Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Image not found or type unknow

Державний обліковий номер: 0826U005594

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-11-2026

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Огороднік Марта Ярославівна

2. Marta Y. Ohorodnik

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0007-4500-3757

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:

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: 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:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 17436

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: 31.01, 31.15, 31.21, 29.17.

Тема дисертації:

1. Дослідження термодинамічних властивостей похідних 4,7-діоксо-7-арилгептанових кислот та продуктів їх синтезу

2. Investigation of thermodynamic properties of 4,7-dioxo-7-arylheptanoic acid derivatives and their synthesis products

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена експериментальному дослідженню термодинамічних властивостей похідних 4,7-діоксо-7-арилгептанових кислот та продуктів їх синтезу. У роботі встановлено закономірності зміни термодинамічних характеристик індивідуальних сполук і їх розчинів у ряді органічних розчинників, а також проведено оцінку енергетичних властивостей досліджених речовин на основі експериментально визначених ентальпій випаровування та стандартних ентальпій утворення в газоподібному стані. Важливе значення як потенційно біологічно активні сполуки мають похідні, що містять арильні та фуранові фрагменти. Встановлено, що функціоналізовані похідні арилів і фуранів здатні вступати в реакції гетероциклізації та конденсації з утворенням нових фармакофорних фрагментів, які формують фармакологічно активну частину молекул лікарських засобів. У зв'язку з цим синтез нових класів сполук, що містять зазначені структурні фрагменти, а також визначення для них термодинамічних параметрів є

актуальною науковою задачею. Не менш важливим є дослідження поведінки таких сполук у розчинах різної природи, що дозволяє глибше зрозуміти характер міжмолекулярних взаємодій та прогнозувати їх фізико-хімічні й біологічні властивості. Метою дисертаційної роботи є експериментальне та розрахункове визначення комплексу термодинамічних характеристик похідних 4,7-діоксо-7-арилгептанових кислот і продуктів їх синтезу, а також встановлення закономірностей впливу структури молекул на енергетичні та розчинні властивості досліджуваних сполук. У роботі поставлено та виконано такі завдання дослідження: • Проаналізовано сучасні літературні джерела, присвячені термодинамічним і біологічним аспектам арильних та фуранових похідних у різних фазових станах, що дозволило обґрунтувати вибір об'єктів дослідження та напрямки термодинамічного й структурно-енергетичного аналізу. • Синтезовано шість нових органічних сполук, а саме похідні 4,7-діоксо-7-фенілгептанової кислоти (I–III) та 3-(5-феніл-2-фурил)пропанової кислоти (IV–VI). Їх структуру та індивідуальність підтверджено методами ІЧ-спектроскопії. • Досліджено температурні залежності розчинності синтезованих кислот у ряді органічних розчинників різної полярності (метилацетат, етилацетат, пропан-2-он, ацетонітрил, пропан-1-ол, пропан-2-ол, бутан-1-ол, 2-метилпропан-1-ол) та на їх основі розраховано ентальпії й ентропії розчинення. • Уперше з використанням диференційно-термічного та термогравіметричного методів аналізів встановлено ентальпії плавлення і випаровування похідних 4,7-діоксо-7-арилгептанових кислот та 3-(5-феніл-2-фурил)пропанових кислот, чим суттєво доповнено експериментальну базу термодинамічних даних для цього класу сполук. • Методом бомбової калориметрії експериментально визначено енергії згорання шести синтезованих речовин; з урахуванням відповідних поправок та реакції згоряння розраховано стандартні теплоти згорання та стандартні теплоти утворення у конденсованому стані. • За перерахованими до температури 298,15 K значеннями ентальпій і ентропій плавлення обчислено ентальпії та ентропії змішування, встановлено прояв ентальпійно-ентропійної компенсації у розчинах досліджених сполук і проаналізовано вплив структурних особливостей молекул на характер взаємодій з розчинниками. • Оцінено можливості застосування адитивних методів групових внесків (Бенсона, Коена, Домальського, Салмон), методу заміни та композитного квантово-хімічного підходу за Т1-алгоритмом для розрахунку ентальпій утворення у конденсованому та газоподібному станах; показано задовільну узгодженість розрахункових і експериментальних даних, що підтверджує доцільність використання цих методів для прогнозування термодинамічних характеристик арильних і фуранових похідних.

2. This dissertation is devoted to an experimental study of the thermodynamic properties of 4,7-dioxo-7-arylheptanoic acid derivatives and their synthesis products. The dissertation establishes the regularities governing the variation in the thermodynamic characteristics of individual compounds and their solutions in a series of organic solvents and evaluates the energetic properties of the studied compounds based on experimentally determined enthalpies of vaporization and standard gaseous enthalpies of formation. Derivatives containing aryl and furan moieties are of particular importance as potentially biologically active compounds. It has been established that functionalized aryl and furan derivatives undergo heterocyclization and condensation reactions to form new pharmacophoric fragments responsible for the biological activity of drug molecules. In this regard, the synthesis of new classes of compounds containing these structural fragments, as well as the determination of their thermodynamic parameters, is a pressing scientific challenge. Equally important is the study of the behavior of such compounds in solutions of various types, which allows for a deeper understanding of the nature of intermolecular interactions and the prediction of their physicochemical and biological properties. The aim of this dissertation is to experimentally and theoretically determine the thermodynamic properties of 4,7-dioxo-7-arylheptanoic acid derivatives and their synthesis products and to establish the relationships between molecular structure and the energetic and solubility properties of the studied compounds. The following research objectives were set and accomplished in this work: • A review of the current literature on the thermodynamic and biological aspects of aryl and furan derivatives in various phase states was carried out, providing the basis for the selection of the research objects and the directions of the thermodynamic and structure–property analysis. • Six new organic compounds were synthesized, namely derivatives of 4,7-dioxo-7-phenylheptanoic acid (I–III) and 3-(5-phenyl-2-furyl)propanoic acid (IV–VI). Their structures and purity were confirmed by IR spectroscopy. • The temperature

dependencies of the solubility of the synthesized acids in a series of organic solvents of varying polarity (methyl acetate, ethyl acetate, propan-2-one, acetonitrile, propan-1-ol, propan-2-ol, butan-1-ol, 2-methylpropan-1-ol) were determined. Based on these data, the enthalpies and entropies of dissolution were calculated, enabling the characterization of intermolecular interactions in solution. • For the first time, using differential thermal analysis and thermogravimetric analysis, the enthalpies of fusion and evaporation of 4,7-dioxo-7-arylheptanoic acid derivatives and their synthesis products were determined, thus significantly expanding the experimental database of thermodynamic data for this class of compounds. • The combustion energies of six synthesized substances were experimentally determined using bomb calorimetry; taking into account the relevant corrections and the combustion reaction, standard enthalpies of combustion and standard enthalpies of formation in the condensed state were calculated. • Using the values of enthalpies and entropies of fusion reduced to 298.15 K, the enthalpies and entropies of mixing were calculated; the existence of enthalpy–entropy compensation in solutions of the studied compounds was established, and the influence of the structural features of the molecules on the nature of interactions with solvents was analysed. • The applicability of additive group contribution methods (Benson, Cohen, Domalski, Salmon) and the composite quantum-chemical approach based on the T1 algorithm for calculating formation enthalpies in the condensed and gaseous states was assessed; satisfactory agreement between calculated and experimental data was demonstrated, confirming the suitability of these methods for predicting the thermodynamic properties of aryl and furan derivatives.

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. Ohorodnik M.Ya. Dissolution of 4,7-dioxo-7-phenylheptanoic acid in organic solvents / M.Ya. Ohorodnik, Yu.I. Horak, M.D. Obushak, N.I. Tischenko, I.B. Sobechko // Vopr. Khim. Khim. Tekhnol. – 2026. – No 1. – P. 42–49. https://doi.org/10.32434/0321-4095-2026-164-1-42-49 (Scopus)
- 2. Ohorodnik M.Ya. Solubility of 5-(4-methylphenyl)-2-furanpropanoic acid in different organic solvents. / M.Ya. Ohorodnik, Y.I. Horak, M.D. Obushak. N.I. Tischenko, I.B. Sobechko // Chem. Tech. App. Sub. – 2024. – Vol. 7 – No 1. – P. 1–7. https://doi.org/10.23939/ctas2024.01.001
- 3. Ohorodnik M.Ya. Solubility of 4,7-dioxo-7-(4-methylphenyl)heptanoic acid in some organic solvents / M.Ya. Ohorodnik, Yu.I. Horak, I.B. Sobechko, N.I. Tischenko // Visnyk of the Lviv University. Series Chemistry. – 2025. – Vol. 66 – No 1. – P. 232–239. https://doi.org/10.30970/vch.6601.232
- 4. Ohorodnik M.Ya. Synthesis and thermodynamic properties of solutions of 3-(5-aryl-2-furyl)propanoic acids in ethyl acetate / M.Ya. Ohorodnik, Yu.I. Horak, N.I. Tischenko, M.D. Obushak, I.B. Sobechko // Chem. Tech. App. Sub. – 2025. – Vol. 8 – No 1. – P. 10–16. https://doi.org/10.23939/ctas2025.01.010
- 5. Ohorodnik M.Ya. Solubility of 4,7-dioxo-7-phenylheptanoic acid derivatives in acetonitrile / M.Ya. Ohorodnik, Yu.I. Horak, I.B. Sobechko // Chem. Tech. App. Sub. – 2026. – Vol. 9. – No 1. – P. 1–7. https://doi.org/10.23939/ctas2026.01.001.
- 6. Огороднік М.Я. Розчинність 3-[5-(4-метилфеніл)фуран-2-іл]пропанової кислоти в органічних розчинниках / М.Я. Огороднік, І.Б. Собечко, Ю.І. Горак // Тези доповідей Міжнародної наукової конференції «Modern achievements in food, organic and polymer chemistry», присвяченої світлій пам'яті професора Станіслава Воронова. – Львів, 24–26 жовтня 2023 р. – С. 26–27.

- 7. Ohorodnik M.Ya. Solubility of 3-[5-(4-methylphenyl)furan-2-yl]propanoic acid in organic solvents / M.Ya. Ohorodnik, Yu.I. Gorak, I.B. Sobechko // Proceedings of the IV International Scientific Conference “Actual Problems of Chemistry, Materials Science and Ecology”. – Lutsk, December 7–9, 2023. – P. 46–48.
- 8. Огороднік М. Я. Розчинення 4,7-діоксо-7-(4-метилфеніл)гептанової кислоти у деяких органічних розчинниках різної полярності / М.Я. Огороднік // Матеріали Всеукраїнського конкурсу «Хімічний калейдоскоп» на базі Полтавського національного педагогічного університету імені В.Г. Короленка. – Полтава, листопад 2024 р
- 9. Огороднік М.Я. Термодинамічні властивості розчинів 3-(5-арил-2-фурил)пропанових кислот у етилацетаті / М.Я. Огороднік, Ю. І. Горак, І. Б. Собечко // Хімічні проблеми сьогодення: VIII Міжнародна (XVIII українська) наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених, 25–27 березня 2025 р.: матеріали конференції. – Вінниця, 2025. – С. 88.
- 10. Огороднік М.Я. Розчинення 4,7-діоксо-7-фенілгептанової кислоти в органічних розчинниках різної полярності / М.Я. Огороднік, Ю.І. Горак, М.Д. Обушак, І.Б. Собечко // Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи: матеріали IX Всеукраїнської наукової конференції, – Житомир, 9 квітня 2025 р. – 2025. – С. 170–171.
- 11. Огороднік М.Я. Розчинення 4,7-діоксо-7-арилгептанових кислот у н-пропанолі / М.Я. Огороднік, Ю.І. Горак, І.Б. Собечко // Львівські хімічні читання п 2025: XX Наукова конференція, 2–4 червня 2025 р., матеріали конференції. – Львів, 2025. – С. 244.
- 12. Огороднік М.Я. Термодинамічні властивості 4,7-діоксо-7-фенілгептанової кислоти / М.Я. Огороднік, І.Б. Собечко // XV Всеукраїнська конференція молодих вчених, студентів та аспірантів з актуальних питань хімії, 7–10 жовтня 2025 р.: матеріали конференції. – Харків, 2025. – С. 77.
- 13. Огороднік М.Я. Енергетика похідних 4,7-діоксо-7-фенілгептанової кислоти/ М.Я. Огороднік, І.Б. Собечко // Хімічні проблеми сьогодення: IX Міжнародна (XIX українська) наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених, 24–26 березня 2026 р.: матеріали конференції. – Вінниця, Україна, 2026. – С. 88.
- 14. Огороднік М.Я. Явище ентальпійно-ентропійної компенсації в системах розчинів похідних 3-(5-феніл-2-фурил)пропанової кислоти/ М.Я. Огороднік, І.Б. Собечко // Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи: матеріали X Всеукраїнської наукової конференції, – Житомир, 15 квітня 2026 р. – 2026. – С. 179 –180.

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

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. Онисько Михайло Юрійович
2. Mykhailo Y. Onysko

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-6121-828X

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 22986328700; Web of Science Researcher ID: AAZ-2608-2021; https://scholar.google.com/citations?user=1xF-k3EAAAAJ&hl

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, 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., професор, 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. 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 Сергеєв Валентин Вікторович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Сергеєв Валентин Вікторович
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

