

## РІШЕННЯ ЩОДО ПРИСУДЖЕННЯ НАУКОВОГО СТУПЕНЯ ДОКТОРА НАУК

Спеціалізована вчена рада Д 35.051.10 Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України (м. Львів) прийняла рішення щодо присудження наукового ступеня доктора хімічних наук Собечко Ірині Борисівні на підставі прилюдного захисту дисертації «Термодинамічні властивості оксигено- та нітрогеновмісних гетероциклічних сполук та їх розчинів» у вигляді рукопису за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія 8 вересня 2021 року, протокол № 13/3.

Собечко Ірина Борисівна 1976 року народження, громадянка України, освіта вища: закінчила у 1998 році Державний університет «Львівська політехніка» Міністерства освіти і науки України за спеціальністю «Технологія переробки пластмас та еластомерів».

Наукові ступені і вчені звання:

- кандидат хімічних наук з 2008 р.

З 2019р і дотепер докторант кафедри фізичної, аналітичної та загальної хімії Національного університету «Львівська політехніка» Міністерства освіти і науки України.

Дисертація виконана на кафедрі фізичної, аналітичної та загальної хімії Інституту хімії та хімічних технологій Національного університету «Львівська політехніка» Міністерства освіти і науки України.

**Науковий консультант: Дібрівний Володимир Миколайович** – доктор хімічних наук, професор, професор кафедри фізичної, аналітичної та загальної хімії Національного університету «Львівська політехніка».

Здобувачка має 60 опублікованих праць за темою дисертації, з них 2 праці написані без співавторів, 40 статей в наукових фахових виданнях, 13 з яких індексуються у наукометричній базі даних Scopus, в тому числі:

1. Dibrivnyi V. Thermodynamic properties of 5(nitrophenyl)-furan-2-carbaldehyde isomers / V.Dibrivnyi, **I. Sobechko**, M. Puniak, Yu. Horak, M.Obushak, Yu. Van-Chin-

Syan, A.Marshalek, N. Velychkivska // Chemistry Central Journal. – 2015. – 9:67. DOI 10.1186/s13065-015-0144-x/.

2. **Sobechko I.** Calculation method of heat capacity change during organic compounds vaporization and sublimation / I. Sobechko // Chemistry & Chemical technology. – 2016. – Vol. 10. – № 1.– P.27-33.

3. **Sobechko I.** Thermodynamic properties of 2-methyl-5-arylfuran-3 carboxylic acids chlorine derivatives in organic solvents / I. Sobechko, Y. Horak, V. Dibrivnyi, M. Obushak, L. Goshko // Chemistry & Chemical Technology. – 2019. – Vol. 13, № 3. – P. 280–287.

4. Klachko O. Thermodynamic properties of 6-methyl-2-oxo-4-aryl-1,2,3,4-tetrahydropyrimidine-5-carboxylic acid esters / O. Klachko, V. Matychuk, **I. Sobechko**, V. Serheyev, N. Tishchenko. *Chemistry & Chemical Technology*. – 2020. – Vol. 14, № 3. – P. 277–283.

#### **Офіційні опоненти:**

**Дутка Володимир Степанович** – доктор хімічних наук, за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія, доцент, професор кафедри фізичної та колоїдної хімії Львівського національного університету імені Івана Франка, дав позитивний відгук із зауваженнями:

1. На нашу думку, в другому розділі дисертаційної роботи опис методик калориметричних та дериватографічних сильно досліджень деталізований та переобтяжений. Оскільки дані методики наведені в посібниках та підручниках, то цю частину можна було би дещо скоротити.

2. В роботі відсутні чіткі критерії за якими автор відбирав органічні розчинники для дослідження. Поряд з сильно токсичним акрилонітрилом автори використовують бензен, пропанол та ацетон.

3. Досліджуваних сполуках А-1 – А-8 та К-2 , К-11, К-12 містяться реакційноздатні групи: альдегідні та акрилової кислоти, які є нестабільні і в присутності кисню повітря та невисоких температур можуть перетворюватись в карбонові кислоти або полімеризуватись. В дисертаційній

відсутні даних про те як зберігалися ці речовини і чи не спостерігалось їхнього неконтрольованого перетворення в ході проведення експериментальних досліджень.

4. Твердження автора про те, що «точне розв'язування рівняння Шрьодінгера можливе лише для молекул  $H_2$  та  $H_2^+$ » (стор 138) з посиланням на монографію № 182 списку літератури з 1978 року некоректне. На даний час розроблені багато квантово-хімічних програм, які здатні розраховувати термодинамічні параметри з точністю, яка відповідає експериментальним даним.

5. У таблиці 4.3.6. автор подає ентропії диполь-дипольних взаємодій та водневих зв'язків у досліджуваних сполуках. Судячи з структури досліджених сполук, у молекулах можуть утворюватись як внутрішньо-молекулярні так і міжмолекулярних водневі зв'язки та може реалізовуватись утворення димерів за типом водневого зв'язку. Про які зв'язки іде мова? Які групи молекул утворюють такі зв'язки?

6. Автор пов'язує вплив діелектричної проникності ( $\epsilon$ ) та дипольного моменту ( $\mu$ ) та акцепторного  $A_N$  та донорного  $D_N$  числа на числове значення ентальпій змішування, на нашу думку, коректніше використовувати функцію Кірквуда  $(\epsilon - 1)/(2\epsilon + 1)$ , яка характеризує полярність реакційного середовища та функцію показника заломлення  $(n^2 - 1)/(n^2 + 1)$ , яка відповідальна за здатність розчинника до поляризації. Крім того, необхідно враховувати параметри розчинника, які відповідають за специфічну сольватацію досліджуваних речовин – основність (B) та електрофільність(E).

7. У таблиці 5.7 наведено рівняння лінійної залежності логарифма мольної частки розчиненої речовини від оберненої температури плавлення досліджуваних сполук. У цій таблиці наведено коефіцієнти кореляції R, які в більшості рівні або більші 0,95, що відповідає задовільній кореляції. Однак у деяких випадку альдегідів та амідів в пропанолі-2 числове значення R є нижчим, що вказує на відсутність кореляції. Це факт потребує пояснення.

**Опейда Йосип Олексійович** – доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.15 – хімічна кінетика та каталіз, професор, головний науковий співробітник Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М. Литвиненка НАН України, дав позитивний відгук із зауваженнями:

1. Стор.139. Автори розраховували термодинамічні параметри фуран-2-оксиму (O-1) використавши програму Gaussian-09, метод DFT-B3LYP з базисним набором 6-311G++(3pd,3df). З тексту дисертації не видно як вибирались характеристики методу і чи зміна його характеристик не покращить результатів обчислення, чи оптимізувалася геометрія молекули, чи вибирався найбільш вигідний конформер. Різниця у 74,3 кДж/моль між експериментальним значенням ентальпії утворення та розрахунковим дали авторам підставу негативно оцінити можливість цього варіанта методу, разом з тим вже при застосуванні напівемпіричного метода РМЗ ця різниця на порядок менша і становить 7,3 кДж/моль. Однак слід підкреслити, що лише маючи експериментальні дані для навчального набору з досліджених сполук певного класу можна вибрати найбільш точний квантово-хімічний метод для обчислення термодинамічних властивостей цього класу органічних сполук.

2. Стосовно адитивних схем опису термодинамічних властивостей. При їх безперечній важливості, на нашу думку, варто співставити отримані теоретичні результати з підходами, розробленими в останні роки:

– Meier, R. J. Group Contribution Revisited: The Enthalpy of Formation of Organic Compounds with “Chemical Accuracy”. *Chem Engineering*, 2021. 5(2), 24. P. 2-21;

– Argoub, K., et all. Estimation and uncertainty analysis of standard enthalpy of formation in the liquid state by third-order-group-contribution method. *Fluid Phase Equilibria*, 2020. 520, P. 1-50.

– Yalamanchi, K. K., et all. Machine learning to predict standard enthalpy of formation of hydrocarbons. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2019. 123(38), P. 8305-8313.

3. Стор. 174. За даними диференційно-термічного аналізу було встановлено, що деякі із досліджуваних кислот у процесі плавлення зазнають впливу термоокисної деструкції. Не зрозуміло, що мається на увазі під термоокисною деструкцією і якщо окисником тут є кисень, то чи не можна її уникнути, проводячи процес в інертному газі.

4. Вимагає ширшого пояснення, чому для розрахунку ентальпій плавлення взято питомі значення ентропії плавлення (розділ 4.4.2), коли для обчислення термодинамічних параметрів звичайно беруться молярні величини.

5. Не позначені на графіках точки, що дозволило б віднести їх до конкретної величини.

6. Є на наш погляд кілька невдалих висловів: стор. 91. *Калориметрична посудина, калориметрична місткість, кришка калориметричної посудини*; стор.127. *Статистично надійні значення  $T_{\text{fus}}$* ; стор.139. *Базовими налаштуваннями 6-311G++(3pd,3df)*, треба – *базисний набір*; стор.226. Як показують розрахунки, за вибраними адитивними методами та їх порівняння з експериментально визначеними величинами, жоден з методів не забезпечує 100 % *відтворюваності* результатів. Незрозуміло, що автор має на увазі під 100% відтворюваністю, адже такої просто не можна досягнути при строгих вимогах до точності кожного вимірювання.

**Судацова Валентина Савелівна** – доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія, професор, провідний науковий співробітник відділу фізичної хімії неорганічних матеріалів Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, дала позитивний відгук із зауваженнями:

1. В дисертаційній роботі вперше досліджено термодинамічні властивості близько 40 органічних сполук різними методами, але в науковій новизні і в самій роботі приділено більше уваги розрахункам. Доцільно було більш широко провести аналіз експериментальних результатів, які, впершу

чергу, поповнять бази термодинамічних даних будуть використовуватись як хіміками, так і науковцями суміжних галузей знань.

2. Енергія Гіббса утворення сполук, фаз систем є найбільш широко використовуваною термодинамічною функцією в фізичній хімії, напр., для визначення напрямку самочинного перебігу реакцій, як простих, так і складних. Тому бажано було оцінити не тільки енергію змішування Гіббса для розчинів, але й для досліджених речовин. Це значно розширило б межі застосування встановлених автором термодинамічних даних.

3. Узгодженість між обчисленими і експериментальними даними краще ілюструвати не у вигляді абсолютної різниці, а як відносну похибку у відсотках, що дозволяло б краще оцінити коректність виведених рівнянь і використовуваних моделей.

4. В дисертаційній роботі (стор. 255) відмічається, що при вивченні розчинів визначали диференційні ентальпії і ентропії розчинення, Але у формулах їх записано як інтегральні ентальпії і ентропії розчинення або змішування (без ризику зверху).

5. На рис. 3.8 (стор. 136) наведено дериватограми двох речовин, які після плавлення на повітрі розкладаються. По ТГ-кривих можна було ще встановити, які речовини при цьому утворюються. Крім того, можна було провести декілька дослідів в атмосфері інертного газу і встановити відмінності і подібності в ДТА- і ТГ-кривих в обох випадках.

6. В дисертаційній роботі не обґрунтовано, чому швидкість нагрівання речовин при дериватографічних дослідженнях сполук постійна і рівна 2.5 К/хв.

7. В назві розділу 4 “Аналіз і теоретичний розрахунок.....” розрахунки виконували за напівемпіричними рівняннями і моделями, тому не доцільно в цих випадках вживати “теоретичний розрахунок.....”.

8. В дисертаційній роботі замість “молярна маса” речовин, ”ентальпії і ентропії змішування” (стор. 276) вживається “молекулярна”, ”зміна ентальпії і ентропії змішування”, що є не загальноприйнятим;; в тексті

пишеться “рисунок”, “таблиця” повністю, а потрібно скорочено; замість “негативний заряд” потрібно вживати “від’ємний заряд” (стор. 263), замість “початкових речовин” точніше “вихідних речовин” (стор. 263, 264), тощо. На стор.282, 286 замість  $X_2$  вжито  $N_2$ .

### **На дисертацію та автореферат надійшли відгуки:**

1. *Відгук на автореферат за підписом старшого наукового співробітника Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАНУ д.х.н., с.н.с. Горбачука М.П.*

Відгук позитивний, без зауважень.

2. *Відгук на автореферат за підписом завідувача кафедри фармакології Львівського національного медичного університету ім. Данила Галицького, д.мед.н., проф. Піняжка О.Р.*

Відгук позитивний з такими зауваженнями:

1. Чому було вибрано даний ряд розчинників.

2. Незрозуміло з яких причин автор не наводить термодинамічні параметри розчинення та змішування досліджених речовин у 2-пропанолі, ацетоні, ацетонітрилі, бензолі а представляє їх лише у етилацетаті, табл. 14.

3. *Відгук на автореферат за підписом проректора з наукової роботи, керування розвитком і міжнародних зв'язків Донбаської державної машинобудівної академії, д.х.н., проф. Турчаніна М.А. та завідувача кафедри хімії та ОП Донбаської державної машинобудівної академії, д.х.н., проф. Авдєєнко А.П.*

Відгук позитивний з такими зауваженнями:

1. Для досліджень було обрано 45 сполук, але величини ентальпій утворення у конденсованому стані визначені для 39 речовин; тиск насиченої пари поміряно ефузійним методом Кнудсена для 33 речовин; ентальпій утворення у газоподібному стані розраховані для 31 речовини і т.д. То

виникає питання які причини завадили визначити термодинамічні параметри для всіх обраних речовин.

2. Чому для порівняння експериментально визначених величин ентальпій утворення у газоподібному стані з розрахованими Ви обрали методи Бенсона та Джобака? Який з них є більш ефективним?

4. *Відгук на автореферат за підписом завідувача кафедри фармації та технології органічних речовин Державного вищого навчального закладу «Український державний хіміко-технологічний університет», д.х.н., проф. Харченко О.В.*

Відгук позитивний з таким зауваженням:

1. Чи було досліджено термодинамічні властивості розчинів обраних для досліджень похідних 1,2,3,4-тетрагідропіримідинів? Якщо ні, то чому?

5. *Відгук на автореферат за підписом завідувача відділенням фізичної хімії розчинів при Харківському національному університеті імені В.Н. Каразіна, д.х.н., проф. Шаповалова С.А.*

Відгук позитивний з зауваженнями:

1. У тексті автореферату не зайвим було би наголосити, що результати кандидатського дослідження («Модифікація акрилових полімерів малеїновою кислотою та дибутилмалеїнатом: дис. канд. хім. наук: 02.00.06 — хімія високомолекулярних сполук / Собечко Ірина Борисівна; Національний ун-т «Львівська політехніка». — Львів, 2007 – [*Electronic Encyclopedia of Lviv Polytechnic*]) не запозичені здобувачем до тексту докторської дисертації, оскільки вони, принаймні, мають інший фаховий напрям, а всі публікації в авторефераті датовані з 2011 року.

2. Узагальнення і опублікування «термодинамічних характеристик індивідуальних сполук», с. 3, у вигляді одноосібного «довідникового джерела» (монографії) дало би змогу вагомніше сприймати практичне значення отриманих здобувачем результатів.

3. Текстова редакція висновків деінде має декларативний характер (1, 4, 7). Наприклад, висновок 1 зв'язує «фундаментальне експериментальне та розрахункове дослідження термодинамічних властивостей похідних фуранів, арилфуранів та 1,2,3,4-тетрагідропіримідинів» з «широким спектром біологічної активності досліджених сполук». Проте мета і завдання дослідження (с. 1, 2) аж ніяк не передбачали визначення біологічної активності. До того ж відомостей щодо практичного використання будь-яким чином отриманих результатів стосовно корисності біологічної активності в авторефераті не міститься.

4. У висновку 4 проголошується «новий спосіб перерахунку ентальпій сублімації...». Проте залишається не зрозумілим, в яких саме наукових працях він оприлюднений здобувачем, оскільки стосовно особистого внеску саме про цей спосіб мова не йдеться в жодній публікації (с. 28–35).

5. У дослідженні використані напівемпіричні (квантовохімічні?) методи для розрахунку термодинамічних властивостей індивідуальних сполук. На жаль, з тексту автореферату не є можливим оцінити узгодженість практичних і теоретичних результатів, оскільки не вказується, у вигляді яких програмних продуктів ці методи використовувалися. Останнє уявляється принциповим, оскільки різні методи мають різні властивості стосовно похибок обчислень термодинамічних величин органічних речовин (наприклад, J.J.P. Stewart, Stewart Computational Chemistry MOPAC2012, Colorado Springs, CO, USA. <http://www.openmopac.net/MOPAC2012brochure.pdf>), особливо у розчинниках.

6. Здобувачка запропонувала декілька рівнянь аналітичного розрахунку (перелік на с. 3), а також «новий метод розрахунку зміни теплоємності», «метод визначення ентальпій плавлення органічних речовин», «новий метод перерахунку ентропій та ентальпій плавлення» (висновок 3). Новизну теоретичних і практичних наукових результатів доцільно розглядати з позиції наявності свідоцтв інтелектуальної власності. Звісно, методи розрахунків не патентуються, проте вони можуть бути предметом авторського права і підлягають державній реєстрації. З огляду на те, що

«тема дисертації відповідає одному з наукових напрямів кафедри фізичної, аналітичної та загальної хімії “Визначення термодинамічних характеристик нових речовин та кінетичних параметрів процесів”» (с. 1) Національного університету «Львівська політехніка», а в арсеналі здобувача виявилася ціла низка нових пропозицій, було би доцільно скористатися цією нагодою, а саме викласти ці методи як службові твори і одержати від Укрпатента відповідні Свідоцтва про держреєстрацію авторського права.

7. Подекуди зустрічаються невдалі висловлення, орфографічні та друкарські помилки, наприклад: «групи володіють надлишковим негативним зарядом», с.25 – краще «групи мають надлишковий від’ємний заряд», «... за точністю є співмірний з відомим методом...», с. 27 – краще «за точністю не поступається відомому методу», – «гетероатомом *оксисену*», с.1, «Тут *вартує* зазначити...», с. 19, «*написанно* статтю», с. 29, «..широким спектром *фармакофорные* свойств...», «...температурные зависимости давлений *насыщенной пары*..», с. 37.

*6. Відгук на автореферат за підписом д.н. (технічних) Фішеха Тесфайя, старшого наукового співробітника, доцента (ад’юнкт-професора) з металургійної термодинаміки. Лабораторії молекулярних наук та інженерії, науково-технічного факультету. Академії Або – Університету в Турку Фінляндія*

Відгук позитивний без зауважень.

*7. Відгук на автореферат за підписом завідувача кафедри фізичної хімії Білоруського державного університету, д.х.н., проф. Блохіна А.В.*

Відгук позитивний з зауваженнями:

1. Незрозуміло, яким чином були отримані зміни теплоємності при плавленні речовин, використані в рівняннях (3), (4) та (5).

2. Незрозуміло, чи були розраховані надлишкові термодинамічні параметри досліджених розчинів та проведена їх фізична інтерпретація чи аналіз в залежності від структури досліджених сполук.

**У дискусії взяли участь члени спеціалізованої вченої ради:**

1. Д.х.н., проф. **Решетняк О.В.** доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія; без зауважень.

2. Д.х.н., проф. **Обушак М.Д.** доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія; без зауважень.

3. Д.х.н., доц. **Макота О.І.** доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія; без зауважень.

4. Д.х.н., проф. **Яремко З.М.** доктор хімічних наук за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія; зауваження:

Маю таке невелике зауваження що до висновків. Висновки є дещо загальні, їх було би добре подати більш конкретно. Зокрема, у запитанні яке я задавав (пункт 9-ий висновку) висновок подано дуже загально, його вартувало би подати більш детально.

При проведенні таємного голосування виявилось, що із 13 членів спеціалізованої вченої ради, які взяли участь у голосуванні (з них 6 докторів наук за профілем дисертації), проголосували:

«За» – 13 членів ради,

«Проти» – немає,

Недійсних бюлетенів – немає.

### **ВИСНОВОК**

спеціалізованої вченої ради Д 35.051.10 Львівського національного університету імені Івана Франка про дисертаційну роботу Собечко Ірини Борисівни «Термодинамічні властивості оксигено- та нітрогеновмісних гетероциклічних сполук та їх розчинів», подану до захисту на здобуття наукового ступеня доктора хімічних наук за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія.

Дисертаційна робота Собечко І.Б. присвячена експериментальному дослідженню термодинамічних властивостей похідних фуранів, арилфуранів та

1,2,3,4-тетрагідропіримідинів та їх розчинів у низці органічних розчинників, встановленню закономірностей термодинамічних властивостей досліджених індивідуальних речовин та їх розчинів, оцінці енергій міжмолекулярних та внутрішньомолекулярних взаємодій.

Термодинамічний аналіз дає можливість обрати оптимальні шляхи промислового синтезу та очистки речовин і відіграє важливу роль при дослідженні реакційної здатності сполук, встановленні теплових ефектів та механізму перебігу процесів. Особливе значення експериментально одержані термодинамічні величини мають як критерії надійності квантово-хімічних і адитивних методів розрахунку характеристик молекул досліджених речовин.

Роботу виконано на кафедрі фізичної, аналітичної та загальної хімії Інституту хімії та хімічних технологій Національного університету «Львівська політехніка». Тематика досліджень пов'язана з науковим напрямом кафедри «Визначення термодинамічних характеристик нових речовин та кінетичних параметрів процесів».

### **Основні наукові результати, які здобувач одержав особисто:**

1. Покладено початок фундаментального експериментального та розрахункового дослідження термодинамічних властивостей похідних фуранів, арилфуранів та 1,2,3,4-тетрагідропіримідинів, необхідних для оптимізації процесів їх одержання, очищення та застосування, що пов'язано з широким спектром біологічної активності досліджених сполук.

2. Для фуранів, арилфуранів, 1,2,3,4-тетрагідропіримідинів та їх розчинів вперше: методом бомбової калориметрії визначено ентальпії згорання та утворення 39 речовин у конденсованому стані; ефузійним методом Кнудсена визначено температурну залежність тиску насиченої пари над 33 речовинами у твердому агрегатному стані та 3 речовинами – у рідкому агрегатному стані; диференційно-термічним та термогравіметричним методом аналізу досліджено 36 речовин; визначено їх температури плавлення, ентальпії випаровування та плавлення; гравіметричним методом визначено температурні залежності

розчинності та розраховано термодинамічні властивості 30 сполук в органічних розчинниках.

Запропоновано нові методи:

- розрахунку зміни теплоємності в процесах сублімації та випаровування, який значно простіший у застосуванні, але за точністю є спів-мірний з відомим методом Чікоса та Акрі;

- визначення ентальпій плавлення органічних речовин за усередненими значеннями питомих ентропій плавлення;

- перерахунку ентропій та ентальпій плавлення від температури плавлення речовин до необхідної.

Поповнено адитивні методи Бенсона та Лебедева-Мірошніченка набором з 18-и групових внесків, кожна та проведено розрахунок термодинамічних властивостей сполук за напівемпіричними розрахунковими схемами, здійснено їх порівняння з експериментальними значеннями та проаналізовано отримані розбіжності.

Показано можливість застосування методу заміни структурних фрагментів речовини для розрахунку ентальпій утворення речовин у конденсованому стані. Надійність застосованого методу підтверджено порівнянням розрахованих значень з експериментально визначеними.

Оцінено значення суми енергій напруження, циклізації та внутрішньо- і міжмолекулярних взаємодій порівнянням ентальпій утворення досліджених речовин у газоподібному стані з ентальпіями утворення гіпотетичних алканів, аналогічних за молекулярною масою до досліджених речовин.

Визначено ентальпії та ентропії розчинення та змішування сполук у вибраному ряду органічних розчинників. Проаналізовано вплив компонентів на термодинамічні величини змішування, показано присутність компенсаційного ефекту. Встановлено залежність розчинності від температури плавлення досліджених речовин. Показано можливість її застосування для аналітичного розрахунку розчинності органічних речовин у представленому ряді розчинників за величинами температури плавлення.

### **Оцінка достовірності і новизни результатів дисертаційної роботи:**

Отримані у роботі результати характеризуються доброю відтворюваністю та є взаємодоповнюючими. Експериментально визначені величини, що наведені у дисертаційній роботі, отримані із використанням сучасного обладнання за широко апробованими фізико-хімічними методами дослідження. Достовірність експериментальних досліджень базується на кваліфікованому використанні сучасного обладнання. Значну кількість результатів одержано та підтверджено різними фізико-хімічними методами (ефузійний – Кнудсена, диференційно-термічний та термогравіметричний). У роботі використано:

для підтвердження будови досліджених речовин – метод ядерної магнітно-резонансної спектроскопії з використанням спектрофотометру Varian 600;

для визначення чистоти досліджуваних речовин – метод рідинної хроматографії з використанням приладу Agilent 1100 HPLC;

для визначення енергій згорання речовин - модернізований калориметр спалювання В-08-МА;

для дослідження температурної залежності тиску насиченої пари – експериментальну ефузійну установку Кнудсена;

для дослідження ентальпій плавлення та випаровування – термогравіметричний та диференційно-термічний методи аналізу які проведені з використанням дериватографа Q-1500D системи Paulic-Paulic-Erdau.

Опрацювання даних проведено за допомогою сучасного комп'ютерного програмного забезпечення, що забезпечує їхню достовірність та надійність. Сформульовані у дисертації висновки, зроблені на основі цих результатів, є логічними та науково обґрунтованими. Достовірність отриманих результатів не викликає сумнівів. Основні положення дисертації опубліковано в 40 статтях у наукових фахових вітчизняних та зарубіжних виданнях, 13 з яких індексуються у наукометричній базі даних Scopus, тезах 20 доповідей на міжнародних та українських наукових конференціях.

За результатами перевірки тексту дисертаційної роботи програмою UNICHEK фірми ТОВ «Антиплагіат», встановлено, що текст дисертації має

12,9 % співпадіння з інтернет-ресурсами. На підставі перевірки запозичень, використання ідей, наукових результатів і матеріалів інших авторів без належного посилання на першоджерело не виявлено.

Матеріали кандидатської дисертації «Модифікація акрилових полімерів малеїновою кислотою та дибутилмалеїнатом» у дисертаційній роботі не використовувалися.

**Теоретичне та практичне значення роботи та рекомендації щодо використання:**

Результати проведених досліджень розширяють фундаментальні знання про термодинамічні властивості похідних фуранів, арилфуранів та 1,2,3,4-тетрагідропіримідинів та доповняють довідникові джерела термодинамічних властивостей індивідуальних речовин та розчинів.

Визначені величини термодинамічних характеристик сприятимуть оптимізації процесів синтезу, очистки, переробки, зберіганню та утилізації речовин дослідженого класу.

Запропоновані рівняння дадуть змогу визначати необхідні термодинамічні властивості без застосування складних схем розрахунків.

Результати дисертації використано в навчальному процесі кафедри фізичної, аналітичної та загальної хімії Національного університету «Львівська політехніка» в лекційному матеріалі, лабораторних та практичних заняттях з дисциплін «Фізична хімія» та «Хімічна термодинаміка» для студентів спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» та аспірантів спеціальності «102 – Хімія» ІХХТ.

Дисертаційна робота Собечко Ірини Борисівни на тему «Термодинамічні властивості оксигено- та нітрогеновмісних гетероциклічних сполук та їх розчинів» є завершеною науковою працею, в якій отримано нові науково-обґрунтовані результати, які розвивають науковий напрям термодинамічних властивостей оксигено- та нітрогеновмісних гетероциклічних сполук та їх розчинів.

Робота відповідає паспорту спеціальності 02.00.04 – фізична хімія.

За науковим рівнем, актуальністю, новизною одержаних результатів та їх інтерпретацією, практичною значимістю та ґрунтовністю висновків дисертаційна робота Собечко І.Б. «Термодинамічні властивості оксигено- та нітрогеновмісних гетероциклічних сполук та їх розчинів» відповідає п. 9, 10, 12 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 року, зі змінами № 656 від 19.08.2015, № 1159 від 30.12.2015, № 567 від 27.07.2016, № 943 від 20.11.2019, № 607 від 15.07.2020 року, а також вимогам Міністерства освіти та науки України що ставляться до докторських дисертацій, а її автор, Собечко Ірина Борисівна, заслуговує присудження наукового ступеня доктора хімічних наук за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія.

На підставі результатів таємного голосування та прийнятого висновку спеціалізована вчена рада Д 35.051.10 Львівського національного університету імені Івана Франка присуджує Собечко Ірині Борисівні науковий ступінь доктора хімічних наук за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія.

Головуючий на засіданні

спеціалізованої вченої ради Д 35.051.10

професор, д.х.н.

Каличак Я. М.

Вчений секретар

спеціалізованої вченої ради Д 35.051.10

професор, д.х.н.

Яремко З. М.

М.П.

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2021 р.

Підписи проф. Каличака Я. М. та Яремка З. М. засвідчую

Вчений секретар ЛНУ ім. Івана Франка, доц.

Грабовецька О. С.

Атестаційна справа зареєстрована у МОН України під № \_\_\_\_\_

Затверджено рішення спеціалізованої вченої ради про присудження наукового ступеня доктора хімічних наук рішенням атестаційної колегії МОН України від «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2021 року.

Видано диплом \_\_\_\_\_

(серія, номер)

Начальник відділу

\_\_\_\_\_

(прізвище, ініціали)