

офіційного опонента Горбачука Миколи Петровича на дисертаційну роботу **Клачко Олени Ростиславівни «Термодинамічні властивості естерів 6-метил-2-оксо-4-арил-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбонової кислоти та їх розчинів в органічних розчинниках»**, що подана на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 102 - Хімія.

1. Актуальність теми дисертації

Дослідження біологічно активних речовин, які мають перспективу застосування у фармацевтичній промисловості завжди було і є актуальним завданням для дослідників. Похідні тетрагідропіримідинового ряду на сьогоднішній день мають широке застосування у фармацевтичній промисловості, що пов'язано тим, що дані речовини є біологічноактивними і мають широкий спектр дії на організм людини.

Однак попри всю важливість даного класу сполук їх термодинамічні властивості вивчені недостатньо. В літературі відсутні надійні термодинамічні характеристики, як для індивідуальних похідних дигідропіримідинів, так і для їх розчинів. Саме тому необхідність визначення термодинамічних характеристик похідних дигідропіримідинів є важливим завданням термодинаміки. Актуальність проведених досліджень обумовлюється як з теоретичної точки зору – пояснення особливостей та специфіки структурної будови, природи міжмолекулярних та внутрішньомолекулярних зв'язків, так і з практичної – розробка нових методик, які б спрощували та удосконалювали процеси синтезу та очистки тетрагідропіримідинів, цілеспрямований синтез із наперед заданими характеристиками.

2. Зв'язок роботи із державними науковими програмами, планами, темами.

Дисертаційна робота виконувалася на кафедрі фізичної аналітичної та загальної хімії, Інституту хімії та хімічних технологій Національного

університету «Львівська політехніка» і тема дисертаційного дослідження відповідає науковому напрямку кафедри фізичної аналітичної та загальної хімії «Визначення термодинамічних характеристик нових речовин та кінетичних параметрів процесів».

3. Наукове і практичне значення отриманих результатів

Термодинамічні властивості індивідуальних речовин та їх розчинів є основними складовими параметрами для розробки, оптимізації та передбачення технологічних процесів, що пов'язані з фазовими або хімічними перетвореннями. Аналіз та дослідження термодинамічних властивостей відіграє важливу роль у пошуку та виборі оптимальних умов синтезу та очистки даного класу сполук у промислових масштабах.

На основі проведеного аналізу доведена можливість використання адитивних схем для розрахунку ентальпії утворення даного класу сполук.

Одержані значення термодинамічних величин дають можливість оптимізувати процеси практичного одержання дослідженого ряду сполук (стандартна ентальпія утворення та згорання, ентальпія випаровування), а також для процесів їх розділення та очистки (розчинність в органічних розчинниках).

4. Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків і рекомендацій, їх достовірність і новизна

Достовірність наукових положень і результатів забезпечена застосуванням сучасних хімічних та фізико-хімічних методів досліджень, проведення ряду дослідів з еталонними речовинами, точністю вимірювання та великим обсягом експериментальних даних

В результаті проведених експериментальних і аналітичних досліджень автором вперше одержані наступні термодинамічні параметри: ентальпії згорання, ентальпії утворення в конденсованому стані, ентальпії випаровування та сублімації, ентальпії розчинення, температурні залежності розчинності для

семи представників класу естерів 6 метил-2-оксо-4-арил-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбонової кислоти.

Висновки зроблені автором показують зв'язав між будовою досліджених речовин і їх термодинамічними властивостями, та вплив властивостей досліджених речовин на параметри утворення розчинів. Ці висновки дають змогу не тільки зрозуміти взаємозв'язок між зазначеними параметрами, але і прогнозувати їх в майбутньому.

5. Повнота викладу наукових положень дисертації в опублікованих працях

За матеріалами дисертації опубліковано 15 друкованих наукових праць, з яких 4 у наукових фахових виданнях України, 4 статті у наукових виданнях України, які включені до міжнародних наукометричних баз даних (Scopus, Web of Science та Index Copernicus). Результати та основні положення дисертаційної роботи доповідались та обговорювались на 7 українських та міжнародних наукових, науково-практичних конференціях:

Опубліковані матеріали повністю відображають зміст дисертації та відповідають вимогам пункту 11 Порядку проведення експерименту з присудження ступеня доктора філософії, Затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 6 березня 2019 р. № 167.

Дисертаційна робота складається із вступу, 5 розділів, висновків, списку використаних джерел літератури та 5 додатків; містить 44 таблиці та 26 рисунків. Загальний обсяг дисертації – 178 сторінки; обсяг, який займають ілюстрації, таблиці, список джерел використаної літератури та додатки, становить 93 сторінки.

Основний зміст дисертації викладено послідовно - від аналізу відомих з огляду літератури відомостей про об'єкт та предмет дослідження, через обґрунтування вибору методів дослідження, експериментальне визначення термодинамічних властивостей індивідуальних речовин та їх розчинів, до аналізу впливу будови речовин на визначені параметри та формулювання висновків.

Анотація висвітлює основний зміст дисертації та у повному обсязі розкриває наукові результати та практичну цінність дисертаційної роботи.

Дисертація є завершеною працею, яка містить нові актуальні наукові результати.

Академічна доброчесність

Порушень академічної доброчесності в дисертації та наукових публікаціях, у яких висвітлені основні наукові результати дисертації, не виявлено.

6. Зауваження

До дисертаційної роботи є наступні зауваження:

1. Для підтвердження лінійної залежності розчинності від температури автор використовує коефіцієнт кореляції який є фактично оціночною величиною, в даному випадку краще використовувати дисперсію адекватності, оскільки вона дає більше інформації і показує середнє відхилення експериментальних точок від отриманої лінійної залежності.

2. Для підтвердження будови речовин в більшості випадків недостатньо одного методу. Тому для підтвердження структури речовин окрім ЯМР бажано було би використати ще який не будь метод, що підтверджує будову речовин.

3. В роботі не вказано який саме метод розрахунку було використано при проведенні хроматографічного аналізу. При цьому автор стверджує, що чистота досліджених речовин 99,9%, за даними хроматографічного аналізу.

4. Досить часто в тексті роботи автор вживає термін теплота розчинення, хоча насправді йдеться про диференційну теплоту розчинення.

5. Інколи в тексті дисертації автор одну і ту ж саму сполуку називає по різному наприклад бензол – бензин, ацетон – пропанон-2, бажано дотримуватися номенклатури IUPAC.

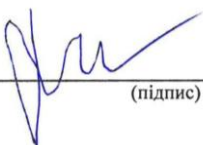
7. Оцінка дисертації

Дисертаційна робота Клячко Олени Ростиславівни «Термодинамічні властивості естерів 6-метил-2-оксо-4-арил-1,2,3,4-тетрагідропіримідин-5-карбонової кислоти та їх розчинів в органічних розчинниках», за своїм

змістом відповідає спеціальності 102 - «Хімія». Дисертація є завершеним науковим дослідженням, а зроблені зауваження не впливають на загальну позитивну оцінку дисертаційної роботи.

З урахуванням вищезазначеного вважаю, що за змістом, рівнем виконання і новизною одержаних результатів дисертаційна робота відповідає пунктам 10, 11, 12 Порядку проведення експерименту з присудження ступеня доктора філософії, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України № 167 від 6 березня 2019 року, а здобувач Клячко Олена Ростиславівна заслуговує присудження наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 102 - «Хімія».

Офіційний опонент
провідний науковий співробітник
Інституту проблем матеріалознавства
ім. І.М. Францевича НАНУ,
доктор хімічних наук, с.н.с.


(підпис)

Горбачук М. П.

Підпис Горбачука М.П. засвідчую



З. Сирів' С.В. Зуборешко