Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U101657

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-06-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Клачко Олена Ростиславівна
2. Klachko Olena Rostyslavivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 17-05-2021

Спеціальність за освітою: Хімія

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): ДФ 35.052.062

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

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: 31.21

Тема дисертації:

1. Термодинамічні властивості естерів 6-метил-2-оксо-4-арил-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбонової кислоти та їх розчинів в органічних розчинниках

2. Thermodynamic properties of 6-methyl-2-oxo-4-aryl-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylic acid esters and their solutions in organic solvents

Реферат/анотація:

1. В даному дисертаційному дослідженні вирішено важливе науково-практичне завдання для галузі знань 10 Природничі науки □ визначено термодинамічні властивості семи естерів 6-метил-2-оксо-4-арил-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбонової кислоти та їх розчинів в органічних розчинниках. Похідні тетрагідропіримідинового ряду на сьогоднішній день мають широке застосування у фармацевтичній промисловості, що пов'язано з широким спектром їхніх властивостей. Однак, попри всю важливість даного класу сполук, їх термодинамічні властивості вивчені недостатньо. У літературі відсутні ентальпійні характеристики, які б забезпечили існуючі схеми розрахунку ентальпій утворення, випаровування, сублімації та розчинення. Саме тому необхідність вивчення термодинамічних параметрів похідних дигідропіримідинів є важливим завданням термодинаміки. Актуальність проведених досліджень обумовлюється як з теоретичної точки зору – поясненням особливостей та специфіки структурної будови, природи

міжмолекулярних та внутрішньомолекулярних зв'язків, так і з практичної – розробкою нових методик, які б спрощували та удосконалювали процеси одержання та очистки тетрагідропіримідинів, цілеспрямований синтез із наперед заданими характеристиками. У результаті виконаних експериментальних досліджень: – для семи представників класу естерів 6-метил-2-оксо-4-арил-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбонової кислоти вперше експериментально одержані наступні термодинамічні параметри: ентальпії згорання, ентальпії утворення в конденсованому стані, ентальпії випаровування та сублімації, ентальпії розчинення, температурні залежності розчинності; – проаналізовано вплив властивостей досліджених сполук на термодинамічні параметри їх розчинів в органічних розчинниках; – проаналізовано можливість використання адитивних схем для розрахунку ентальпії утворення даного класу сполук. Одержані значення термодинамічних величин дають можливість оптимізувати процеси одержання дослідженого ряду сполук (стандартна ентальпія утворення та згорання, ентальпія випаровування), а також для процесів їх розділення та очистки (розчинність в органічних розчинниках).

2. An important scientific and practical problem for the field of knowledge 10 Natural sciences was solved in this dissertation research, namely the thermodynamic properties of seven esters of 6-methyl-2-oxo-4-aryl-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5 carboxylic acid and their solutions in organic solvents were determined. Derivatives of the tetrahydropyrimidine series are widely used in the pharmaceutical industry, due to the wide range of their properties. However, despite the importance of this class of compounds, their thermodynamic properties is insufficiently studied. There are no enthalpy characteristics in the literature that would provide the existing schemes for calculating the enthalpies of formation, evaporation, sublimation and dissolution. That is why the study of the thermodynamic parameters of dihydropyrimidine derivatives is an important task of thermodynamics. The relevance of the research is determined both from a theoretical point of view - an explanation of the features and specifics of the structural structure, nature of intermolecular and intramolecular bonds, and from a practical point of view - the development of new techniques that would simplify and improve the synthesis and purification of tetrahydropyrimidines characteristics. The results of experimental studies are: – for the first time the following thermodynamic parameters: enthalpy of combustion, enthalpy of formation in the condensed state, enthalpy of evaporation sublimation, enthalpy of dissolution, temperature dependences of solubility were experimentally obtained for seven representatives of the class of esters of 6 methyl-2-oxo-4-aryl-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylic acid; – the influence of the properties of the investigated compounds on the thermodynamic parameters of their solutions in organic solvents is analyzed; – the possibility of using additive schemes to calculate the enthalpy of formation of this class of compounds is analyzed. The obtained values of thermodynamic quantities make it possible to optimize the processes of obtaining the studied series of compounds (standard enthalpy of formation and combustion, enthalpy of evaporation), as well as for the processes of their separation and purification (solubility in organic solvents).

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. Сергеєв Валентин Вікторович
2. Sergeev Valentin Viktorovich

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. Горбачук Микола Петрович
2. Horbachuk Mykola P

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. Обушак Микола Дмитрович
2. Obushak Mykola Dmytrovych

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Половкович Святослав Володимирович
2. Polvkovych Sviatoslav V.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.03

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. Мельник Галина Володимирівна
2. Melnyk Galyna Volodymyrivna

Кваліфікація: к. 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

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

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.