Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0521U101734

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-09-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Собечко Ірина Борисівна
2. Sobechko Iryna Borysivna

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.06

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 08-09-2021

Спеціальність за освітою: технологія переробки пластмас та еластомерів

Місце роботи здобувача: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 35.051.10

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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, буд. 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.25, 31.21.27

Тема дисертації:

1. Термодинамічні властивості оксигено- та нітрогеновмісних гетероциклічних сполук та їх розчинів.

2. Thermodynamic properties of oxygen- and nitrogencontaining heterocyclic compounds and their solutions.

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню термодинамічних властивостей оксигено- та нітрогеновмісних гетероциклічних сполук, які володіють широким спектром фармакофорних властивостей та їх розчинів у ряді органічних розчинників. Проведено комплексне термодинамічне дослідження індивідуальних речовин та їх розчинів за результатами якого визначено: температурні залежності тисків насиченої пари; ентальпії сублімації випаровування та плавлення; ентальпії згорання та утворення у конденсованому стані; ентальпії утворення у газоподібному стані; температурні залежності розчинності у ацетонітрилі, етилацетаті, бензені, пропан-2-олі та пропан-2-оні; ентальпії та ентропії розчинення та змішування (сольватації). Запропоновано прості рівняння розрахунку змін теплоємності процесів сублімації та випаровування за 298К, які значно простіші за відомі методи розрахунку, проте не поступається їм за точністю. За молекулярною масою речовини, температурою її плавлення та питомими величинами ентропії плавлення, які визначені для різних класів речовин, запропоновано рівняння розрахунку ентальпій плавлення. З використанням змін теплоємності та ентропії за процесу плавлення запропоновано рівняння

перерахунку ентальпій плавлення до будь якої іншої температури. Проведено розрахунок термодинамічних параметрів досліджених речовин за адитивними схемами Бенсона, Лебедєва-Мірошніченка, Джобака, Круена, Домальського та Салмон. Поповнено адитивну схему Бенсона та Лєбедєва-Мірошніченка новими груповими внесками. Показано можливість розрахунку ентальпій сублімації за результатами диференційно-термічного та термогравіметричного аналізу. Адаптовано метод заміни фрагментів для розрахунку ентальпій утворення у конденсованому стані. Показано присутність надлишкових енергій, водневого зв'язку та диполь-дипольних взаємодій у досліджених речовинах. За результатами дослідження розчинності обраного ряду речовин у низці органічних розчинників розраховано ентальпії та ентропії розчинення та змішування. Показано присутність компенсаційного ефекту між ентальпіями та ентропіями змішування. Показано взаємозв'язок температури плавлення та її розчинності, за якою запропоновано рівняння для оцінки розчинності за температурою плавлення речовини.

2. The dissertation is devoted to the study of thermodynamic properties of oxygen- and nitrogen-containing heterocyclic compounds, which have a wide range of pharmacophore properties and their solutions in a number of organic solvents. A comprehensive thermodynamic study of individual substances and their solutions was carried out, the results of which: bomb calorimetry determined the energy and enthalpy of combustion and the formation of five furan and twenty-eight arylfuran compounds and six 1,2,3,4-tetrahydropyrimidines in the condensed state; Knudsen's integral effusion method was used to study the temperature dependences of the saturated vapor pressure above the surface of five furan and twenty-seven arylfuran substances in the solid state and for three substances in the liquid state; enthalpies of sublimation of thirty-three substances are calculated; Differential thermal and thermogravimetric methods of analysis determined the enthalpies of melting and evaporation of five furan, twenty-five arylfuran and six 1,2,3,4-tetrahydropyrimidine substances; According to the experimentally determined values of enthalpies of formation in the condensed state and enthalpies of sublimation, the enthalpies of formation of five furan, twenty-six arylfuran and 1,2,3,4-tetrahydropyrimidine compounds in the gaseous state were calculated; the thermodynamic parameters of dissolution of four furan and twenty-six arylfuran substances in acetonitrile, benzene, ethyl acetate, propan-2-ol and propan-2-ones were investigated. Simple equations for calculating changes in the heat capacity of sublimation and evaporation processes by 298K are proposed, which are much simpler than the known calculation methods, but are not inferior to them in accuracy. The equation for calculating the enthalpies of melting is proposed according to the molecular weight of the substance, its melting temperature and specific values of the melting entropy, which are determined for different classes of substances. Using changes in heat capacity and entropy during the melting process, the equation for converting the enthalpies of melting to any other temperature is proposed. The thermodynamic parameters of the investigated substances were calculated according to the semi-empirical calculation schemes of Benson, Lebedev-Miroshnichenko, Jobak, Kouen, Domalsky and Salmon. Their comparison with experimental values is made and the received discrepancies are analyzed. The additive scheme of Benson and Lebedev-Miroshnichenko was replenished with new group contributions. The possibility of calculating the enthalpies of sublimation based on the results of differential thermal and thermogravimetric analysis is shown. The method of fragment replacement for the calculation of enthalpies of formation in the condensed state has been adapted. The presence of excess energies, hydrogen bonding and dipole-dipole interactions in the investigated substances is shown. Taking into account the enthalpies and entropies of melting, the values of enthalpy and entropy of the mixing process of the investigated substances in a number of selected solvents at 298 K were determined. The relationship between the enthalpies of mixing with the energies of dipole-dipole interactions and the hydrogen bond in solutes and solvents is shown. The presence of compensation effects of the process of dissolution of the investigated substances in the applied solvents is established. The relationship between the melting temperature and its solubility is shown, according to which the equation for estimating the solubility by the melting temperature of a substance is proposed.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дібрівний Володимир Миколайович
2. Dibrivny Volodymyr Mykolayovych

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дібрівний Володимир Миколайович
2. Dibrivnyi Volodymyr Mykolayovych

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дутка Володимир Степанович
2. Dutka Volodymyr Stepanovych

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Судавцова Валентина Савеліївна
2. Sudavtsova Valentina Savelivna

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Опейда Йосип Олексійович
2. Opeida Josyp Oleksiyovych

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.15

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Каличак Ярослав Михайлович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Каличак Ярослав Михайлович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.