# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Image not found or type unknow

**Державний обліковий номер:** 0826U001549

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 12-05-2026

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Костюк Ростислав Романович
2. Rostyslav Kostiuk

**Кваліфікація:** 102

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0009-0009-9893-0604

**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:** Хімія

**Дата захисту:** 29-07-2026

**Спеціальність за освітою:** 161 Хімічні технології та інженерія

**Місце роботи здобувача:** Організація відсутня

**Код за ЄДРПОУ:** 00000000

**Місцезнаходження:** ------, Київ, 00000, Україна

**Форма власності:** Змішана

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:**

## III. Відомості про організацію, де відбувся захист

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** PhD 13489

**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 2-метил-1,5-диарил-1Н-пірол-3-карбонових кислот та їх розчинів в органічних розчинниках

2. Thermodynamic properties of 2-methyl-1,5-diaryl-1H-pyrrole-3-carboxylic acids and their solutions in organic solvents

### Реферат/анотація:

1. Представлене дисертаційне дослідження присвячене вирішенню актуального науково-практичного завдання, що полягає в експериментальному визначенні основних термодинамічних властивостей чотирьох похідних 2-метил-1,5-диарил-1Н-пірол-3-карбонових кислот, трьох похідних 1-(2-метил-1,5-дифенілпірол-3-іл)етанону та їх розчинів в органічних розчинниках, а також термодинамічні властивості етил 2-метил-1-(4-метилфеніл)-5-фенілпірол-3-карбоксилату. Азотовмісні гетероциклічні сполуки привертають значну увагу дослідників завдяки здатності проявляти біологічну активність, яка спонукає до їхнього різностороннього застосування як у фармацевтичній, так і у харчовій та хімічній галузях промисловості. Такими сполуками є похідні полізаміщеного піролу. Термодинамічні властивості цього класу сполук залишаються маловивченими, тому спрогнозувати їх стабільність та реакційну здатність для оптимізації технологічних процесів синтезу, очищення, переробки та зберігання є одним з основних напрямків сучасних

досліджень. Метою даної дисертаційної роботи є дослідження основних термодинамічних характеристик похідних 2-метил-1,5-диарил-1Н-пірол-3-карбонових кислот, 1-(2-метил-1,5-дифенілпірол-3-іл)етанону та етил 2-метил-1-(4-метилфеніл)-5-фенілпірол-3-карбоксилатом, зокрема процесів згорання, утворення, плавлення, випаровування, сублімації, розчинення та змішування. Для досягнення поставленої мети у роботі було виконано наступні експериментальні та аналітичні дослідження: –уперше здійснено синтез чотирьох похідних 2-метил-1,5-диарил-1Н-пірол-3-карбонових кислот, трьох похідних 1-(2-метил-1,5-дифенілпірол-3-іл)етанону та етил 2-метил-1-(4-метилфеніл)-5-фенілпірол-3-карбоксилатом, проведено їх структурну ідентифікацію методами ЯМР- та ІЧ-спектроскопії та оцінено біологічну активність за допомогою веб-орієнтованих програмних забезпечень PLATO r36 та SuperPred; –уперше проведено диференційно-термічні та термогравіметричні дослідження похідних 2-метил-1,5-диарил-1Н-пірол-3-карбонових кислот, трьох похідних 1-(2-метил-1,5-дифенілпірол-3-іл)етанону та етил 2-метил-1-(4-метилфеніл)-5-фенілпірол-3-карбоксилатом. Встановлено, що процес плавлення 1-R-2-метил-5-феніл-1Н-пірол-3-карбонових кислот супроводжується термоокисною деструкцією. За результатами дериватографічних досліджень та аналітичних розрахунків визначено ентальпії фазових переходів (плавлення, випаровування та сублімації). Проведено перерахунок ентальпії фазових переходів до 298,15 К; – уперше експериментальним методом бомбової калориметрії спалювання визначено енергії згорання чотирьох похідних 2-метил-1,5-диарил-1Н-пірол-3-карбонових кислот, трьох похідних 1-(2-метил-1,5-дифенілпірол-3-іл)етанону та етил 2-метил-1-(4-метилфеніл)-5-фенілпірол-3-карбоксилатом; розраховано величини ентальпій їх утворення в конденсованому стані. Розраховано величини ентальпій утворення у газоподібному стані. За аналітичними методами розрахунку на основі адитивних схем групових внесків Домальського обчислено ентальпії утворення у конденсованому та газоподібному станах, проведено розрахунок ентальпії утворення за Т1-алгоритмом; –уперше експериментально встановлено температурні залежності розчинності похідних 2-метил-1,5-диарил-1Н-пірол-3-карбонових кислот та двох похідних 1-(2-метил-1,5-дифенілпірол-3-іл)етанону у ряді органічних розчинників (метилацетат, етилацетат, ацетонітрил, пропан-1-ол, пропан-2-ол, бутан-1-ол та бутан-2-ол), за результатами яких розраховано ентальпії та ентропії розчинення. Обчислено ентальпії та ентропії змішування досліджуваних речовин, проаналізовано отримані результати та встановлено характер взаємодії кожної речовини у ряді використаних розчинників. Отримані результати експериментальних досліджень термодинамічних властивостей індивідуальних речовин істотно розширять теперішню довідникову базу та створять підгрунтя для коригування аналітичних методів розрахунку термохімічних характеристик похідних 2-метил-1,5-диарил-1Н-пірол-3-карбонових кислот, похідних 1-(2-метил-1,5-дифенілпірол-3-іл)етанону та етил 2-метил-1-(4-метилфеніл)-5-фенілпірол-3-карбоксилатом. Результати дослідження можуть бути використані для оптимізації існуючих виробничих процесів, пов'язаних із синтезом, переробкою, очищенням, зберіганням і транспортуванням індивідуальних речовин, що сприятиме зниженню сукупних енергетичних та економічних витрат.

2. This dissertation research is devoted to addressing a pressing scientific and practical problem, which consists in the experimental determination of the main thermodynamic properties of four derivatives of 2-methyl-1,5-diaryl-1H-pyrrole-3-carboxylic acids, three derivatives of 1-(2-methyl-1,5 -diphenylpyrrole-3-yl)ethanone, and their solutions in organic solvents, as well as the thermodynamic properties of ethyl 2-methyl-1-(4-methylphenyl)-5-phenylpyrrole-3-carboxylate. Nitrogen-containing heterocyclic compounds have attracted significant attention from researchers due to their ability to exhibit biological activity, which has led to their diverse applications in the pharmaceutical, food, and chemical industries. Such compounds include derivatives of poly-substituted pyrrole. The thermodynamic properties of this class of compounds remain poorly understood; therefore, predicting their stability and reactivity to optimize technological processes for synthesis, purification, processing, and storage is one of the main focuses of current research. The aim of this dissertation is to investigate the main thermodynamic characteristics of 2-methyl-1,5-diaryl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid derivatives, 1-(2-methyl-1,5 -diphenylpyrrole-3-yl)ethanone derivatives, and ethyl 2-methyl-1-(4-methylphenyl)-5-phenylpyrrole-3-carboxylate, in particular the processes of combustion, formation, melting, evaporation, sublimation, dissolution, and mixing. To achieve the stated objective, the following experimental and analytical studies were conducted in this work: –for the first time,

four derivatives of 2-methyl-1,5-diaryl-1H-pyrrole-3-carboxylic acids, three derivatives of 1-(2-methyl-1,5-diphenylpyrrole-3-yl)ethanone, and ethyl 2 -methyl-1-(4-methylphenyl)-5-phenylpyrrole-3-carboxylate; their structural identification was performed using NMR and IR spectroscopy, and their biological activity was evaluated using the web-based software PLATO r36 and SuperPred; –for the first time, differential thermal and thermogravimetric studies were conducted on derivatives of 2-methyl-1,5-diaryl-1H-pyrrole-3-carboxylic acids, three derivatives of 1-(2-methyl-1,5-diphenylpyrrole-3-yl)ethanone, and ethyl 2 -methyl-1-(4-methylphenyl)-5-phenylpyrrole-3-carboxylate. It was established that the melting process of 1-R-2-methyl-5-phenyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acids is accompanied by thermo-oxidative decomposition. Based on the results of derivatographic studies and analytical calculations, the enthalpies of phase transitions (melting, evaporation, and sublimation) were determined. The enthalpies of phase transitions were recalculated to 298.15 K; –for the first time, the combustion energies of four derivatives of 2-methyl-1,5-diaryl-1H-pyrrole-3-carboxylic acids and three derivatives of 1-(2-methyl-1,5 -diphenylpyrrole-3-yl)ethanone, and ethyl 2-methyl-1-(4-methylphenyl)-5-phenylpyrrole-3-carboxylate; the enthalpies of their formation in the condensed state were calculated. The formation enthalpies in the gaseous state were calculated. Using analytical calculation methods based on Domalsky's additive schemes of group contributions, the formation enthalpies in the condensed and gaseous states were calculated, and the formation enthalpy was calculated using the T1 algorithm; –for the first time, the temperature dependencies of the solubility of 2-methyl-1,5-diaryl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid derivatives and two 1-(2-methyl-1,5-diphenylpyrrole-3-yl)ethanone derivatives in a series of organic solvents (methyl acetate, ethyl acetate, acetonitrile, propan-1-ol, propan-2-ol, butan-1-ol, and butan-2-ol), based on which the enthalpies and entropies of dissolution were calculated. The enthalpies and entropies of mixing of the studied substances were calculated, the results were analyzed, and the nature of the interaction of each substance in a series of solvents was determined. The results obtained from experimental studies of the thermodynamic properties of individual substances will significantly expand the current reference base and create a foundation for refining analytical methods for calculating the thermochemical characteristics of 2-methyl-1,5-diaryl -1H-pyrrole-3-carboxylic acids, 1-(2-methyl-1,5-diphenylpyrrole-3-yl)ethanone derivatives, and ethyl 2-methyl-1-(4-methylphenyl)-5-phenylpyrrole-3-carboxylate. The results of the study can be used to optimize existing production processes related to the synthesis, processing, purification, storage, and transportation of individual substances, which will contribute to a reduction in overall energy and economic costs.

**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:**


- 1. Kostiuk R.R. «Thermodynamic properties of 2-methyl-5-phenylfuran-3-carboxylic acid» Kostiuk R.R., Horak Y.I., Velychkivska N., Sobechko I.B., Pyshna D.B., Dibrivnyi V.M. //Chemistry, Technology and Application of Substances – 2023. –Vol.6 – Number 1– P. 8-14 https://doi.org/10.23939/ctas2023.01.008
- 2. Kostiuk R.R. «Thermodynamic parameters of a solution of 2-methyl-5-phenyl-1-(-4-methylphenyl)-pyrrole-3-carboxylic acid in alcohols» Kostiuk R.R., Horak Y.I., Sobechko I.B. //Chemistry, Technology and Application of Substances – 2024. –Vol.7 Number 2 – P. 1-6. https://doi.org/10.23939/ctas2024.02.001
- 3. Kostiuk R.R. «Thermodynamic parameters of solubility of 1-cyclohexyl-2-methyl-5-phenyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid in organic solvents» Kostiuk R., Motovylsky O., Soloviov V., Horak Y., Obushak M., Sobechko I. //Вісник Львівського університету. Серія хімічна – 2025. – Номер 1(66) – С.224-231.

https://doi.org/10.30970/vch.6601.224

- 4. Kostiuk R.R. «Synthesis and solubility of 1-[2-methyl-1-(4-methylphenyl)-5-phenyl-1h-pyrrol-3-yl] ethanone in organic solvents» Kostiuk R.R., Horak Y.I., Obushak M.D., Tyshchenko N.I., Sobechko I.B. //Chemistry, Technology and Application of Substances – 2025. – Vol.8 – Number 1 – P. 17-23. https://doi.org/10.23939/ctas2025.01.017
- 5. Kostiuk R.R. «Thermodynamic parameters of solubility of 1-r-2-methyl-5-phenyl-pyrrole-3-carboxylic acids in acetonitrile» R. Kostiuk, Yu. Horak, M. Obushak, I. Sobechko //Proceedings of the Shevchenko Scientific Society. Series Chemical Sciences – 2025. – Vol. 78. – P. 226-235. https://doi.org/10.37827/ntsh.chem.2025.78.226
- 6. Kostiuk R.R. «Thermodynamic parameters of the solubility of 1-r-2-methyl-5-phenylpyrrole-3-carboxylic acids in methyl acetate and ethyl acetate» R.R. Kostiuk, Y.I. Horak , M.D. Obushak, I.B. Sobechko //Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii (Питання хімії та хімічної технології) – 2026. – № 1(184). – P. 103-112. https://doi.org/10.32434/0321-4095-2026-164-1-103-112
- 7. Kostiuk R.R. «Synthesis of 1-[1-(4-methoxyphenyl)-2-methyl-5-phenyl-pyrrole-3-yl]ethanone and its solubility in a variety of organic solvents» R.R. Kostiuk, Y.I. Horak , M.D. Obushak, I.B. Sobechko N. Tischenko //Journal of Chemistry and Technologies – 2026. – Vol.34 – № 1. – P. 98-106. https://doi.org/10.15421/jchemtech.v34i1.338413
- 8. Костюк Р.Р. «Розчинність 2-метил-1-(4-метилфеніл)-5-феніл-пірол-3-карбонової кислоти в органічних розчинниках» Костюк Р. Р. , Дібрівний В. М. , Горак Ю. І. //Тези доп. XV Всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів «Хімічні Каразінські Читання – 2023». – Харків, 24-26 квітня 2023. – С. 189-190.
- 9. Kostiuk R.R. «Thermochemical determination of excess in organic nitrogen-containing heterocyclic compounds» Kostiuk R. R. , Gorak Y. I. , Sobechko I. B. //Abstracts of International Scientific Conference «Modern achievements in food, organic and polymer chemistry». – Lviv, October 24-26, 2023. – P.30.
- 10. Kostiuk R.R. «Synthesis and thermodynamic parameters of dissolution of 1-cyclohexyl-2-methyl-5-phenyl-1h-pyrrole-3-carboxylic acid in alcohols» Kostiuk R. R., Horak Y. I., Sobechko I. B //Abstracts of IX Ukrainian scientific conference «Current problems of chemistry: research and prospects». – Zhytomyr, April 9, 2025. – P. 130-131.
- 11. Kostiuk R.R. «Thermodynamic parameters of a solution of 2-methyl-5-phenyl-1-(-4-methylphenyl)-pyrrole-3-carboxylic acid in alcohols» Kostiuk R. R., Horak Y. I., Sobechko I. B //Тези доп. XVII Всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів «Хімічні Каразінські Читання – 2025». – Харків, 29 квітня 2025. – С. 109-110.
- 12. Kostiuk R.R. «Thermodynamic parameters of dissolution of 1-cyclohexyl-2-methyl-5-phenyl-1h-pyrrole-3-carboxylic acid in in typical organic solvents » Kostiuk R. Horak Yu. Obushak M. Sobechko I. //XX Наукова конференція “Львівські хімічні читання – 2025” 2-4 червня 2025 р. м. Львів с. 247
- 13. Kostiuk R.R. «Thermodynamic properties of derivatives of 2-methyl-5-phenyl-1r-1h-pyrrole-3-carboxylic acids in the condensed state» R.R. Kostiuk, Y.I. Horak , I.B. Sobechko //The scientific heritage – 2026. – Number 178. – P. 14-18. https://doi.org/10.5281/zenodo.18614847

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

**Соціально-економічна спрямованість:** поліпшення стану навколишнього середовища; економія енергоресурсів; економія матеріалів; зменшення зносу обладнання; підвищення продуктивності праці

**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:** https://scholar.google.com/citations?user=VvSyNjIAAAAJ&hl=uk; Scopus Author ID: 56085726100

**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 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. Сливка Юрій Іванович

2. Yurii I. Slyvka

**Кваліфікація:** д. х. н., професор, с.д., 02.00.01

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0003-2751-2543

**Додаткова інформація:** Scopus Author ID 7801691096; Web of Science Researcher ID: L-9334-2017; https://scholar.google.com.ua/citations?user=ec0M5nkAAAAJ

**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. Марінцова Наталія Геннадіївна
2. Natalia G. Marintsova

**Кваліфікація:** к.х.н., доцент, 02.00.03

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0003-3705-4443

**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:**

**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** | Гнатів З.Я. |
| **Реєстратор** | Юрченко Тетяна Анатоліївна |
| **Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності** | Юрченко Тетяна Анатоліївна |