

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U003718

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-07-2026

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: №63 від 29.09.2026



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Войціцький Тарас Васильович

2. Taras Voitsitskyi

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3127-3688

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Фізика конденсованого стану, оптика і лазерна фізика, нано- та біофізика

Дата захисту: 09-09-2026

Спеціальність за освітою: Біологія

Місце роботи здобувача: Інститут фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03680, 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 16531

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03680, 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 фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03680, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 28.23.25, 29.29.25, 31.21.15, 34.17.15

Тема дисертації:

1. Визначення параметрів нековалентних взаємодій малих органічних молекул із протеїнами на основі моделей машинного навчання

2. Determination of noncovalent interaction parameters for small organic molecule-protein systems using machine learning models

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці та оптимізації методів машинного навчання для передбачення кількісних характеристик біологічної активності та структурних параметрів молекулярних комплексів протеїн-мала органічна молекула. Дослідження спрямоване на розв'язання актуальної науково-прикладної проблеми підвищення точності та швидкості обчислювального моделювання нековалентних взаємодій у біологічних системах, що має фундаментальне значення для фізики біологічних систем та практичне застосування у процесі розробки нових лікарських засобів.

2. The dissertation is devoted to the development and optimization of machine learning methods for predicting quantitative characteristics of biological activity and structural parameters of protein-small organic molecule complexes. The study aims to address the relevant scientific and applied problem of improving the accuracy and speed of computational modeling of non-covalent interactions in biological systems, which is of fundamental

importance for the physics of biological systems and has practical applications in the drug discovery process.

Державний реєстраційний номер ДіР: 0123U100990

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: Впровадження нових технологій та обладнання для якісного медичного обслуговування, лікування, фармацевтики

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- T. Voitsitskyi, R. Stratiichuk, I. Koleiev, L. Popryho, Z. Ostrovsky, P. Henitsoi, I. Khropachov, V. Vozniak, R. Zhytar, D. Nechepurenko, S. Yesylevskyy, A. Nafiev, and S. Starosyla. 3DProtDTA: a deep learning model for drug-target affinity prediction based on residue-level protein graphs. RSC Adv., vol. 13, no. 15, pp. 10261–10272, Mar. 2023, DOI: 10.1039/D3RA00281K.
- T. Voitsitskyi, V. Bdzhola, R. Stratiichuk, I. Koleiev, Z. Ostrovsky, V. Vozniak, I. Khropachov, P. Henitsoi, L. Popryho, R. Zhytar, S. Yesylevskyy, A. Nafiev, and S. Starosyla. Augmenting a training dataset of the generative diffusion model for molecular docking with artificial binding pockets. RSC Adv., vol. 14, no. 2, pp. 1341–1353, Jan. 2024, DOI: 10.1039/D3RA08147H.
- T. Voitsitskyi, I. Koleiev, R. Stratiichuk, O. Kot, R. Kyrylenko, I. Savchenko, V. Husak, S. Yesylevskyy, S. Starosyla, and A. Nafiev. ArtiDock: Accurate Machine Learning Approach to Protein–Ligand Docking Optimized for High-Throughput Virtual Screening. J. Chem. Inf. Model., vol. 66, no. 4, pp. 2117–2128, Feb. 2026, DOI: 10.1021/acs.jcim.5c02777.
- T. Voitsitskyi, O. Gnatyuk, F. Naeimaeirouhani, O. Skorokhod, G. Dovbeshko, G. Gilardi. Universal force field minimization for predicting secondary structure changes in proteins due to post-translational modifications. XXVI Galyna Puchkovska International School-Seminar “Spectroscopy of Molecules and Crystals” (ISSMC-2024). Постерна доповідь. Вересень 2024, Воянув, Польща.
- Т. Войціцький, В. Бджола, І. Колеев, С. Єсилевський, С. Старосила. Аналіз нековалентних взаємодій в системі мала молекула-білок для оптимізації процесу тренування моделей машинного навчання. Підсумкова наукова конференція ІФ НАН України ПНК-2024. Усна доповідь. Лютий 2025, Київ, Україна.
- T. Voitsitskyi, I. Koleiev, S. Starosyla, S. Yesylevskyy. Accurate machine learning approach to protein-ligand docking. «NANOBIOPHYSICS: Fundamental and Applied Aspects» (NBP-2025). Усна доповідь. Жовтень 2025, Харків, Україна.
- T. Voitsitskyi. Protein-Ligand Docking with Machine Learning. APS Satellite Workshop «Applied Problems of Theoretical and Computational Biophysics». Усна доповідь. Березень 2026, Київ, Україна.
- T. Voitsitskyi, I. Koleiev, S. Starosyla, S. Yesylevskyy. Molecular docking of ligands in heteroatom-containing protein binding sites using machine learning. Biophysics Week 2026 «Biophysics in Ukraine: Human Energy and Willpower in Science and Education During the Wartime». Усна доповідь. Березень 2026, Київ, Україна.

Наукова (науково-технічна) продукція: програмні продукти, програмно-технологічна документація

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

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Єсилевський Семен Олександрович
2. Semen Yesylevsky

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 03.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-6748-8931

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03680, 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. Степаньян Степан Григорович
2. Stepan Stepanian

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.14

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0899-0320

Додаткова інформація: SCOPUS ID 6701466705

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ніколаєнко Тимофій Юрійович
2. Tymofii Nikolaenko

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.14, 03.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-0146-8903

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:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Перепелиця Сергій Миколайович

2. Sergiy Perepelytsya

Кваліфікація: д. ф.-м. н., с.д., 01.04.02, 03.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9064-4234

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417124

Місцезнаходження: вул. Метрологічна, Київ, 03143, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Войтенко Олександр Іванович

2. Alexander Voitenko

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-0239-7027

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03680, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

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

Габович Олександр Маркович

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

Габович Олександр Маркович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Войціцький Тарас Васильович

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна