

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

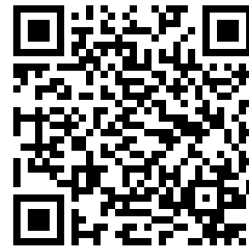
Державний обліковий номер: 0826U001154

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-04-2026

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сметюх Михайло Петрович

2. Mykhailo P. Smetiukh

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 162

Назва наукової спеціальності: Біотехнології та біоінженерія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Біотехнології

Дата захисту:

Спеціальність за освітою: Фармація

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):** PhD 13073

**Повне найменування юридичної особи:** Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

**Код за ЄДРПОУ:** 02070921

**Місцезнаходження:** проспект Берестейський, Київ, 03056, 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 технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

**Код за ЄДРПОУ:** 02070921

**Місцезнаходження:** проспект Берестейський, Київ, 03056, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:** Українська

**Коди тематичних рубрик:** 62

**Тема дисертації:**

1. Біотехнологічний алгоритм скринінгу речовин з активністю проти коронавірусів
2. Biotechnological algorithm for screening substances with activity against coronaviruses

**Реферат:**

1. Дисертація присвячена розробці біотехнологічного алгоритму для швидкої ідентифікації та раціонального відбору перспективних сполук із протикоронавірусною активністю в умовах безперервної еволюції SARS-CoV-2. Актуальність дослідження зумовлена появою нових варіантів вірусу з підвищеною трансмісивністю, частковим уникненням імунної відповіді та потенційною резистентністю до наявних противірусних препаратів, а також високою вартістю і тривалістю масштабного доклінічного скринінгу. Запропоновано інтегрований алгоритм скринінгу, що поєднує *in silico* моделювання, оцінку ADME-параметрів і *in vitro* дослідження цитотоксичності та противірусної активності з використанням клітинних систем. Такий підхід забезпечує систематичну ідентифікацію перспективних кандидатів і водночас підвищує ефективність використання ресурсів. Алгоритм інтегрує результати комп'ютерного прогнозування, фармакокінетичних оцінок і експериментальної валідації, що підвищує надійність відбору сполук і зменшує кількість кандидатів,

які потребують подальшого тестування. Отримані результати формують методологічну основу для підвищення ефективності доклінічних досліджень і полегшення переходу до клінічних випробувань. У роботі створено теоретично обґрунтований та експериментально підтверджений алгоритм скринінгу, що включає безпечну систему «клітина-вірус-сполука», молекулярне моделювання взаємодії сполук із мішенями, прогнозування ADME-параметрів, а також експериментальну оцінку цитотоксичності, протівірусної активності та індексів селективності. Розроблено підхід до пріоритизації кандидатів на основі сукупності критеріїв для підтримки прийняття рішень. Вперше запропоновано комплексний поетапний біотехнологічний алгоритм, що інтегрує молекулярний докінг, аналіз ADME, *in vitro* дослідження та елементи моделювання клінічної ефективності в єдину систему. Це забезпечує ранню елімінацію малоперспективних кандидатів і оптимізацію доклінічних процесів. Запропонована стратегія пріоритизації підвищує точність відбору шляхом поєднання показників афінності зв'язування, цитотоксичності та протівірусної активності, зменшуючи ризик хибної інтерпретації результатів. Експериментально підтверджена узгодженість між результатами *in silico* та *in vitro* свідчить про практичну придатність підходу та можливість його адаптації до нових варіантів вірусу і молекулярних мішеней. Практичне значення роботи полягає у впровадженні системи скринінгу та пріоритизації, яка дозволяє зменшити обсяг експериментальних досліджень, підвищити селективність відбору, оптимізувати використання ресурсів і забезпечити гнучкість скринінгових процедур. Результати впроваджено в наукову діяльність, лабораторну практику, освітній процес і промисловість, зокрема в медичних наукових установах, лабораторіях громадського здоров'я, освітніх програмах і біотехнологічних компаніях. У дисертації також розглянуто біологію коронавірусів, експериментальні методи, створення модельної вірусної системи, оцінку кандидатних сполук, інтеграцію експериментальних даних у моделі клінічної ефективності та розробку алгоритму прийняття рішень із використанням експертних оцінок і методів машинного навчання. Усі результати отримано автором самостійно, включаючи розробку дизайну дослідження, проведення експериментів, аналіз даних і створення алгоритму.

2. The dissertation is devoted to the development of a biotechnological algorithm for the rapid identification and rational selection of promising anti-coronavirus compounds under the continuous evolution of SARS-CoV-2. The relevance of the study is driven by the emergence of new viral variants with increased transmissibility, partial immune evasion, and potential resistance to existing antiviral drugs, as well as the high cost and duration of large-scale preclinical screening. An integrated screening algorithm is proposed, combining *in silico* modeling, ADME evaluation, and *in vitro* studies of cytotoxicity and antiviral activity using cell-based systems. This approach enables systematic identification of promising candidates while improving resource efficiency. The algorithm integrates computational predictions, pharmacokinetic assessments, and experimental validation, increasing the reliability of compound selection and reducing the number of candidates requiring further testing. The results provide a methodological basis for improving preclinical research efficiency and facilitating progression to clinical studies. The study resulted in a theoretically substantiated and experimentally validated screening algorithm, including a safe "cell-virus-compound" system, molecular modeling of compound-target interactions, ADME prediction, and experimental evaluation of cytotoxicity, antiviral activity, and selectivity indices. A criteria-based prioritization approach was developed to support decision-making. For the first time, a comprehensive stepwise biotechnological algorithm integrating molecular docking, ADME analysis, *in vitro* testing, and elements of clinical efficacy modeling into a unified system has been proposed. This enables early elimination of low-potential candidates and optimization of preclinical workflows. The proposed prioritization strategy improves selection accuracy by combining binding affinity, cytotoxicity, and antiviral activity, reducing the risk of misinterpretation. Experimental confirmation of consistency between *in silico* and *in vitro* results demonstrates the applicability of the approach and its adaptability to new viral variants and targets. The practical significance lies in implementing a screening and prioritization system that reduces experimental workload, improves selectivity, optimizes resource use, and enhances flexibility of screening procedures. The results have been implemented in research, laboratory practice, education, and industry, including medical research institutions, public health laboratories, academic programs, and biotechnology companies. The dissertation also covers coronavirus biology, experimental

methodologies, development of a model viral system, evaluation of candidate compounds, integration of experimental data into clinical modeling, and creation of a decision-making algorithm using expert assessment and machine learning. All results were obtained independently by the author, including study design, experimental work, data analysis, and algorithm development.

### **Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:** Науки про життя, нові технології профілактики та лікування найпоширеніших захворювань

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:** Впровадження нових технологій та обладнання для якісного медичного обслуговування, лікування, фармацевтики

**Підсумки дослідження:** Нове вирішення актуального наукового завдання

### **Публікації:**

- Smetiukh M.P., Semenyuta I.V., Trokhimenko O.P., Dziublyk I.V., Soloviov S.O., Trokhymchuk V.V., Bororova O.L., Hodyna D.M., Yakovenko O.K., Metelytsia L.O.. Decamethoxin virucidal activity: in vitro and in silico studies // Ukrainian Biochemical Journal. – 2022. – Т. 94, № 3. – С. 81–91. – DOI:10.15407/ubj94.03.08.
- Smetiukh M. P., Dziublyk I. V., Trokhimenko O. P., Dziublyk O. Y., Yakovenko S. O., Soloviov K., Gumeniuk M. I.. In vitro study of the spectrum antiviral activity of aliphatic acid toward the prototype coronavirus strain // Biomedical and Biotechnology Research Journal (BBRJ). – 2023. – Т. 7, № 2. – С. 218. – DOI:10.4103/bbrj.bbrj36\_23.
- Yakovenko O., Soloviov S., Smetiukh M., Khanin O., Khodosh E., Dziublyk Y., Surtaieva N. Development and Approval of a Multidimensional Model of the Clinical Effectiveness of Treatment Technologies for Patients With a Mild COVID-19 Associated With Comorbidities // Innovative Biosystems and Bioengineering. – 2024. – Vol. 8, № 1. – P. 19–36. – DOI: 10.20535/ibb.2024.8.1.299055.
- Smetiukh M. P., Trokhimenko O. P., Soloviov S. O., Dziublyk I. V., Kamatskyi O. A., Savchuk I. V., Bobyr N. A. Biotechnological system for the search of substances with potential activity against coronavirus // Biotechnologia Acta. – 2024. – Vol. 17, № 6. – P. 45–52. – DOI: 10.15407/biotech17.06.045.
- Smetiukh M., Momot A., Trokhimenko O., Soloviov S., Datsenko I., Yakovenko O., Kozyr O. Comparative Assessment of Cytotoxicity of Aliphatic Amino Carboxylic Compounds as Potential Anticoronavirus Agents // Innovative Biosystems and Bioengineering. – 2025. – Vol. 9, № 4. – P. 28–45. – DOI: 10.20535/ibb.2025.9.4.347453.
- Smetiukh M., Dziublyk I., Soloviov S., Trokhimenko O., Vasylenko V., Sidorenko M., Mickevičius S. Theoretical and experimental evaluation of the antiviral activity of organic acids spectrum against infectious bronchitis virus // Youth and modern problems of microbiology and virology : IV Young Scientists Conference, Kyiv, Ukraine, 2022. – Kyiv, 2022
- Сметюх М. П., Соловійов С. О., Василенко В., Сидоренко М., Міцкевічюс С., Трохименко О. П. Комп'ютерне моделювання комплексу метил-6-(карбамотіоіламіно)гексаноат з основною протеазою коронавірусу // Біотехнологія XXI століття : матеріали міжнародної науково-практичної конференції, 19 травня 2023 р., Київ. – Київ, 2023.
- Сметюх М. П., Тавров Д. Ю., Цуркановський С. О. Автоматизована система аналізу кількісних характеристик мікроскопічних зображень клітин, отриманих при проведенні вірусологічних досліджень. // Шістнадцята конференція магістрантів та аспірантів, 28-30 листопада 2023 р., Київ, Україна. – Київ, 2023. – С. 135-140.
- Сметюх М.П., Соловійов С.О., Трохименко О.П. Аналіз цитотоксичності декаметоксину в клітинній лінії ПТП. // IV Міжнародна науково-практична інтернет-конференція «Проблеми та досягнення сучасної біотехнології», 2024.

- Сметюх М.П., Момот А.С., Соловійов С.О., Трохименко О.П. Цифрова обробка зображень у дослідженні цитотоксичності п-аміномасляної кислоти. // I Міжнародна науково-практична online конференція «Сучасні досягнення експериментальної, клінічної, екологічної біохімії та молекулярної біології», 07 березня 2024 р.
- Сметюх М.П., Соловійов С.О., Трохименко О.П. Оцінка цитотоксичності декаметоксину на клітинну лінію НЕР-2. // XVIII Міжнародна науково-практична конференція «Біотехнологія XXI століття», 17 травня 2024, Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024, 331 с.
- Сметюх М. П., Момот А. С., Соловійов С. О., Трохименко О. П. Автоматизована сегментація зображень для визначення чисельності клітин. // XXIII Міжнародна науково-технічна конференція “Приладобудування: стан і перспективи”, 14 – 15 травня 2024 р., Київ, Україна.
- Сметюх М. П., Соловійов С. О., Момот А. С., Трохименко О. П. Вивчення цитотоксичної дії метил-6-аміногексаноат гідрохлориду // Біотехнологія XXI століття: матеріали XIX Міжнародної науково-практичної конференції студентів, аспірантів і молодих вчених (Київ, 16 травня 2025 р.). – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2025. С. 177-180.
- Сметюх М. П., Момот А. С., Соловійов С. О., Трохименко О. П. Оцінка впливу фарбування клітин на результати автоматизованої обробки зображень // Приладобудування: стан і перспективи: матеріали XXIV Міжнародної науково-технічної конференції (Київ, 13-14 травня 2025 р.). – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2025. – С. 223-226.
- Сметюх М. П., Соловійов С. О., Трохименко О. П. Аналіз динаміки інфекційної активності коронавірусу IBV // Проблеми та досягнення сучасної біотехнології: матеріали V Міжнародної науково-практичної конференції (Харків, 28 березня 2025 р.). – Харків, 2025. – С. 358-360.
- Smetiukh, M., Horodetskyi, D., & Soloviov, S. (2025). Decision making in anti-coronavirus drug discovery: mathematical modeling and value of information analysis. Kpi Science News, 141(4).

**Наукова (науково-технічна) продукція:** методичні документи

**Соціально-економічна спрямованість:** поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

**Охоронні документи на ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:** Впроваджено

**Зв'язок з науковими темами:** 0123U100390

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Соловійов Сергій Олександрович
2. Serhii Soloviov

**Кваліфікація:** д. фармац. н., професор, 15.00.01

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0003-2681-7417

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Національний університет охорони здоров'я України імені П. Л. Шупика

**Код за ЄДРПОУ:** 01896702

**Місцезнаходження:** вул. Дорогожицька, Київ, 04112, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство охорони здоров'я України

**Ідентифікатор ROR:**

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

### **Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Кириченко Олександр Васильович
2. Oleksandr Kyrychenko

**Кваліфікація:** д. х. н., старший науковий співробітник, 02.00.04

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-6223-0990

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

**Код за ЄДРПОУ:** 02071205

**Місцезнаходження:** майдан Свободи, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Шматенко Олександр Петрович
2. Oleksandr Shmatenko

**Кваліфікація:** д. фармац. н., професор, 15.00.01

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-9015-8957

**Додаткова інформація:** Scopus Author ID: 57218884493

**Повне найменування юридичної особи:** Українська військово-медична академія

**Код за ЄДРПОУ:** 22998499

**Місцезнаходження:** вул. Князів Острозьких, Київ, 03049, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство оборони України

**Ідентифікатор ROR:**

### **Рецензенти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Галкін Олександр Юрійович

2. Oleksandr Y. Halkin

**Кваліфікація:** д. б. н., професор, 03.00.20

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-5309-6099

**Додаткова інформація:** Scopus ID: 57194474663

**Повне найменування юридичної особи:** Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

**Код за ЄДРПОУ:** 02070921

**Місцезнаходження:** проспект Берестейський, Київ, 03056, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Голембіовська Олена Ігорівна

2. Olena I. Golembiovska

**Кваліфікація:** к. фармацев. н., доц., 15.00.02

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0001-5531-5374

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

**Код за ЄДРПОУ:** 02070921

**Місцезнаходження:** проспект Берестейський, Київ, 03056, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Тодосійчук Тетяна Сергіївна

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Тодосійчук Тетяна Сергіївна

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

Сметюх Михайло Петрович

**Реєстратор**

Юрченко Тетяна Анатоліївна

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна