

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0221U106444

**Державний реєстраційний номер:** 0120U100725

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 07-12-2021

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 2

**Назва етапу:** Встановлення впливу розміру нанокристалів, співвідношення іонів різної валентності, кисневої стехіометрії, типу та вмісту домішкових іонів на динаміку накопичення/вивільнення кисню синтезованими наночастками. Дослідження можливостей керування динамікою регенерації редокс-властивостей наночасток шляхом варіювання температури, довжини хвилі та інтенсивності опромінення тощо. Визначення оптимальних параметрів оксидних нанокристалів та їх оточення для реалізації найбільш ефективного знищення/генерації активних форм кисню для селективного захисту/знищення клітин різних типів.

**Початок етапу:** 01.2021

**Закінчення етапу:** 12.2021

**Вид звітнього документа:** Остаточний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Інститут сцинтиляційних матеріалів Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 23756522

**Місцезнаходження:** просп. Науки, 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61072, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 0573404474

## IV. Відомості про співвиконавців ДіР

## V. Відомості про замовника ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Національна академія наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 00019270

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380442350981

## VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

**Підстава для проведення ДіР:** 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

**Напрямок фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

**Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК):** 6541230

|                                                          |
|----------------------------------------------------------|
| <b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 500.000 |
|----------------------------------------------------------|

## VII. Відомості про ДіР

### Назва роботи українською:

Розробка редокс-активних наноматеріалів з контрольованою про-/антиоксидантною активністю на основі оксидних нанокристалів.

### Назва роботи англійською:

Development of redox-active nanomaterials with controlled pro-/antioxidant activity based on oxide nanocrystals.

### Реферат українською:

1. Встановлено, що як швидкість, так і специфічні механізми нейтралізації активних форм кисню нанокристалом оксиду церію залежать від значення рН водних розчинів. Збільшення значення рН приводить до збільшення швидкості розкладення перекису водню нанокристалом оксиду церію. Виявлено два різних шляхи розкладення перекису водню нанокристалом оксиду церію: перший з утворенням супероксид-аніонів, що переважає при високих значеннях рН, а другий з утворенням гідроксил-радикалів, що домінує при низьких значеннях рН. Показано зменшення ефективності нейтралізації гідроксил-радикалів нанокристалом оксиду церію при зменшенні значення рН, що приводить до переважання прооксидантних властивостей нанокристалів при низьких значеннях рН. Показано, що ефект зниження ефективності нейтралізації гідроксил-радикалів при зниженні рН є загальним для різних типів оксидних нанокристалів з іонами змінної валентності (оксид церію, ортованадати). Встановлено, що тоді як УФ-опромінення водних розчинів нанокристалів оксиду церію під час процесів відновлення іонів  $\text{Ce}^{4+}$  до  $\text{Ce}^{3+}$  приводить до пришвидшення цих процесів, введення домішкових рідкісноземельних іонів сповільнює процес регенерації антиоксидантних властивостей нанокристалів, що обумовлено зростанням енергії активації кисневої дифузії у нанокристалах змішаних оксидів через зв'язування кисневих вакансій домішковими рідкісноземельними іонами. На основі отриманих результатів зроблено загальні висновки щодо ролі рН водних розчинів, типу та вмісту домішкових іонів та УФ-опромінення у механізмах формування про-/антиоксидантної активності оксидних нанокристалів.

### Реферат англійською:

2. It was shown that both the rate and specific mechanisms of neutralization of reactive oxygen species by cerium oxide nanocrystals depend on the pH value of aqueous solutions. pH increasing leads to an increase in the rate of decomposition of hydrogen peroxide by nanocrystals. Two different pathways for the decomposition of hydrogen peroxide by cerium oxide nanocrystals were identified: the first with the formation of superoxide anions predominating at high pH values, and the second one with formation of hydroxyl radicals predominating at low pH values. It was shown that the efficiency of neutralization of hydroxyl radicals by cerium oxide nanocrystals decreases with decreasing pH value, which leads to the predominance of prooxidant properties of nanocrystals at low pH values. It was shown that the effect of reducing the efficiency of neutralization of hydroxyl radicals with decreasing pH is common to different types of oxide nanocrystals with ions of variable valence (cerium oxide, orthovanadate nanocrystals). It was shown that while UV irradiation of aqueous solutions of cerium oxide nanocrystals during the reduction of  $\text{Ce}^{4+}$  to  $\text{Ce}^{3+}$  ions leads to acceleration of these processes, the introduction of rare earth ions slows down the process of regeneration of antioxidant properties of nanocrystals due to binding of oxygen vacancies by rare earth ions. Using these results, general conclusions are made about the role of pH of aqueous solutions, type and content of impurity ions and UV irradiation in the mechanisms of formation of pro-/antioxidant activity of oxide nanocrystals.

**Індекс УДК:** [548.5:546.655'21-022.532]:[544.353:535.373.2]

**Коди тематичних рубрик:** 29.41

## **Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Семінько Владислав Вікторович

**Науковий ступінь:** к. ф.-м. н.

**Вчене звання:**

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

## VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

**Назва НТП українською:** Редокс-активні наноматеріали з контрольованою про/антиоксидантною активністю на основі оксидних нанокристалів.

**Назва НТП англійською:** Redox-active nanomaterials based on oxide nanocrystals with controllable pro/antioxidant activity.

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** Матеріали

**Галузь застосування:** 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук.

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Встановлено роль рН водних розчинів у формуванні редокс-активності нанокристалів оксиду церію ( $\text{CeO}_{2-x}$ ) та ортованадатів ( $\text{GdYVO}_4:\text{Eu}^{3+}$ ) при взаємодії з активними формами кисню різних типів. Виявлено вплив УФ-опромінення, типу та вмісту домішкових іонів на динаміку накопичення/вивільнення кисню оксидними нанокристалом. Визначено оптимальні параметри нанокристалів та їх оточення для реалізації найбільш ефективного знищення або генерації активних форм кисню.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:**

**Закінчення етапу:**

**Споживачі продукції:** наукові установи НАН України

**Перспективні ринки:** Україна

**Характер співробітництва з інвестором**

**Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**

**Права, що надаються інвестору після завершення роботи:**

**Наявність бізнес-плану:**

**Техніко-економічне обґрунтування:**

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**

**Очікуваний термін окупності (років):**

**Додаткова інформація:**

## IX. Бібліографічний опис

1. Seminko V.V. Features of ROS generation during hydrogen peroxide decomposition by nanoceria at different pH values / V.V. Seminko, P.O.Maksimchuk, G.V. Grygorova et al. // Functional Materials. – 2021. – 28(3). – P. 420-426.

2. Vladyslav Seminko. Mechanism and dynamics of fast redox cycling in cerium oxide nanoparticles at high oxidant concentration / Vladyslav Seminko, Pavel Maksimchuk, Ganna Grygorova et al. // The Journal of Physical Chemistry C. – 2021. – 125(8). – P. 4743-4749.

3. Vladyslav Seminko. Switching the type of redox activity of colloidal nanoceria by Re<sup>3+</sup> (Re= Y, Eu, Tb) doping / Vladyslav Seminko, Pavel Maksimchuk, Ganna Grygorova, et al. // Chemical Physics Letters. – 2021. – 767. – 138363.

## **Х. Заключні відомості**

### **Керівник юридичної особи**

Гриньов Борис Вікторович

д. т. н., 05.02.01

### **Перелік осіб-виконавців**

Григорова Ганна Володимирівна

(к. х. н.)

Губенко Катерина Олександрівна

(к. ф.-м. н.)

Максимчук Павло Олегович

(к. ф.-м. н.)

Семінько Владислав Вікторович

(д. ф.-м. н.)

### **Відповідальний за підготовку облікових документів**

Фенько О.В.

### **Телефон**

+38 (057) 341-01-50

### **Реєстратор**

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

