Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U003857

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-07-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тімохін Олексій Сергійович

2. Oleksiy S. Timokhin

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

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: ОП 20766 Біоорганічна хімія; нафтохімія і вуглехімія / освітньо-наукова програма (102 Хімія)

Дата захисту: 17-09-2026

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 16629

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.23.39

Тема дисертації:

1. Ензиматичне кінетичне розділення в синтезі енантіозбагачених 2-заміщених хроман-4-олів

2. Enzymatic kinetic resolution in the synthesis of enantioenriched 2-substituted chroman-4-ols

Реферат/анотація:

1. 2-Заміщені хроман-4-оли, включаючи їхні алкільні, гетарильні та флуороалкільні похідні, а також відповідні вихідні та проміжні субстрати – хромони, хроман-4-они, хроман-4-оли та відповідні ацетати. Розробка універсальної хемоензиматичної методології синтезу енантіозбагачених 2-заміщених хроман-4-олів та їх функціоналізованих похідних на основі ензиматичного кінетичного розділення, а також комплексне дослідження їх спектральних особливостей, фізико-хімічних параметрів та визначення біологічного потенціалу. Органічний синтез, біокаталіз, спектроскопія ЯМР, двомірна спектроскопія ЯМР, мас-спектрометрія високої роздільної здатності, високоефективна рідинна хроматографія на хіральних стаціонарних фазах, тонкошарова та колонкова хроматографія, методи біологічного скринінгу in vitro. Розроблено та впроваджено високоефективні хемоензиматичні методології синтезу енантіозбагачених хроман-4-олів, із різноманітними замісниками в 2-ому положенні. Запропоновані підходи забезпечують

одержання цільових сполук із винятковою оптичною чистотою та дозволяють масштабувати біокаталітичні процеси до мультиграмових кількостей. Створено бібліотеку нових енантіозбагачених будівельних блоків. Експериментально доведено можливість раціонального керування ADME-профілем сполук-лідерів шляхом введення флуороалкільних замісників. Ідентифіковано перспективну сполуку-лідер – 7-гідроксиспіро[хроман-2,1'-циклогексан]-4-он. Отримані результати дозволяють розглядати дану систему як стратегічну відправну точку для подальшої структурної оптимізації з метою створення на її основі антивірусних та протипухлинних препаратів нового покоління. Сфера використання – органічна і медична хімія

2. 2-Substituted chroman-4-ols, including their alkyl, hetaryl and fluoroalkyl derivatives, as well as the corresponding starting and intermediate substrates – chromones, chroman-4-ones, chroman-4-ols and the corresponding acetates. Development of a universal chemoenzymatic methodology for the synthesis of enantioenriched 2-substituted chroman-4-ols and their functionalized derivatives based on enzymatic kinetic resolution, as well as a comprehensive study of their spectral features, physicochemical parameters and determination of biological potential. Organic synthesis, biocatalysis, NMR spectroscopy, two-dimensional NMR spectroscopy, high-resolution mass spectrometry, high-performance liquid chromatography on chiral stationary phases, thin-layer and column chromatography, in vitro biological screening methods. Highly efficient chemoenzymatic methodologies for the synthesis of enantioenriched chroman-4-ols with various substituents in the 2nd position have been developed and implemented. The proposed approaches provide the production of target compounds with exceptional optical purity and allow scaling up biocatalytic processes to multigram quantities. A library of new enantioenriched building blocks has been created. The possibility of rational control of the ADME profile of lead compounds by introducing fluoroalkyl substituents has been experimentally proven. A promising lead compound, 7-hydroxyspiro[chroman-2,1'-cyclohexane]-4-one, has been identified. The results obtained allow us to consider this system as a strategic starting point for further structural optimization with the aim of creating new generation antiviral and antitumor drugs based on it. The scope of application is organic and medicinal chemistry

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: Освоєння нових технологій транспортування енергії, впровадження енергоефективних, ресурсозберігаючих технологій, освоєння альтернативних джерел енергії

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- 1. O.S. Timokhin, A.M. Romanova, V.S. Moskvina, O.V. Kucher, A.I. Boiko, A. L. Banasevych, D. Durylin, V.S. Brovarets, O.O. Grygorenko. Synthesis of enantioenriched 2-((Hetera) cyclo) alkylchromanols and their spirocyclic analogs through enzymatic resolution. Eur. J. Org. Chem. 2025, 28 (8), e202401247. https://doi.org/10.1002/ejoc.202401247
- 2. O.S. Timokhin, V.V. Hys, O.V. Kucher, A.V. Kozytskyi, R.V. Yizhak, V.S. Brovarets, O.O. Grygorenko, V.S. Moskvina. From flavones to flavanols: An enzymatic kinetic resolution approach to enantioenriched 2-(het)arylchroman-4-ols. Tetrahedron. 2026, 194, 135174. https://doi.org/10.1016/j.tet.2026.135174
- 3. O.S. Timokhin, A.S. Rashevskyi, O.V. Kucher, D. Lesyk, Y. Holota, P. Borysko, S.G. Pilyo, O.O. Grygorenko, V.S. Moskvina. Expanding the biocatalytic toolbox: PLE-catalyzed kinetic resolution and lipophilicity modulation of 2-fluoroalkyl chroman-4-ols. Journal of Fluorine Chemistry. 2026, 291, 110566.

https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2026.110566

- 1. O.S. Timokhin, V.S. Moskvina, O.V. Kucher, Kathy A. Keith, Emma A. Harden, Caroll B. Hartline, Scott H. James, and V.S. Brovarets. Chroman-4-One Scaffolds As a Platform for Anticancer and Antiviral Lead Discovery. Ukrainica Bioorganica Acta. 2025, 20 (1), 19-25. https://doi.org/10.15407/bioorganica2025.01.019

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0120U100309, 0125U000347

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пільо Степан Григорович

2. Stepan H. Pilo

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7089-1393

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Богза Сергій Леонідович

2. Serhii L. Bohza

Кваліфікація: д. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Хиля Ольга Володимирівна

2. Olha V. Khylia

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Герус Ігор Іванович

2. Igor I. Gerus

Кваліфікація: д. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-5086-9466

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Виджак Роман Миколайович

2. Roman M. Vydzhak

Кваліфікація: к. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Колодяжна Анастасія Олегівна
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Колодяжна Анастасія Олегівна
Відповідальний за підготовку облікових документів	Шутко М.М
Реєстратор	Юрченко Тетяна Анатоліївна
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна