцією, показано можливість аналітичного розрахунку їх ентальпії плавлення на основі усередненої експериментальної питомої величини ентропії плавлення (0,3015±0,0075 Дж/(г·K)) досліджених кислот. Обчислено величини ентальпії утворення у газоподібному стані досліджуваних кислот з використанням їх стандартних значень ентальпії сублімації, що було отримано при перерахунку ентальпій фазових переходів. Методами аналітичного розрахунку за адитивними схемами групових внесків Домальського, Джобака розраховано ентальпії утворення у конденсованому та газоподібному стані. Методами квантово-хімічного напівемпіричними (AM1, PM3, RM1, PM6 та PM7) та композитним за T1-алгоритмом розраховано величини ентальпії утворення у газоподібному стані. Порівнюючи експериментально визначені величини ентальпії утворення у конденсованому та газоподібному стані з аналітично обчисленими, проаналізовано справедливість застосування методів аналітичного розрахунку.

2. The PhD thesis is devoted to a comprehensive study of the main thermodynamic characteristics of 3-(1,5-diaryl-1H-pyrrol-2-yl)-propanoic acid derivatives, in particular combustion, formation, fusion, vaporization, sublimation, dissolution, and mixing. Polysubstituted pyrrole derivatives are valuable compounds due to their ability to exhibit biological activity and structural modification, which makes them promising for use as components of drug components. However, their thermodynamic properties remain practically unstudied, which will cause difficulties in predicting their stability and reaction behaviour, as well as in optimizing the technological processes of

synthesis, purification, storage, and transportation. The first chapter analyzes scientific works that highlight research on nitrogen-containing heterocyclic compounds. The thermodynamic characteristics of both individual substances and their solutions are considered, as well as aspects of their biological activity. Existing methods for analytical calculation of thermodynamic parameters of formation are analysed. Analysis of studies has confirmed the promise of using pyrrole derivatives in the pharmaceutical industry due to their significant biological activity. Based on the results of a review of the literature, the following methods were selected for experimental research: bomb calorimetry to determine the combustion energy of substances; derivatographic method of analysis to determine the enthalpies of phase transitions; and gravimetric analysis to determine the temperature dependence of the solubility of compounds in organic solvents. For the analytical calculation of the enthalpy of formation of compounds in the condensed and gaseous states, the additive schemes of group contributions by Domalski and Joback, as well as semi-empirical methods (AM1, PM3, PM6, PM7, RM1) and the composite method based on the T1 algorithm of quantum chemical calculation were selected for the analytical calculation of the enthalpy of formation of compounds in the condensed and gaseous states. The second chapter provides a list of the substances under study, standards for calibration of the laboratory equipment and selected organic solvents. Methods for the synthesis and identification of the structure of the studied derivatives of 3-(1,5-diaryl-1H-pyrrol-2-yl)-propanoic acids are described. A preliminary assessment of the potential biological activity of the compounds was carried out, confirming their potential for use as components of medicinal products. A description of experimental methods and equipment is provided, including bomb calorimetry of combustion, derivatography, and gravimetry. The mathematical methodology for statistical data processing to ensure the reliability of obtained results is described. The third chapter describes the procedures for calibrating and verifying the reliability of the laboratory equipment used and experimentally determining the thermodynamic properties of the individual substances under study. The reliability of the B-08-MA combustion calorimeter and the Q-1500 D derivatograph of the Paulik-Paulik-Erday system was confirmed by a series of experimental studies using a secondary standard (biphenyl). Using bomb calorimetry, the combustion energies of eight derivatives of 3-(1,5-diaryl-1H-pyrrol-2-yl)-propanoic acids were experimentally determined for the first time, and based on these results, the standard energies, enthalpies of combustion, and formation in the condensed state were calculated. Differential thermal analysis allowed us to calculate the enthalpy of fusion at the melting temperature of the substances under study. According to thermogravimetric analysis, the enthalpies of vaporization of acids were determined in the temperature range at which the compounds were in a liquid state before the beginning of thermal oxidation degradation. The gravimetric method was used to determine the temperature dependence of the solubility of the studied compounds in organic solvents of different polarity: methyl acetate, ethyl acetate, propan-2-one, acetonitrile, propan-1-ol, propan-2-ol, butan-1-ol, and isobutanol. The fourth chapter describes the recalculation of the enthalpy of phase transitions of the studied derivatives of 3-(1,5-diaryl-1H-pyrrol-2-yl)-propanoic acids to 298.15 K using two methods of recalculating the enthalpy of vaporization. For such arylpyrole compounds, in which melting is complicated by thermo-oxidative destruction, it has been shown that their enthalpy of fusion can be analytically calculated based on the averaged experimental specific value of entropy of fusion (0.3015±0.0075 J/(g·K)) of the studied acids. The enthalpy values of formation in the gaseous state of the studied acids were calculated using their standard sublimation enthalpy values, which were obtained by recalculating the enthalpies of phase transitions. Using analytical calculation methods based on Domalski and Joback's additive group contribution

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Не застосовується

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Shevchenko D.S. Solubility study of 3-(1-(4-methylphenyl)-5-phenylpyrrol-2-yl)propanoic acid in organic solvents / D.S. Shevchenko, Y.I. Horak, V.V. Matiichuk, N.I. Tischenko, M.D. Obushak, I.B. Sobechko // J. Chem. Technol. – 2025. – Vol. 33. – № 1. – P. 80–88. https://doi.org/10.15421/jchemtech.v33i1.312615
- Shevchenko D.S. Thermodynamic parameters of the solubility of 3-(1,5-diphenylpyrrol-2-yl)propanoic acid in organic solvents / D.S. Shevchenko, Y.I. Horak, N.I. Tischenko, D.B. Pyshna, M.D. Obushak, I.B. Sobechko // Vopr. Khim. Khim. Tekhnol. – 2025. – № 2(159). – P. 24–32. https://doi.org/10.32434/0321-4095-2025-159-2-24-32
- Shevchenko D. Synthesis and thermodynamic properties of 3-(5-phenyl-1-(pyridin-3-yl)-1H-pyrrol-2-yl)propanoic acid in condensed and gaseous states / Shevchenko D., Horak Y., Obushak M., Tischenko N., Sobechko I. // Curr. Chem. Lett. – 2025. – Vol. 14. – № 3. – P. 559–566. https://doi.org/10.5267/j.ccl.2025.3.002
- Shevchenko D. Synthesis and thermodynamic parameters of phase transitions of 3-(1-R-5-phenyl-1H-pyrrol-2-yl)propanoic acid derivatives. / Shevchenko D., Horak Y., Tyschenko N., Kichura D., Obushak M., Sobechko I. // Chem. Chem. Technol. – 2025. – Vol. 19. – № 3. – P. 403–410. https://doi.org/10.23939/chcht19.03.403
- Horak Y.I. Thermodynamic parameters of 5-(nitrophenyl)-furan-2-carboxylic acids solutions in propan-2-ol / Horak Y.I, Shevchenko D.S., Sobechko I.B. // Chem. Tech. App. Sub. – 2023. – Vol. 6. – № 1. – P. 15–21. https://doi.org/10.23939/ctas2023.01.015
- Shevchenko D.S. Thermodynamic properties of 3-(1,5-diphenylpyrrol-2-yl)-propanoic acid / Shevchenko D.S., Horak Y.I., Tischenko N.I., Pyshna D.B., Sobechko I.B. // Chem. Tech. App. Sub. – 2024. – Vol. 7. – № 1. – P. 8–14. https://doi.org/10.23939/ctas2024.01.008
- Сітар А. Синтез 3-(1R-5-феніл-1-Н-пірол-2-іл)пропанових кислот та прогнозування їх біологічної активності / Сітар А., Шевченко Д., Матійчук В., Скрипська О., Лесюк О., Хом'як С., Литвин Р., Собечко І., Горак Ю. // Вісник Львівського університету. Серія хімічна. – 2024. – Вип. 65. – № 1. – P. 223–230. https://doi.org/10.30970/vch.6501.223
- Shevchenko D. Experimental studies of thermodynamic properties of 3-(5-phenylpyrrol-2-yl)-propanoic acid / Shevchenko D., Horak Y., Obushak M., Tischenko N., Pyshna D., Sobechko I. // Proc. Shevchenko Sci. Soc. Chem. Sci. – 2024. – Vol. 75. – № 1. – P. 90–99. https://doi.org/10.37827/ntsh.chem.2024.75.090
- Shevchenko D.S. Experimental determination of thermodynamic parameters of 3-(5-phenyl-1-(furan-2-ylmethyl)-1H-pyrrol-2-yl)propanoic acid / Shevchenko D.S., Horak Y.I., Tischenko N.I., Obushak M.D., Sobechko I.B. // Chem. Tech. App. Sub. – 2025. – Vol. 8. – № 1. – P. 24–32. https://doi.org/10.23939/ctas2025.01.024
- Шевченко Д.С. Розчинність похідних 3-(1,5-диарил-1Н-пірол-2-іл)-пропанових кислот в естерах ацетатної кислоти / Шевченко Д.С., Горак Ю.І., Собечко І.Б. // Тези доп. XV Всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів «Хімічні Каразінські Читання – 2023». – Харків, 24-26 квітня 2023. – С. 207–208.
- Shevchenko D.S. Solubility of 3-(1,5-diaryl-1H-pyrrol-2-yl)-propanoic acid derivatives in butanol isomers / Shevchenko D.S., Gorak Y.I., Sobechko I.B. // Abstracts of XXIV International Conference for Students, PhD Students and Young Scientists «Modern chemistry problems». – Kyiv, May 17-19, 2023. – P. 147.
- Шевченко Д.С. Встановлення температурної залежності розчинності 3-(1-(4-метоксифеніл)-5-феніл-пірол-2-іл)-пропанової кислоти в органічних розчинниках / Шевченко Д.С., Горак Ю.І., Собечко І.Б., Пишна Д.Б. // Тези доп. XIV Всеукраїнської конфереції молодих вчених, студентів та аспірантів з актуальних питань хімії. – Харків, 10-12 жовтня 2023. – С. 48.
- Shevchenko D.S. Solubility temperature dependence of 3-(1-(4-methylphenyl)-5-phenyl-pyrrole-2-yl)-propanoic acid in alcohols / Shevchenko D.S., Gorak Y.I., Sobechko I.B., Pyshna D.B. // Abstracts of International Scientific Conference «Modern achievements in food, organic and polymer chemistry». – Lviv, October 24-26, 2023. – P. 139.

- Shevchenko D. Solubility temperature dependence of 3-(1,5-diaryl-1H-pyrrol-2-yl)-propanoic acid derivatives in acetonitrile / Shevchenko Dmytro, Gorak Yurii, Pyshna Diana, Sobechko Iryna // Abstracts of IV International Scientific Conference «Current problems of chemistry, materials science and ecology». – Lutsk, December 7-9, 2023. – P. 49–51.
- Shevchenko D.S. Ecological utilization of pharmaceutical products as an non-traditional energy source / Shevchenko D.S., Horak Y.I., Obushak M.D., Pyshna D.B., Sobechko I.B. // Abstracts of VIII International Congress «Environment Protection. Energy Saving. Sustainable Environmental Management». – Lviv, October 16-18, 2024. – P. 125.
- Shevchenko D.S. Energetics of 3-(1,5-diphenyl-1H-pyrrol-2-yl)propanoic acid derivatives / Shevchenko D.S., Horak Yu.I., Obushak M.D., Pyshna D.B., Sobechko I.B. // Abstracts of VIII International (XVIII Ukrainian) Scientific Conference for Students and Young Scientists «Current Chemical Problems». – Vinnytsia, March 25-27, 2025. – P. 81.
- Shevchenko D.S. Experimental and analytical energetic study of 3-(5-phenyl-1-(furan-2-ylmethyl)-1H-pyrrol-2-yl)propanoic acid / Shevchenko D.S., Horak Yu.I., Obushak M.D., Pyshna D.B., Sobechko I.B. // Abstracts of IX Ukrainian scientific conference «Current problems of chemistry: research and prospects». – Zhytomyr, April 9, 2025. – P. 135–136.

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали; методи, теорії, гіпотези; аналітичні матеріали

Соціально-економічна спрямованість: поліпшення стану навколишнього середовища; економія енергоресурсів; економія матеріалів; зменшення зносу обладнання; оптимізація нових, існуючих виробничих процесів, пов’язаних з синтезом, переробкою, очищенням, зберіганням, транспортуванням індивідуальних речовинодинамічні величини

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Собечко Ірина Борисівна
2. Iryna B. Sobechko

Кваліфікація: д.х.н., доцент, 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-0155-9944

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мороз Микола Володимирович
2. Mykola V. Moroz

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-1639-4713

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет водного господарства та природокористування

Код за ЄДРПОУ: 02071116

Місцезнаходження: вул. Соборна, Рівне, Рівненський р-н., 33028, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дутка Володимир Степанович
2. Volodymyr S. Dutka

Кваліфікація: д.х.н., доцент, 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-4157-787X

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Половкович Святослав Володимирович
2. Sviatoslav V. Polovkovych

Кваліфікація: д. х. н., доц., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7143-6931

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 36634574500; Web of Science Researcher ID: JAC-7806-2023; https://scholar.google.com.ua/citations?user=xSeNw08AAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Когут Ананій Михайлович
2. Ananii M. Kohut

Кваліфікація: д.х.н., професор, 02.00.06

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7469-1209

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Стасевич Марина Володимирівна
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Стасевич Марина Володимирівна
Відповідальний за підготовку облікових документів	Шевченко Дмитро Сергійович
Реєстратор	Юрченко Тетяна Анатоліївна
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна