ИНСТИТУТ ПО ОРГАНИЧНА ХИМИЯ С ЦЕНТЪР ПО ФИТОХИМИЯ, БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ

ГОДИШЕН ОТЧЕТ ЗА 2021 ГОДИНА

1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ЗВЕНОТО

1.1. Преглед на изпълнението на целите (стратегически и оперативни) на звеното, оценка и анализ на постигнатите резултати и на перспективите на звеното в съответствие с неговата мисия и приоритети, съобразени с утвърдените научни тематики.

Институтът по органична химия с Център по фитохимия при Българска академия на науките (ИОХЦФ-БАН) извършва фундаментални и приложни научни изследвания, обучение и експертна дейност в областта на органичната, металоорганичната и биоорганичната химия, развитие на експериментални синтетични, спектрални и изчислителни подходи, насочени към разработване на стратегии за дизайн и синтез на нови съединения, материали и походи за изучаване на природни продукти.

В резултат на научно-изследователската дейност в Института през 2021 г. са постигнати следните резултати по направления:

НАПРАВЛЕНИЕ „ПРИРОДНИ И СИНТЕТИЧНИ БИОЛОГИЧНО АКТИВНИ СЪЕДИНЕНИЯ“

- За първи път е постигнато региоселективно насочване чрез изцяло стеричен контрол на реакции на Ir-катализирано борилиране на карбоксилни киселини.
- Изследвани са нови антибактериални и антитуберкулозни производни на камфора. Получени са нови диарилетери с активност срещу 5 вида вируси.
- За първи път е постигната Ru катализирана алилова изомеризация на продукти на Ахматович с приложение в биорафинерията и тотален синтез на природни продукти.
- Синтезирани са нови нитрофуранови и нитроимидазолови съединеия с изключително висока *ин витро* антитуберкулозна активност.
- Охарактеризиран е съставът на лечебните растения *Inula aschersoniana* Janka var. *aschersoniana* и *ин витро* култивирана *Haberlea rhodopensis*. Изолирани са общо 12 съединения, от които 1 нов флавоноиден и 2 редки фенилетаноидни гликозида.
- Оценени са взаимовръзките между оксидативен стрес, липидна пероксидация и фотосинтетични пигменти с биогенеза на сескитерпенови лактони и моно- и дикафеоилхинови киселини при *ин витро* култури от *Inula britannica* L.
- Чрез ЯМР профилиране са установени разлики в състава на *ин витро* култивирани и *ex situ* акумулирани растения от редкия вид *Veronica caucasica.*
- Чрез ГХ-МС е отчетена съществена променливост в етерично-масления състав на 5 вида *Thymus* (секция *Hyphodromi*), като за първи път е изследван съставът на ендемичния *T. perinicus.* В тритерпеновата фракция от *Gentiana cruciata* са идентифицирани 2 нови за рода и 1 ново природно съединение.
- За първи път е установен съставът на прополис от безжилните пчели *Meliponula ferruginea* и *Lisotrigona furva,* като от последния вид са изолирани 2 нови фенолни съединения. Доказано е, че секретът по кората и плодовете на *Mangifera indica* играе важна роля като източник на прополис. За първи път е показана лесна идентификация посредством ^{13}C ЯМР спектроскопия на дизахарида трехалулоза, потенциален биомаркер за мед от безжилни пчели.
- За пръв път е изследвано съдържанието на полизахариди в мурсалски чай и е получена структурна информация за неговите хомогалактуронанови фрагменти.
- Намерено е, че водно-екстрахируемите полизахариди от сладководни цианобактерии *Anabaena laxa, Oscillatoria limosa* и *Phormidesmis molle* проявяват

имуностимулиращо действие и потискат растежа на туморни клетки от стомашно-чревния тракт.

- Установено е, че функционални напитки от арония повишават HDL-холестерола и забавят възрасто-обусловените промени в аортата при плъхове.
- Изследвано е влиянието на 4 вида екстракция върху добива и характеристиките на маслото от арганови ядки.
- Определен е добивът и съставът на глицеридно и етерично масла в остатъка (кейк) след студено пресоване на плодове от *Pistacia lentiscus*. Установено е, че кейкът е подходящ за добив на глицеридни и етерични масла със състав, сходен на този при студено пресоване.
- Изследвано е антиоксидантното действие на смеси, съдържащи куркумин, подбрани катехоли, растителни екстракти и фракции с цел постигане на висок инхибиращ ефект при минимални дози на база синергизъм.
- Разработена е методика за анализ на летливи компоненти в мед чрез твърдофазна микроекстракция–хед спейс ГХ-МС и за пръв път е приложена при проби български монофлорен мед. Намерена е корелация между хроматографския профил и ботаническия произход на меда.
- Създадени са корелационни модели за анализ на основни компоненти в проби българско розово масло чрез спектрометрия в близката инфрачервена област и хемометрия.
- Чрез ЯМР спектроскопия е анализиран мед от мурсалски чай. Идентифицирани са молекулните маркери, чрез които той може да бъде разграничаван от останалите ботанически видове мед в България.
- Чрез ЯМР спектроскопия е установен съставът на различни видове медовина. Проведеното сравнително ЯМР профилиране позволява определянето на добавки, прибавени към медовината по време на ферментацията ѝ, на нейния географски произход, както и на отлежаването ѝ в дъбова бъчва.

НАПРАВЛЕНИЕ „ФУНКЦИОНАЛНИ МАТЕРИАЛИ, КОМПЮТЪРНО МОДЕЛИРАНЕ И ТЕХНОЛОГИИ“

- Получен е нов комплекс на паладий с модифициран фталоцианин, за който е установена висока фотодинамична ефективност при резистентни патогенни бактерии (*Aeromonas hydrophila* и *Flavobacterium hydatis*). Постижението има потенциал за приложение - третиране на продукцията от рибните стопанства.
- С подходите на молекулното моделиране е показана възможността за употреба на късоверижни хепарини в борбата с предизвикана от COVID19 цитокинова буря. Установен е за първи път автоепитоп в глобуларната част на C1q (молекула на имунитета), с предполагаемо основно значение при развитието на летална форма на системен лупус.
- Определени са първичните структури и физико-химичните параметри на редица нови пептиди от слузта и хемолимфата на градински охлюви *Cornu aspersum* и *Helix lucorum* с потенциална антимикробна и антиоксидантна активност чрез *de novo* секвениране с тандем масспектрометрия.
- Съчетавайки подходите на протеомния анализ и биоинформатиката е получена важна информация за промяната на протеиновите профили на два щама на *S. cerevisiae* (хаплоиден и диплоиден) в пролифериращa и в стационарна фаза, подложени на оксидативен и токсичен стрес.
- Синтезирани са нови метал-въглеродни композити с различно приложение – получаване и съхранение на водород, антисептични материали и др.
- Получени са въглеродни адсорбенти от твърдо отпадно гориво, портокалови и бананови кори, отпадъци от какао, които успешно са приложени за пречистване на води от метални йони и органични съединения.

- Чрез Раманова спектроскопия са изследвани стъкловъглеродни покрития след престой в космоса.
- Синтезирани са хибридни органично-неорганични материали, които са успешно приложени за отстраняване на никел от отпадни води.
- За първи път е предложен механизъм на формиране на микроструктурата в церий-желязо оксидни композити в условия на хидротермален синтез, който е предпоставка за получаване на ефективни катализатори с регулируеми свойства с приложение в различни екологосъобразни окислително-редукционни процеси.
- Разработени са ефективни бифункционални зеолитни катализатори за получаване на фенол от алкил фенолни съединения, получени чрез деполимеризация на лигнин.
- Посредством електростатичното взаимодействие на диполите на карбоксилните групи и тези на C-I връзките е обяснено необичайното ИЧ и ЯМР спектрално поведение на ново синтезираната 2,6-дийодо-3,4,5-триметоксибензоена киселина, потенциален кандидат за контрастно вещество в Рентгеновата томография.
- Разработени са нови 1H-бензимидазол-2-ил-хидразони, проявяващи висока антиоксидантна активност, както и ларвоциден ефект спрямо *Trichinella spiralis*, по-силен от този на лекарствата албендазол и ивермектин.
- Синтезирани са нови индол- и бензимидазол-арилхидразонови хибриди, способни да действат като мулти-целеви лекарствени средства за лечение на болестта на Паркинсон посредством обезвреждане на свободни радикали, инхибиране на моноаминооксидаза-В и невропротективно действие.
- Въз основа на литературни данни за взаимодействия на полицикленi ароматни хетероцикли с гуанинови квадруплекси са разработени квантово-механични модели (DFT и RI-MP2) за пресмятане на афинитетите за свързването им. Изчислените стойности на афинитетите грубо корелират с експериментално определените биологични ефекти.
- С помощта на метаболомен анализ, молекулен докинг и квантово-химични изчисления е установено, че хидроксибензоените киселини от фенолната фракция на *Graptopetalum paraguayense* показват добър афинитет за свързване към аминокиселините от активния център на ДНК полимеразата на вируса на херпес симплекс, като механизмът на действие е различен от този на ацикловир.
- Чрез ^{1}H и ^{31}P ЯМР спектри при променлива температура и DFT пресмятания е изяснена структурата и конформацията на бис-карбенови NHC паладиеви комплекси с потенциално приложение в асиметричния катализ.
- Чрез ЯМР спектроскопия в твърда фаза са изследвани структурните характеристики на нови порести материали, представляващи модифицирани мезопорести силикати, с потенциално приложение като адсорбенти за въглероден диоксид, както и моно и би-метални зеолити с потенциално приложение като катализатори за реакции свързани с устойчиво оползотворяване на биомаса.
- Чрез ЯМР метаболомен анализ са изследвани проби хемолимфа от охлюви (*Helix lucorum* и *Rapana venosa*) като са открити метаболити с известно антиоксидантно, антибактериално и антимикробиално действие.

Получените резултати са в съответствие с научните приоритети на ИОХЦФ и отговарят на приетите тематики по направления.

1.2. Изпълнение на Националната стратегия за развитие на научните изследвания в Република България 2017-2030 (https://www.mon.bg/bg/143 - извършени дейности и постигнати резултати по конкретните приоритети.

В резултат на изпълнение на Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2017-2030 и Стратегията за развитие на ИОХЦФ-БАН, приета през 2018 г. от НС на Института, са постигнати резултати в следните **приоритетни направления:**

Съвременни енергийни източници и енергийно ефективни технологии.

- Получени са въглеродни адсорбенти, въглеродна пяна с много висока механична якост, въглеродни носители за катализатори за разлагане на метанол до водород, метал-въглеродни композити за съхранение на водород и др. чрез оползотворяване на отпадъци от полимери, биомаса, преработката на горива и др.

Мехатроника и чисти технологии.

- Получени са наноразмерни Cu/Ce и Ce/Mn оксиди и модифицирани зеолити с потенциал за пълно окисление на летливи органични съединения и пречистване на води от метални йони.
- Получени са въглеродни материали и композити за пречистване на води и въздух от органични замърсители, метални катиони, вируси и бактерии.

Здраве и качество на живот. Превенция, ранна диагностика и терапия. Зелени, сини и екотехнологии, биотехнологии, екохрани.

- Анализирани са мастно-киселинният състав и стабилността на масла от семена на камелина (*Camelina sativa*) и от гама-облъчени семена на тученица (*Portulaca oleracea*) като възможни суровини за хранителната индустрия. Екстракт със супер-критичен CO_2 от листа и стебла на тученица е вложен в полимерен материал за повишаване на антиоксидантната му активност и засилване на лечебното му действие за регенерация на тъкани.
- Сравнена е антиоксидантната активност на обогатени фракции, получени от ацетонов екстракт от зелен чай съдържащи до 43.5 % епикатехин, с тази на чистия търговски продукт (≥90% (-)-епикатехин). Последният е по-слабо активен, но в еквимоларно съотношение с куркумин активността му се повишава значително, докато при фракцията с най-високо съдържание на епикатехин същата комбинация води до антагонизъм.
- Чрез газова хроматография-мас спектрометрия е проведено сравнително химично профилиране на екстракти със субкритични флуиди от основните видове маслодайни рози с промишлено значение. Получените резултати показват, че субкритичните екстракти имат състав близък до този на розовото абсолю и могат да се използват в козметичната индустрия, ароматерапията и др.
- Получени са в търговски количества хранителни добавки и ензимни препарати за лечение на трудно зарастващи рани (Neprolysin и Post-Neprol и техни производни).

Опазване на околната среда. Екологичен мониторинг. Оползотворяване на суровини и биоресурси. Пречистващи и безотпадни технологии.

- Получени са ценни въглеродни материали от отпадъчна биомаса и отпадъчно гориво.
- Разработени са адсорбенти за улавяне на CO_2.
- Разработени са нови адсорбенти и катализатори за очистване на въздуха и водите от замърсители.
- Чрез каталитични процеси за оползотворяване на лигнин от отпадъчна биомаса са получени ценни химикали и горива.

Национална идентичност и развитие. Социално-икономическо развитие и управление.

- Във връзка с изследването и реставрацията на стенописите в църква „Успение на Св. Йоан Рилски“, изографисана през 1830 г. от прочутите български майстори Димитър и Захари Зограф, чрез вибрационен анализ бяха идентифицирани използваните художествени материали и технологии.

- Аналитичното изследване на три персийски каджарски живописни произведения от колекцията на Националната галерия позволи те да бъдат датирани, за се идентифицира състава и стратиграфията им и да се определи посоката за последващия консервационно-реставрационен подход.

-Във връзка с реставрационни дейности в тракийска гробница "Александрово" чрез газова хроматография-масспектрометрия бяха изследвани пигментните слоеве на образци от стенописни фрагменти и бяха идентифицирани използваните органични свързватели.

В традиционното класиране на институциите SCImago (SIR) за 2021 г., което класира академичните и научноизследователските институции по три различни групи от индикатори, базирани на резултатите от научните изследвания, резултатите от иновациите и социалното въздействие, измерено чрез тяхната видимост в мрежата, ИОХЦФ заема пета позиция в общата класация на българските научни институции (след БАН, Медицински Университет – София, Софийски Университет „Св. Климент Охридски“ и Институт за ядрени изследвания и ядрена енергетика - БАН). Тези резултати се дължат на запазване на високото ниво на Института по международно видимата научна продукция в списания с висок импакт фактор, което е сред основните цели в Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2017-2030 (специфична цел 5, дейност 1). През 2021 г. учените от ИОХЦФ са публикували **154** статии, от които**142** са в списания, индексирани в WoS/Scopus. Продължава тенденцията към нарастване на броя на публикациите в списания от категории Q1 и Q2 като те са съответно 61 и 37 или **63.63**% от общия брой публикации. В сравнение с предходните години през 2021 г. се е увеличил броят на публикациите в списания с **IF ≥ 6 (общо 13): Carbohydrate Polymers (IF=9.38) (автори от ИОХЦФ - доц. М. Огнянов и гл. ас. Й. Георгиев), ACS Applied Materials and Interfaces (IF=9.22) (автори от ИОХЦФ - проф. Т. Цончева, доц. М. Димитров, гл. ас. Г. Исса и Р. Консолато), Food Chemistry (IF=7.51) (автори от ИОХЦФ – гл. ас. А. Казакова и проф. В. Кънчева; Д. Клисурова, проф. П. Денев и проф. А. Трендафилова; гл. ас. Д. Тенева), Chemosphere (IF=7.09) (автори от ИОХЦФ - проф. Маргарита Попова и д-р Хр. Лазарова), Electrochimica Acta (IF=6.90) (автори от ИОХЦФ - проф. Т. Цончева и проф. Н. Петров), Pharmaceutics (IF=6.32) (автор от ИОХЦФ -проф. П. Шестакова), Antioxidants (IF=6.31) (автори от ИОХЦФ – гл. ас. Д. Тенева и проф. П. Денев; проф. В. Кънчева и гл. ас. А. Казакова), Journal of Molecular Liquids (IF=6.17) (автори от ИОХЦФ – Д. Гергинова; доц. М. Рангелов) и Catalysis Science and Technology (IF=6.12) (автор от ИОХЦФ – гл. ас. Г. Исса).**

Публикуваните резултати на учените от ИОХЦФ са получили **3585** цитата в научни издания, от които **3053** са цитирания в списания индексирани в WoS/Scopus (**85.16** % от общия брой цитати).

Член-кор. проф. дхн Вася Банкова и проф. д-р Милена Попова са сред първите 2 % на най-добрите учени в света (73 от България), според годишната класация на Станфордския университет, съставена на базата на комплексен анализ, който обхваща информация за брой цитирания, H-индекс, коригиран в съавторство Hm-индекс, цитати на статии при различни позиции на авторство и др. Член-кор. проф. дхн В. Банкова е също така в първия един процент на най-добрите учени в света в годишната класация за цялостен научен принос на Станфордския Университет, в която са включени 17 българи.

Въпреки продължаващата пандемична COVID-19 ситуация през 2021 г. се забелязва увеличаване на участията на учени от ИОХЦФ в научни мероприятия. Резултатите от проведените научни изследвания са представени през тази година на 63 международни и национални форума като са изнесени 207 устни и постерни доклада, от които 102 са от участия на международни мероприятия.

Приоритетно място в Стратегията за развитие на ИОХЦФ-БАН (специфична цел 4, дейност 1) заемат проектите свързани с поддържането и обновяването на научната

инфраструктура на Института. Тази цел се осъществява чрез успешното изпълнение на три проекта по Приоритетна ос 1 „Научни изследвания и технологично развитие“ на Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския фонд за регионално развитие: **Център за компетентност „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси от лечебни и ароматични растения за иновативни продукти“** с ръководител проф. дхн Владимир Димитров от ИОХЦФ, **Център за върхови постижения „Мехатроника и чисти технологии“** с координатор от ИОХЦФ проф. дн Маргарита Попова и **Център за компетентност „Чисти технологии за устойчива околна среда – води, отпадъци, енергия за кръгова икономика“** с координатор от ИОХЦФ проф. дн Павлинка Долашка.

В рамките на **Центъра за компетентност „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси и отпадъци от лечебни и ароматични растения за иновативни биоактивни продукти**“ са получени 5319185 лв., от които **3375368** лв. за ИОХЦФ. Доставени и инсталирани са следните апаратури (инфраструктурни единици): лабораторен реактор за синтетична и екстракционна работа с обем до 20 литра, ротационен вакуум изпарител с вакуум помпа за големи обеми, термостат и приемни колби 6, 10, 20 литра, разпрашителна сушилня за водни разтвори, система за флаш хроматография при ниски налягания система за флаш хроматография комбинирана при ниски и високи налягания, система за флаш хроматография при високи налягания, апарат за ултра бърза центрофужна хроматография и два нови ЯМР спектрометъра на фирмата Bruker (600 и 400 МХц). Извършен е мащабен ремонт на лабораторията, в която се намират новите ЯМР апарати. През 2021 г. са провеждани научни изследвания в съответствие с научната програма. Създаден е прототип на козметичен крем съвместно с колеги от Института по полимери-БАН и е регистриран полезен модел в патентното ведомство.

През 2021 г. по проект за изграждане на **Център за върхови постижения „Мехатроника и чисти технологии“** са получени **20383** лв. Подготвена беше документация и обявена обществена поръчка за значително дооборудване и обновяване на ЯМР спектрометър Bruker Avance II+600. Назначени бяха 3 изследователи с научна степен и 1 изследовател без научна степен. Проведени са научни изследвания в съответствие с научната програма на проекта и са получени следните по-важни резултати:

- Разработен е комбиниран подход за очистване на води от метални йони и въздух от органични замърсители на базата на природни и синтетични зеолити. Използван е йонообменният потенциал на зеолитите за улавяне на метални йони (Cu^{2+}). Зеолитите, съдържащи задържаните медни йони са използвани като активни и селективни катализатори за окисление на летливи органични съединения. Процесът позволява ефективно използване на природните ресурси с цел постигане на максимален екологичен ефект.
- Разработени са наноразмерни метални оксиди на основата на Cu/Ce и Ce/Mn оксиди, които са показали висока активност за пълно окисление на летливи органични съединения, като 100% елиминиране на замърсителите се наблюдава до 400^{o}C.

Екипът от изследователи от ИОХЦФ, включени в проект за изграждане на Център за компетентност „**Чисти технологии за устойчива околна среда – води, отпадъци, енергия за кръгова икономика**“ продължи работа по научната програма на проекта. През 2021 г. са получени и изразходвани средства за **133794** лв. Закупени са система за HPLC за аналитични и полупрепаративни цели и апарат за определяне на специфична повърхност, обем, размер на порите и разпределение на порите по размер. Получени са следните по-важни резултати:

- Получена е нова информация за състава на 4 минерални извора в района на Велинград чрез елементен анализ. Определена е концентрацията на макроелементите Mg, K, Ca и S, както и редица микроелементи като Au, Se, W, B, Mo, Sb, Te и др.
- Анализът на сухи остатъци на водни проби от 4-те минерални извора с Раманова

спектроскопия и Раман микроскоп разкри различни специфични кристални структури, някои от които със сулфатна природа. Допълнително, чрез анализ на 12.5% SDS-PAGE, са открити протеини с молекулна маса между 50-150 kDa, което предполага наличието на термофилни бактерии в тези извори. Получените резултати допринасят за изясняване на състава и лечебните свойства на минералната вода и възможностите за използването ѝ в лечебни и козметични препарати.

В рамките на проект „**ИНФРАМАТ**“ от Националната пътна карта на научната инфраструктура в България, с ръководител за ИОХЦФ проф. д-р Павлета Шестакова са получени **131520** лв. за 2021 г. Средствата са използвани за закупуване на дигитален термоблок за епруветки, снабден с концентратор с игли (Dri-Block® DB 200/3, Sample Concentrator), отражателна ATR приставка за окомплектоване на закупения инфрачервен FTIR спектрометър INVENIO R Bruker, отражателна ATR приставка за оокомплектоване на закупения инфрачервен FTIR спектрометър INVENIO R Bruker, химикали и разтворители за пробоподготовка, както и консумативи, необходими за функциониране на оборудването и извършване на анализи и хроматографски разделяния. Извършени са ремонт на вакуум-помпа, обслужваща апарат за високоефективна течна хроматография Agilent 1100; ремонт, подмяна на ел. табла и климатизиране на помещението, в което се намират компресорите за ЯМР апаратите, като по този начин е осигурена тяхната надеждна работа; частичен ремонт на лаборатория 117, с цел създаване на лаборатория за пробоподготовка към Центъра по ЯМР спектроскопия. Подменена е електрическата инсталация, изградено е ново ел. табло и пожароизвестителна система. Завършени са всички модули и предстои въвеждане в експлоатация на електронна платформа (E-NMR Service), за автоматизирано управление и организация на сервизната дейност на Центъра по ЯМР спектроскопия.

Научно-изследователската дейност на учените от ИОХЦФ беше насочена и към изпълнение на националните научни програми по приоритетни направления, в които ИОХЦФ-БАН участва: **Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита (ЕПЛЮС)** с координатор от ИОХЦФ проф. дн Маргарита Попова и финансиране от **57519** лв. за 2021 г., **Иновативни нискотоксични биологично активни средства за прецизна медицина (БиоАктивМед)** с координатор от ИОХЦФ проф. дн Павлинка Долашка и финансиране от **316800** лв. за 2021 г. и **Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот** с координатор от ИОХЦФ чл. кор. проф. дхн Вася Банкова и финансиране от **25300** лв. за 2021 г.

Получени са следните по-важни резултати във връзка с изпълнение на **Национална научна програма „Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита (ЕПЛЮС)“, ДО1-214/28.11.2018 (2018-2021):**

- Разработени са ефективни катализатори на основата на модифицирани с N- и P-съдържащи органични групи мезопорести силикати, които са показали отлични резултати за улавяне на CO_2.
- Установено е, че съединението терфенил е подходящ катализатор за фотохимично активиране на CO_2. Започнати са изследвания за оптимизиране на реакционни условия (време на престой, налягане на CO_2, температура, разтворител, дължина на вълната и др.) за реакции на тертфенил катализирано радикалово активиране на CO_2 и реакция с аминали.
- Направено е сравнително проучване за ефективността на теорията на функционала на плътността (DFT) за прогнозиране на енергиите на вертикално възбуждане и силите на осцилаторите в малки молекули с отворена обвивка, които са описани в литературата като потенциални кандидати за синглетно разцепване, като различни функционали са тествани спрямо многодетерминантните “benchmark” методи. Целта е да се предложи евтин изчислителен скрининг, който спестява време и съчетава квантово-химични изчисления, алгоритми за машинно самообучение и извличане на данни в търсенето на нови органични фотоволтаични материали.

Във връзка с изпълнение на научните задачи по Национална научна програма

„**Иновативни нискотоксични биологично активни средства за прецизна медицина (БиоАктивМед)“,** ДО1-217/30.11.2018 (2018-2022) е закупена следната апаратура: система ÄKTA flux за концентриране и разделяне на протеини, фотодокументационна система за заснемане на белтъчна електрофореза без оцветяване на гела Stain-free технология (Bio-Rad), система за изоелектрично фокусиране на протеини (Bio-Rad), система за вертикална белтъчна електрофореза със статив за изливане на 4 гела и токоизправител (Bio-Rad), ротационен вакуум изпарител в комплект с мембранна вакуум помпа, лабораторен автоклав, CO_2 инкубатор, центрофуга с охлаждане за епруветки тип Епендорф, орбитална лабораторна клатачка и pH метър. Получени са следните по-важни резултати:

- За първи път е представена пълната кДНК (cDNA) и първичната последователност на субединица 5 на хемоцианин, изолиран от черноморски рак *E. verrucosa*. Показаният 3D-модел разкрива структура, включващ три отделни домена, шест запазени хистидинови остатъка и *O*-гликозилиране, като гликанът е разположен на повърхността на субединицата. Получената информация е от фундаментално значение и може да послужи за прецизен еволюционен анализ при безгръбначните от тип *Arthropoda*.
- За първи път е установен висок антигъбичен ефект на фракция от хемолимфата на *R. venosa* с MW между 30-100 kDa, срещу широк спектър патогени *Fusarium oxysporum, Penicillium griseofulvum, Alternaria solani, Mucor hiemalis, Aspergillus niger, Botrytis cinerea, u Candida albicans*. Съчетавайки три съвременни подхода - протеомен анализ на денатуриращa SDS-PAG електрофореза, *de novo* MALDI-MS/MS секвениране и биоинформатика, са определени протеините в активната фракция свързани с цитотоксичен ефект.
- Представена е информация за механизма на цитотоксично действие, чрез 2Д–ПАГ електрофореза на клетъчни екстракти от *Aspergillus niger*, получени преди и след третиране с активната фракция от хемолимфата на *R. venosa*. Идентифицирани са редица протеини, свързани с оксидативния стрес и процесите на детоксикация, които променят значително експресията си в резултат на взаимодействие с активната фракция.
- Определени са редица нискомолекулни метаболити в хемолимфата на *Helix lucorum*, чрез тандем масспектрометрия и ^{1}H ЯМР анализи. Доказани са антиоксидантните им свойства.

По ННП БиоАктивМед бяха организирани следните научни форуми:

- Национална конференция „Иновативни нискотоксични биологично активни средства за прецизна медицина“ 11.05.2021 - 14.05.2021, Панагюрище.

- Първо национално лятно училище по природни продукти с приложения в медицината, 28.06.2021 - 04.07.2021, Варна.

В резултат на научно-изследователската работа по **Национална научна програма „Здравословни храни за силна биоикономика и качество на живот“, ДСД-3/2.12.2018 (2018-2022)** са получени следните по-важни резултати:

- Изследвани са захарните профили на проби от български мед с помощта ^{13}C ЯМР спектроскопия, като е установено количеството на 21 захарида и 16 неидентифицирани вещества, както и фенолното съдържание на пробите с УВ спектроскопия. Установени са съществени разлики в захарните профили между мед от пчели, които не са получавали допълнително подхранване, и мед от пчели, подхранвани с различни сиропи. Захарните профили позволяват и да се идентифицира разреден мед. От изследваните за тотални фенолни съединения различни видове мед, мановият мед показа най-високо съдържание на тотални феноли.
- Извършен е качествен анализ на екстракт от люспи от сини сливи чрез LC/MS/DAD. Установено е, че екстрактът съдържа фенолни киселини, антоциани и флавоноиди. Идентифицирани са общо 11 съединения, а присъствието на 7 от тях е потвърдено чрез автентични свидетели.

- Получени са данни за влагосъдържание, пепелно съдържание, количество на суров протеин, общи въглехидрати, целулоза, полифеноли, липиди в плодовете на скорушата. Въз основа на получените фитохимични данни като подходяща последваща обработка на суровината за изолиране на клетъчно-стенен материал, е избрано получаването на алкохолно-неразтворима част чрез последователно третиране със 70% етанол и ацетон.

Продължава изпълнението на проект по **Националната научна програма „Вихрен“ по схема Установен изследовател**: **“Региоселективен катализ чрез нековалентен контрол: получаване на ценни химически продукти чрез отдалечено С-Н функционализиране”** с ръководител доц. д-р Свилен Симеонов и финансиране от **139170** лв. за 2021 г. През септември 2021 г. към програмата бе включен 1 редовен докторант (хим. Христо Петков) след успешно положени кандидат-докторантски изпити. Получени са следните по-важни резултати:

- Разработен е нов клас лиганди за стерично насочване на директно С-Н активиране в ароматни субстрати.
- За първи път е постигнато директно селективно пара С-Н функционализиране на ароматни карбоксилни киселини.

Сред основните приоритети в Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2017-2030 (специфична цел 4, дейност 1) е научното развитие и израстване на младите учени, което е и основен приоритет в ИОХЦФ. Под ръководството на доц. д-р Калина Алипиева беше проведено оценяването на изпълнението на проекти по **Национална програма „Млади учени и постдокторанти“ Модул „Млади учени“ и Модул „Пост-докторанти**“, както и на нови проектни предложения. Започна изпълнението на вторите и третите етапи на 9 проекта в **Модул „Млади учени“** (гл. ас. д-р Радостина Иванова, гл. ас. д-р Ивайло Славчев, гл. ас. д-р Неда Анастасова, гл. ас. д-р Иванка Стойчева, гл. ас. д-р Мирослав Дангалов, д-р Ралица Чимширова, биолог Пролетина Кардалева, хим. Виктория Иванова и хим. Христо Петков) и бяха одобрени 10 нови проекта на гл. ас. д-р Атанас Курутос, ас. Ася Даскалова, ас. Георги Георгиев, ас. Десислава Гергинова, ас. Николай Лумов, ас. Мануела Ойкова, еколог Калина Митева, хим. Радостина Тошковска, хим. Георги Гергинов и хим. Ани Петрова**.** Продължи изпълнението на третия етап на проект в **Модул „Пост-докторанти“** с изпълнител гл. ас. д-р Йордан Георгиев. **Средствата по тази програма за 2021 г. бяха 105 000 лв.**

Отчитайки, че информацията е един от най-съществените компоненти за научно-изследователската дейност на Института, както и за ефективното административно управление, през 2021 г. бе въведено в експлоатация новото окабеляване на института след приемане изпълнението на обществена поръчка с предмет „Модернизация на сървър и мрежа за достъп до аналитичната апаратура и поддържане на бази данни” във връзка с изпълнението на проект № BG05M2OP001-1.002-0012. Проектирана и извършена е модернизация на сървъра чрез нова архитектура на ИТ структурата, която осигурява съвременно и безопасно използване на информационните ресурси. Комуникационната част на ИТ инфраструктурата осигурява дистанционен достъп до специализираната аналитична апаратура и може ефективно да поддържа системи от бази данни.

ИОХЦФ е официално регистриран като образователна институция в базата на Microsoft с правата да използва безплатно всички услуги, които са в образователния му портфейл с практически неограничен брой лицензи. Разработени са политики и ръководства за използване на ИТ услугите на съвременно ниво и е проведено начално обучение за всички служители в института. До края на годината в домейна на института са регистрирани 33 компютърни единици. Предстои включването на още изчислителни ресурси (компютри, работни станции и аналитична апаратура) в институтската мрежа и изграждане на безжична мрежа.

Постигнатите резултати в основните научни направления са свързани с изпълнението на **90** проекта по национални, европейски и международни програми, от които **35**

финансирани от ФНИ, вкл. за съфинансиране по COST, **4** участия по Национални научни програми и проект ИНФРАМАТ, **6** проекта, финансирани от рамкови, европейски и международни програми и фондове, **12** проекта по ЕБР, **9** проекта, финансирани по договори с фирми, университети и институции и **20** проекта финансирани от Национална програма „Млади учени и постдокторанти“. Учени от ИОХЦФ са участници в **4** COST акции.

Основните средства получени през изминалата година за изпълнение на проекти са: от ФНИ – 692223 лв., от международни проекти финансирани по линия на Хоризонт 2020 285687 лв. и от националните научни програми на МОН и проект ИНФРАМАТ – 636139 лв.

В традиционната конкурсна сесия на **ФНИ „Конкурс за финансиране на фундаментални научни изследвания – 2021 год.“, в научно направление „Химически науки“** беше одобрен **проект на тема: „Перспективни G4-специфични хетероциклени лиганди за биомедицински цели“** с **ръководител доц. д-р Снежанка Бакалова. В същото научно направление ИОХЦФ (ръководител гл. ас. д-р Радостина Иванова) е партньор в проект на тема „Усъвършенствани каталитични системи за пълно окисление на органични замърсители във вода и въздух“, а в научно направление „Медицински науки“,** ИОХЦФ (ръководител доц. д-р Ирена Филипова) е партньор в проект на тема „**Тирозинкиназни инхибитори с вторичен фармакофор като ново поколение мултитаргетни антинеопластични средства“ (ФФ, МУ - София).** В „**Конкурс за финансиране на „Фундаментални научни изследвания на млади учени и постдокторанти - 2021**“ в **научно направление „Химически науки“** бяха одобрени за финансиране 3 проекта на млади учени: „**Синтез и изследване на полидопаминови наноантиоксиданти като нов терапевтичен подход за лечение на болестта на Алцхаймер**“ с ръководител **гл. ас. д-р Неда Анастасова,** „**Откриване на нови лекарствени кандидати с обещаваща антикоронавирусна активност“** с ръководител **гл. ас. д-р Ивайло Славчев** и „**Нови стирилови и полиметинови флуорофори като потенциални тераностични агенти**“ с ръководител **гл. ас. д-р Атанас Курутос**. През 2021 г. беше одобрен проект на ФНИ за съфинасиране по COST на тема „**Оползотворяване на отпадъчни продукти за устойчиво получаване на енергия**“ с ръководител проф. дн Маргарита Попова.

Успешното развитие на младите учени в Института е свързано и с получаване на награди за техните резултати. Гл. ас. д-р Атанас Курутос бе отличен с наградата на името на акад. Иван Юхновски в националния конкурс "Изявен млад учен в областта на органичната химия" за 2021 г., а химик Виктория Иванова – с наградата в националния конкурс „Млад фитохимик на годината“ на Българското фитохимично сдружение. Гл. ас. д-р Ивалина Трендафилова беше номинирана за Голямата награда за млад учен „Питагор 2021“. Гл. ас. д-р Ат. Курутос и гл. ас. д-р Й. Георгиев бяха отличени с награди за най-добра презентация на млад учен на научен форум, съответно в 7th International Conference Ecological Engineering and Environment Protection (EEEP 2021) и Третата младежка научна сесия „Биомедицина и качество на живот“.

За поредна година участвахме в организираната от **Международния съюз по чиста и приложна химия (IUPAC) в световен мащаб закуска „Global Women’s Breakfast“**, която беше на тема: ***Empowering Diversity in Science*** и се състоя на 9 февруари 2021 г. през работното пространство **Microsoft Teams**. Учени от института представиха четири доклада за закупената в рамките на оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“ и програма ИНФРАМАТ научна апаратура и нейните възможности.

1.3. Полза / ефект за обществото от извършваните дейности.

Дейностите на учените от ИОХЦФ със значим ефект върху обществото са:

- Центърът по ЯМР спектроскопия е важно изследователско, приложно и сервизно звено с непрекъснат режим на работа, което извършва анализи и предоставя научна

експертиза за университети и научни организации, както и за предприятия и държавни институции.

- Извършват се анализи за охарактеризиране на състава и окислителната стабилност на масла, мазнини и липид-съдържащи продукти за хранителни, козметични, лекарствени, технически и др. цели, като се определят техните качество, автентичност или потенциал като компоненти на нови композиции. Изследва се кинетиката и механизма на липидното окисление в отсъствие и присъствие на различни био-антиоксиданти и на факторите, които оказват значим ефект. На тази база се прави научно обоснован избор на нови био-антиоксиданти – индивидуални и в смеси за превенция и терапия на трудно лечими и социално значими заболявания.
- Извършва се анализ на качеството на прополисови тинктури, предлагани в търговската мрежа.
- Провеждат се изследвания на захарен състав и фенолно съдържание на различни видове български мед.
- Извършва се съхранение на генетичен материал в *ин витро* условия на ценни, редки или ендемични растителни видове от България и чужбина и се изследват възможностите за получаване на биологично активни екстракти и фракции с лечебно действие, без засягане на естествените находища, провеждат се фундаментални изследвания върху процесите в растителния организъм, обуславящи натрупването на определени класове вторични метаболити.
- Изучават се биологично активните компоненти в български плодове, зеленчуци гъби и билки и тяхното въздействие върху човешкия организъм като например: изследване на възможностите за подобряване качеството, органолептичните свойства и биологичната активност на функционални храни от арония (*Aronia melanocarpa*) чрез копигментация на полифенолните съединения и синергизъм в антиоксидантната активност с цел получаване на нови подобрени функционални напитки от арония, използвани за превенция на сърдечно-съдови заболявания и лечение на хронични възпаления на червата; изследване на метаболитния профил на местното биоразнообразие на род *Capsicum* (пипер); оползотворяване на биологично активните вещества в отпадъчни материали от етерично-маслената индустрия с цел тяхното приложение за „зелен“ синтез на метални наночастици и за разработване на електрохимични сензори; изследване на структурните особености и имуностимулиращата и противовъзпалителна активности на полизахариди от цианобактерии и *Geranium sanguineum* L.
- Получени са данни за количествено съдържание на белтък, фруктани, уронови и фенолни киселини в корени от ехинацея, култивирана в България, които могат да се използват при изготвянето на търговски продукти от екстракти с ясно дефиниран химичен състав.
- Извършват се химични, физикохимични и спектрални анализи на екзополизахариди, образувани от дрожди, изолирани от Антарктида, в процеса на тяхното непрекъснато дълбочинно култивиране.
- Под ръководството на проф. Петър Недков успешно се произвеждат препаратите **Neprolysin и Post-Neprol** и техни производни.
- Синтезирани са ефективни и евтини катализатори за разлагане на метанол на основата на активирани с Co, Zn, Ni и Cu смесени ферити, нанесени върху активен въглен и въглеродна пяна, получени от отпадни суровини (каменовъглен пек и биомаса).
- Показано е, че чрез добавяне на фурфурол към каменовъгления пек или използването на биомаса с повишено съдържание на лигнин може да се повиши дисперсността и достъпността на активната феритна фаза, както и съществено да се повлияе разпределението на йоните във феритната структура. Това създава условия за лесен контрол на ефективността на катализаторите. Демонстрираният висок потенциал на катализаторите

в разлагането на метанол като източник на водород е принос към развитието на „кръговата икономика“.

1.4. Взаимоотношения с други институции.

Изпълнението на договори по научно-изследователски проекти е свързано с провеждане на съвместни изследвания с други научни Институти от БАН и Университети в страната. Изградени са партньорства със следните научни организации от БАН: Институт по полимери, Институт по катализ, Институт по обща и неорганична химия, Институт по минералогия и кристалография, Институт по физикохимия, Институт по микробиология „Стефан Ангелов“, Институт по молекулярна биология, Институт по инженерна химия, Институт по биология и имунология на размножаването, Институт по биоразнообразие и екосистемни изследвания, Национален археологически институт с музей, Институт по оптически материали и технологии; от Селскостопанска Академия: Агробиоинститут, Институт по розата и етерично-маслените култури, Институт по растителни генетични ресурси и Институт по зеленчукови култури „Марица“ – Пловдив, както и с много университети в страната: Факултет по химия и фармация и Биологически Факултет на СУ „Св. Климент Охридски“, ХТМУ - София, Факултет по фармация на МУ - София, Тракийски Университет – Стара Загора, Аграрен университет – Пловдив, Лесотехнически университет, МГУ „Св. Иван Рилски”, МУ-Пловдив, МУ-Варна, УХТ-Пловдив, ПУ „Паисий Хилендарски“ – Пловдив, Университет Проф. д-р „Асен Златаров“, Бургас и др.

През 2021 г. са извършени над 1900 броя ЯМР сервизни анализи за научни институции в България като ИП-БАН, Факултет по химия и фармация на СУ, Институт по молекулярна биология, ХТМУ-София, ПУ „Паисий Хилендарски“, Фармацевтичен Факултет на МУ-София, Институт по инженерна химия – БАН, Институт по микробиология – БАН, Медицински Университет – Плевен и др.

1.5. Общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата.

1.5.1. Практически дейности, свързани с работата на национални, правителствени и държавни институции, индустрията, енергетиката, околната среда, селското стопанство, национални културни институции и др. (<u>относими към получаваната субсидия</u>).

Учени от Института участват в дейността на редица експертни национални и международни организации.

Учени от ИОХЦФ участват в повече от 30 експертни органи като: Съюз на изобретателите в България, Българско фитохимично сдружение, Съюз на учените в България, Съюз на химиците в България, Българско Пептидно Дружество, Българско Кристалографско дружество, European Federation for Lipid Science and Technology, Deutsche Gesellschaft für Fettwissenschaft, Gesellschaft Deutscher Chemiker - Fachgruppe Magnetische Resonanzspektroskopie, European Society for Photobiology, Society for Medicinal Plant and Natural Product Research, Association for Medicinal and Aromatic Plants of Southeastern Europe, European Food Safety Authority, International Honey Commission, International Union of Pure and Applied Chemistry, French Organic Geochemistry, European Peptide Society, American Chemical Society, Swiss Chemical Society, International Humus Science Society, Pan-Balkan Alliance of Natural Products and Drug Discovery Associations (PANDA), Academisa Europea, Slovenian Zeolite Association, Европейска асоциация за химически и молекулни науки, Федерация на научно-техническите съюзи, International Propolis Research Group, European Federation of Catalysis Societies и др.

Поради високата си експертиза, учените от ИОХЦФ-БАН са търсени оценители по международни и национални програми. Проф. д-р Павлета Шестакова и проф. дхн Светлана Симова са оценители на проекти по Хоризонт 2020, а проф. д-р Петко Денев - на проект

към Датския Иновационен Фонд и член на оценителен панел „Природни науки“ по Програма COST. Като оценители към ФНИ са участвали проф. д-р Петко Денев и доц. д-р Светлана Момчилова. Проф. дхн Владимир Димитров е член на “Научен консултативен съвет“ към президента на Организацията за забрана на химическите оръжия (Scientific Advisory Board, OPCW).

1.5.2. Проекти, свързани с общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата и обществото, финансирани от национални институции (без Фонд „Научни изследвания“), програми, националната индустрия и пр.

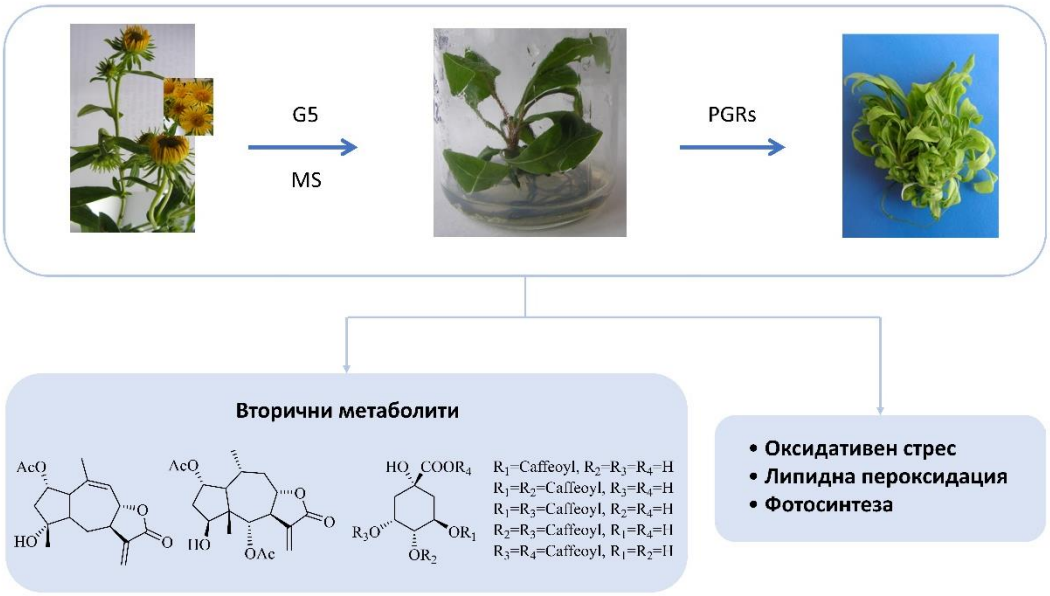
Проведени са процедури по обществени поръчки и научни изследвания във връзка с изпълнението на три проекта по Приоритетна ос 1 „Научни изследвания и технологично развитие“ на Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския фонд за регионално развитие: **Център за компетентност „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси от лечебни и ароматични растения за иновативни продукти“** с ръководител проф. дхн Владимир Димитров от ИОХЦФ и **Център за върхови постижения „Мехатроника и чисти технологии“** с координатор от ИОХЦФ проф. дн Маргарита Попова и **Център за компетентност „Чисти технологии за устойчива околна среда – води, отпадъци, енергия за кръгова икономика“** с координатор от ИОХЦФ проф. дн Павлинка Долашка. В резултат на изпълнение на проектите е изградена модерна инфраструктура и се провеждат научни изследвания на високо европейско ниво.

2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНОИЗСЛЕДОВАТЕЛСКАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2021 г.

2.1. Научно постижение

Тема: Диференциален ефект на витамините и растежните регулатори върху натрупването на сескитерпенови лактони и фенолни киселини в култура от надземни части на британски оман

Колектив: доц. д-р Калина Данова, проф. д-р Антоанета Трендафилова, доц. д-р Милка Тодорова, доц. д-р Мирослав Рангелов, доц. д-р Даниела Антонова, ас. Камелия Гечовска и хим. Виктория Иванова



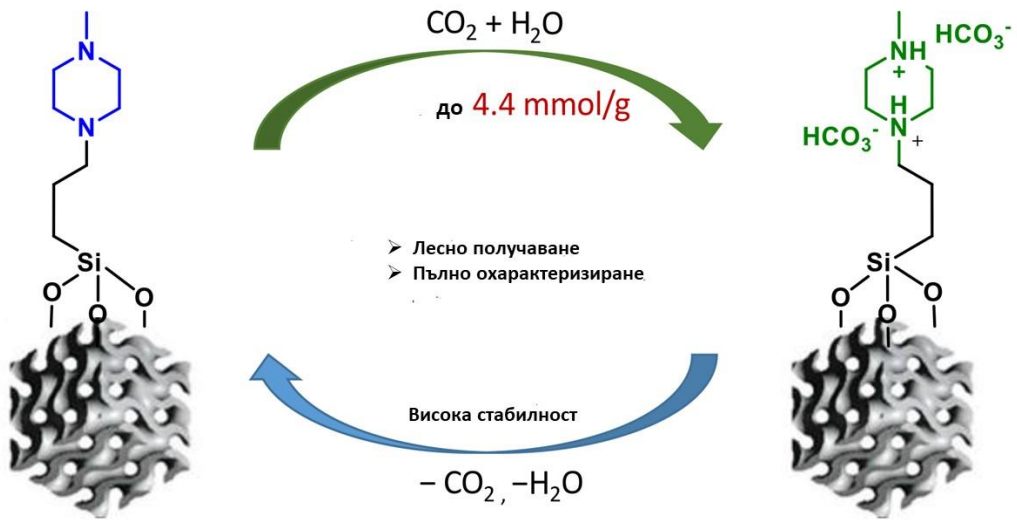
Британският оман (*Inula britannica* L.) се използва в народната медицина при астма, като откашлящо средство при различни белодробни заболявания и др. За първи път е изследван фитохимичния състав на вида в условията на *ин витро* култура. Проследени са

взаимовръзките между добавянето в средата на растежни регулатори и витамини с *ин витро* капацитета му на натрупване на сескитерпенови лактони (британин и гайлардин) и моно- и дикафеоилови естери на хиновата киселина (хлорогенова, 1,5-, 3,5-, 4,5- и 3,4- дикафеоил-хинова киселина). Изучена е връзката на тези закономерности с фотосинтетичните пигменти, липидната пероксидация и оксидативния стрес *ин витро.* При сравнителния анализ са подбрани най-подходящите комбинации от витамини и растежни регулатори, водещи както до повишено съдържание на дикафеоилхинови киселини, така и на избирателно превръщане в съответните 4,5- или 3,4-изомери. Установени са също условията, при които в *ин витро* отглежданото растение се стимулира продукцията на лактоните британин чрез гайлардин. Получените резултати биха имали пряко практическо приложение за насочен добив на съответните класове вторични метаболити при контролирани условия.

2.2. Научно-приложно постижение.

Тема: Нови нанопорести адсорбенти за улавяне на CO_2

Колектив: гл. ас. д-р Мартин Равуцов, гл. ас. д-р Явор Митрев, проф. д-р Павлета Шестакова, д-р Христина Лазарова, доц. д-р Свилен Симеонов, проф. дн Маргарита Попова



Разработена е лесна двуетапна процедура за получаване на модифицирани с морфолин и 1-метилпиперазин мезопорести MCM-48 и SBA-15 силикати със запазена висока специфична повърхност. За модифицираните материали е установен висок капацитет и висока селективност за адсорбция на CO_2 в присъствие на водни пари (2.9 - 4.4 mmol/g). Най-висок капацитет за адсорбция на CO_2 е установен за модифицирания с 1-метилпиперазин MCM-48 поради спецификата в структурата на носителя и по-силното взаимодействие между функционалните групи на адсорбента и CO_2 молекулите. Чрез ЯМР спектроскопия в твърда фаза е доказано образуването на хемисорбиран CO_2 под формата на бикарбонатен йон, както и наличието на физисорбиран CO_2. Пълната десорбция на CO_2 от модифицираните материали се постига при 60°C и не се наблюдава загуба на адсорбционни центрове след три последователни цикъла на адсорбция-десорбция. Лесната процедура за получаване и постигнатите високи степени на задържане на CO_2, съчетани с висока селективност, лесно освобождаване на задържания CO_2 и възможността за многократното им използване, прави разработените адсорбенти обещаващи материали за улавяне на CO_2.

3. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ЗВЕНОТО.

През изминалата година учените от ИОХЦФ са работили по изпълнението на **6** проекта, които са получили финансова подкрепа по договори и програми на ЕС и международни организации, Хоризонт 2020, европейски и международни програми и фондове.

В рамките на междуакадемични договори и спогодби са разработвани 12 проекта с редица страни – Румъния, Чехия, Унгария, Словакия, Сърбия, Полша, Египет и Виетнам. Учени от ИОХЦФ извършват съвместни научни изследвания и с Университет на Осло, Норвегия и Университет на Вагенинген, Нидерландия.

Най-значимият международно финансиран научен проект на ИОХЦФ, чието изпълнение започна през 2020 г. и продължи през 2021 г., е проект **EthnoHERBS "Опазване на Европейското биоразнообразие чрез оползотворяване на традиционното знание за билките за разработване на иновативни продукти", Програма Хоризонт 2020 на ЕК, H2020-MSCA-RISE-2018 (проект ID 823973) с координатор за ИОХЦФ проф. дхн Владимир Димитров, бюджет: 467835 лв.** Проектът има за цел да прилага систематични етноботанически проучвания и авангардни технологии в областта на химията на природните продукти, за да се използват пълноценно и ефективно традиционните знания и терапевтичния потенциал на лечебните и ароматни растения на Балканския полуостров; да се създават нови възможности за генериране на иновативни продукти и да бъдат решени текущите предизвикателства за околната среда. Като цяло, изпълнението на проекта „EthnoHERBS" се стреми да развие успешен и устойчив модел на международно и междусекторно сътрудничество, който ще допринесе за най-ефективното опазване и експлоатация на природните ресурси и развитието на иновативни продукти.

През 2021 г. в рамките на работната програма на проекта са реализирани 17 месеца командировки на колеги от ИОХЦФ в изпълнение на работни пакети 1 и 5. В работен пакет 1 са изпълнени задачи по обмен на опит с фирмата „Евро-Хърбс" в Нови Сад (производител на култивирани билки), събиране и обмен на етнофармакологични данни за лечебни растения с възможно действие срещу кожни страдания. В рамките на работния пакет ИОХЦФ предостави списък от лечебни растения, базиран на събраната информация. Чрез сътрудничеството с партньорите в проекта е направена селекция на лечебни растения с перспективи за приложение. Съставен е общ списък на лечебни растения, основно от региона на Югоизточна Европа и е планирана дейност за получаване на екстракти и химичното им профилиране. В рамките на работен пакет 5 е осъществен обмен на информация и опит по регулаторни въпроси при производството и регистрацията на крайни продукти, предимно козметични, в които се влагат екстракти от лечебни растения. Обменът на опит е осъществен на територията на фирмата Апивита в Атина.

През 2021 г. стартира работата по изпълнение на проект **"Повишаване на капацитета за обучение, изследвания и иновации в областта на използването на биовъзобновимите ресурси" Biomass4Synthons, H2020-WIDESPREAD-2020-5**, с ръководител доц. д-р Свилен Симеонов и бюджет **382045** лв. Стратегическата цел на проекта е да задълбочи сътрудничеството между Фармацевтичен факултет, Университет на Лисабон (FFUL), Португалия и ИОХЦФ-БАН. Двете институции принадлежат към развиващите се в научно отношение страни и се стремят да провеждат авангардни изследвания и обучение в областта на синтетичната органична химия. През последното десетилетие FFUL и ИОХЦФ-БАН развиха устойчиво сътрудничество в различни изследователски теми. Успехът на това сътрудничество формира основата за побратимяване чрез този проект, който има за цел да консолидира сътрудничеството, да подкрепи неговата устойчивост и да стимулира растежа му. За постигане на набелязаните цели проектът предвижда повишаване на нивото на научни изследвания в двете институции и повишаване на видимостта им в Европейската научна общност, чрез съвместна научно

изследователска работа с водещи академични институции в Европа, както следва – Парижки университет (Сорбона), Франция, Университета на Виена, Технически университет на Айндховен, Нидерландия и Университет на Болоня, Италия. През изминалата година в рамките на проекта са извършвани съвместни научни изследвания с FFUL и Технически университет на Айндховен, Нидерландия. Осъществени са два двумесечни изследователски обмена на млади учени (гл. ас. Мартин Равуцов и Мануела Ойкова) от ИОХЦФ-БАН в Технически университет на Айндховен.

В рамките на проект **ITN-MSCA „Разработване на нова генерация би-метални катализатори за получаване на енергия“ (BIKE) с ръководител от българска страна проф. дхн Таня Цончева** в лаборатории “ОРММ“ и „ХТГ“ бяха обучавани докторанти от Италия, Испания и Дания по проблеми, свързани с получаване и характеризиране на катализатори и носители на катализатори с приложение за получаване на водород чрез разлагане на метанол, течнофазово реформиране на етиленгликол и електрохимично разлагане на вода.

4. УЧАСТИЕ НА ЗВЕНОТО В ПОДГОТОВКАТА НА СПЕЦИАЛИСТИ.

Учените от Института предлагат обучение на студенти по магистърски програми, дипломанти, специализанти (студентски практики) и докторанти на високо научно ниво и съобразено с последните новости в съответните научни области.

През 2021 г. чл. кор. проф. дхн В. Банкова е участвала с лекционни курсове и е водила упражнения по Структурен анализ на органични съединения в магистърските програми на Факултета по химия и фармация – СУ ”Св. Климент Охридски“, а проф. дхн Вл. Димитров е участвал с лекционен курс и е водил упражнения по „Стереоселективен и асиметричен синтез“. Проф. дн П. Долашка, доц. д-р Ал. Долашки и доц. д-р Л. Велкова са водили лекционен курс, семинар и упражнения по Добра лабораторна и производствена практика в биоиндустриите в Биологически Факултет - СУ ”Св. Климент Охридски“. Гл. ас. д-р Й. Георгиев участва като хоноруван преподавател в провеждането на практически упражнения и семинари по биохимия в МУ-Пловдив. Проведен е също специализиран докторантски курс към Център за обучение-БАН: „Приложение на тънкослойна хроматография в анализа на растителни екстракти” с лектор проф. д-р А. Трендафилова.

През изминалата година в ИОХЦФ са се обучавали 8 докторанта, от които трима са по програма за редовно обучение, четирима - на самостоятелна подготовка, а един докторант е по програма за задочно обучение. Под ръководството на учени от Института са изработени 5 дипломни работи на студенти и са осъществени 7 стажа на студенти по Програма за Студентски практики - Фаза 2.

По ЗРАСРБ са избрани 1 доцент, 6 главни асистента и са защитени 2 дисертации за придобиване на научната степен „доктор на науките“ и 4 дисертации за придобиване на образователната и научна степен „доктор“. С участието на 12 учени от Института са изготвени 33 рецензии и становища по процедури за научни степени и академични длъжности и 2 рецензии на дипломни работи.

В края на тази година успешно завърши 3-годишен проект **RAISESEE**, финансиран от ЕС. В проекта партньори на ИОХЦФ-БАН бяха университети и индустриални компании от Италия, Белгия, Финландия, Естония, Украйна, Република Сръбска и Румъния. Под ръководството на проф. дн Таня Цончева, учените от лабораториите „ОРММ‘ и „ХТГ“ обучаваха над 55 ученици от 4 столични средни училища в областта на съвременните материали с приложение за устойчиво опазване на околната среда. По тези проблеми бяха изнесени 11 лекции от водещи учени от института, проведени бяха множество семинарни занятия и експериментални упражнения насочени към получаване на катализатори за разлагане на метанол и адсорбенти за пречистване на води от багрила на основата на активен въглен от различни отпадни продукти. В хода на обучението под ръководството на учени от лабораторията учениците работиха на съвременна апаратура за научни

изследвания и обработваха своите резултати. Съществен акцент в тяхното обучение беше разбирането на връзката между наука и индустрия, подкрепен с посещение в две индустриални предприятия и оживена дискусия, свързана с производството и опазването на околната среда. Пионерното участие на ИОХЦФ в подобен проект несъмнено постави мост за обучение на ученици от средните училища в лабораториите на института и създаване на умения и знания по проблеми, свързани с ефективното използване на суровините и екологията.

5. ИНОВАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНОТО И АНАЛИЗ НА НЕЙНАТА ЕФЕКТИВНОСТ

5.1. Осъществяване на съвместна иновационна дейност с външни организации и партньори, вкл. поръчана и договорирана с фирми от страната и чужбина.

През 2021 г. е издаден патент за група изобретения № 67 266 с наименование „**Антикорозионни хибридни галванични цинкови покрития съдържащи нанодисперсни частици полианилин, състав на електролит и метод за електроотлагане на покритията**“ с автори Надежда Табакова (ИОХЦФ), Николай Божков и Нели Божкова (ИФХ). Иновацията е създадена в сътрудничество с ИФХ – БАН. Очаква се интерес от фирми за внедряването му в производствен мащаб, тъй като изобретението може да бъде осъществено в стандартно оборудвани галванични цехове за поцинковане.

В рамките на научно-изследователската работа по проект ДН 01-14/19.12.2016 г. (2016-2021), на тема „Протеомен анализ на нови природни пептиди с антибактериална и противогъбична активност, изолирани от охлюв *Cornu aspersum*", финансиран от ФНИ е регистриран полезен модел със защитен № 4101/07.06.2021, с наименование „**Състав с антибактериално действие**“ с автори П. Долашка, Ал. Долашки и Л. Велкова от ИОХЦФ. Защитен е състав на базата на АМП-ди от слузта на градински охлюв *Helix aspersa* и въглеродни наночастици – нанодиаманти и въглеродни нанотръби. Съставът има доказан висок антибактериален и антиоксидантен ефект и ще намери приложение за комплексно въздействие при микробни инфекции, причинени от бактериите *Pseudomonas aureofaciens AP9, Brevibacillus laterosporus BT271* и *Escherichia coli NBIMCC 878*, резистентни към конвенционалните антибиотици.

В рамките на научно-изследователската работа на **Център за компетентност „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси от лечебни и ароматични растения за иновативни продукти“** е регистриран е полезен модел № 4056 U1/30.06.2021, с наименование „**Козметичен крем, съдържащ тополов прополис и мурсалски чай**“ с автори В. Банкова, Вл. Димитров, Б. Трушева и М. Каменова-Начева от ИОХЦФ. Полезният модел е създаден съвместно с ИП-БАН. Козметичният крем съдържа водно-алкохолни екстракти на тополов прополис, мурсалски чай (*Sideritis scardica*) и бяла пчелна вакса, има противовъзпалително, антибактериално, антимикробно, антиоксидантно действие, предпазва от ултравиолетови лъчи, овлажнява и омекотява кожата и намира приложение в козметичната индустрия, грижа за кожата.

Поддържани са следните **2 патента** със заявител ИОХЦФ „**Метод за пречистване на води от фино диспергирани масла**“ с автори В. Бешков, М. Афори, В. Мирчева, Н. Табакова, „**Електролит за електроекстракция на цинк с инхибитор на обратното разтваряне на цинка**“ с автори Ив. Кръстев, Ив. Иванов, Н. Табакова, Ив. Енчев, Я. Стефанов, Цв. Добрев, както и **полезният модел** със заявител ИОХЦФ „**Състав на водоразтворима форма на прополис**“ с автори П. Петров, Хр. Цветанов, П. Мокрева, В. Банкова, Б. Трушева, М. Попова.

В рамките на международен проект **RNF-19-15-00028** на тема „Създаване на нови ефективни съединения против лекарствено устойчива туберкулоза, въз основа на структурата на популацията на причинителя“, финансиран от Руския Научен Фонд с

участник доц. д-р Г. Добриков от ИОХЦФ е приета и одобрена заявка за патент в Руското патентно ведомство. Патентът се отнася до ново производно на 5-нитрофуран-2-карбоксилната киселина, притежаващо висока антитуберкулозна активност срещу мултирезистентни щамове на *M. tuberculosis* - получаване, изолиране, пречистване и охарактеризиране на съединението, както и изследвания относно *ин витро* активността му срещу серия мултирезистентни щамове.

Учени от ИОХЦФ (доц. д-р М. Крачанова, проф. д-р П. Денев, проф Хр. Крачанов, проф. дн П. Долашка, доц. д-р Ал. Долашки, доц. д-р Л. Велкова и проф. д-р Н. Петров) са автори на още 1 патент и 3 полезни модела, в които ИОХЦФ не е заявител.

5.2. Извършен трансфер на технологии и/или подготовка за трансфер на технологии по договор с фирми; данни за полученото срещу това заплащане; данни за реализираните икономически резултати във фирмите (работни места, печалба, производителност, дял на новите продукти в общия обем на продажбите и т.н.).

Продължава производството и успешното предлагане на разработените от екипа на проф. Петър Недков препарати за лечение на трудно заздравяващи рани - **Neprolysin и Post-Neprol** и техни производни. **Приходите от тяхната продажба през 2021 г. са 10848лв. без ДДС.**

В Лабораторията по биологично-активни вещества съвместно с фирма Стаекс Фарма ООД се произвеждат хранителни добавки от лечебни растения.

6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНОТО

6.1. Осъществяване на съвместна стопанска дейност с външни организации и партньори /продукция, услуги и др., които не представляват научна дейност на звеното/, вкл. поръчана и договорирана с фирми от страната и чужбина.

През 2021 г. в ЦЯМРС са извършени анализи на химически продукти и е предоставена ЯМР експертиза на предприятията Балканфарма АД Троян, Си Пи Ей Кем ООД, ЕТ Игнат Игнатов - Тетевен, Купро ЕООД, Елаците Мед, Побелч-Гле и др. на обща **стойност 29 453 лв. без ДДС**. По заявка на фирма Антибиотик Разград АД в Центъра по ЯМР спектроскопия към ИОХЦФ, БАН е проведено съвместно научно изследване на серия от лекарствени продукти, представляващи капки за очи, с цел да се установи дали активните вещества се намират в мицелите образувани от повърхностно-активни вещества (ПАВ), използвани за приготвяне на капките и да се даде оценка за количеството на активното вещество в обемната фаза и в мицелите. Предоставената ЯМР експертиза и аналитичен протокол са използвани от фирма Антибиотик Разград АД като част от документацията предоставена на международна експертна комисия за сертифициране на продуктите.

В Лаборатория по инструментална хроматография и мас спектрометрия (ГХ/МС) са проведени анализи за фирмите Гален-Н, Атмосфер и др. на обща стойност **4200 лв. без ДДС**.

През 2021 г. в ЛБАВ са извършени анализи и услуги за следните фирми и университети: Биохерба Р ООД, Екотехнологии 21 ДЗЗД, Комерг Груп ЕООД, Силтона ЕООД, УХТ – Пловдив на обща **стойност 2306 лв. без ДДС**.

В лаб. ХЛ са проведени анализи на масла и мазнини за фирмите ЕТ Декоратор-Дориан Христов и Венъс Роузес.

В лаб. ХПВ по заявка на българските фирми Роял Бийс и Апиорганик и фирма Поленержи от Франция са проведени серия от анализи с цел определяне на качеството на прополис и прополисови тинктури.

В лаб. ХТГ е извършен анализ (пепел, влага, съдържание на летливи съединения, определяне на специфична специфична повърхност чрез нискотемпературна адсорбция на азот, определяне на адсорбционна способност спрямо йод от воден разтвор) на образци

активен въглен, получени от отпадна биомаса (черупки от лешници, костилки от череши, сливи и др.) по заявка на фирма Маги ООД.

6.2. Отдаване под наем на помещения и материална база.

Фирма	**Сума в лв. без ДДС**
Симона Халачева	1619
Ултима Ремап БГ ООД	855
ВНГ Груп ООД	50363
ВНГ Груп ООД – наем срещу ннвестиция	33333
Солво ООД	2324
Амала бюти ООД	1549
СМС България ООД	1760
Теленор България ЕАД, ЦЕТИН България ЕАД	9600
Арбю Козметикс ЕООД	4144
Балев Корпорейшън ЕООД	5633
Акредитив финанс ЕООД	541
Биохаус ЕООД	81
ГЪЛЪБ-87 ЕООД	1056
Побелч Гле ООД	7463
Биовет АД	5868
Кермит ЕООД	1802
Пролаб инструментс ЕООД	9000
Саба инженеринг ООД	1457
АУТОМАТ КАФЕ ООД	352
Планед 12 ООД	2711
Меа 360 ЕООД	3325
Бултехноплюс ООД	4506
Сторк енд спароу ЕООД	542
Профикс Системс ООД	1549
Енигма Арт ЕООД	1276
Карино Натурал ЕООД	5633
Общо	**158342**

Заплащане към НАП за данъци по ЗКПО за начислени наеми – **5991** лв. и в партида "Развитие" при БАН - Администрация са преведени **48640** лв. Има неполучени наеми и възстановени консумативи от фирма ВНГ Груп за 62000 лв. За тях ще бъде направено споразумение за разсрочване на дължимите суми.

6.3. Сведения за друга стопанска дейност.

Приходите в размер на 51789 лв. от сервизни дейности и продажба на препаратите на проф. П. Недков са разпределени по лаборатории и анализи, както следва:

Лаборатория/дейност	**Сума без ДДС, лв.**
Център по ЯМР спектроскопия	29453
Непролизин	10848
ИЧ спектроскопия - М. Рогожеров	847

Елементен анализ /Р. Тодорова/	750
Елементен анализ /П. Денев/	2306
Прополис – Милена Попова	756
Лаб. ГХ/МС	4200
Молекулна спектроскопия –Б. Стамболийска	815
Химия на природните вещества	20
Химия на липидите	858
Елаците –мед АД-Ваня Куртева	936
Общо	**51789**

Получени средства по договори с български фирми и университети – 5855 лв. без ДДС:

Фирма, организация	**Сума, лв. без ДДС**
ОРГАНИК БИЙ ПРОДУКТС ООД	776
УХТ – Пловдив	945
АПИ ОРГАНИК ЕООД	60
АПИ ОРГАНИК ЕООД-ДДС-мито	132
Фирма Роял Бийс ЕООД	475
Поленержи-В. Банкова	2077
Хромасист ООД-М. Каменова	1270
ВОДОРОДНИ ТЕХНОЛОГИИ ЕООД – М. Попова	120
Общо	**5855**

7. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ФИНАНСОВОТО СЪСТОЯНИЕ НА ЗВЕНОТО ЗА 2021 г.

Бюджетната субсидия за 2021 г. е 3251011 лв., с направената до 30.09.2021 г. актуализация. Своевременно са подавани писма – искания за възстановяване на средства за обезщетения по чл. 222 и чл. 224 от Кодекса на труда, за възстановяване на суми за данък върху недвижимите имоти и таксата за битови отпадъци, за процедури и защити по ЗРАСРБ, за редовни и допълнителни стипендии и други разходи. Получена е справка за предстоящата актуализация на бюджета с още 19507 лева (6160 лв. за процедури и защити и 13347 лв. – обезщетение по чл. 222 от КТ).

Допълнително привлечените средства по проекти и договори са:

Проекти и договори	**Сума, лв.**
Договори с ФНИ (като водеща организация – 638767 лв. (с вкл. 139170 лв. по проект Вихрен; за партньорски организации - 62981 лв.) (като партньорска организация – 93000 лв.)	668786
Проекти по Хоризонт 2020	285687
Проект ИНФРАМАТ	131520
Национални Научни Програми	504619
Международни проекти – ЮНЕСКО, Луи Пастьор и др.	41989
Договори по междуакадемичен обмен	3545

Фирми, университети и институции от страната	5855
Сервизни анализи и непролизин	51789
Общо	**1693790**

В рамките на участието ни в изграждане на два Центъра за компетентност и Център за върхови постижения са изразходвани допълнително средства на стойност – 3529545 лв. за изграждане на нова научна инфраструктура и провеждане на научно-изследователска дейност:

Проекти	Сума, лв
Център за компетентност „Устойчиво оползотворяване на био-ресурси от лечебни и ароматични растения за иновативни продукти“ОПНОИР – BG05M2OP001-1.002-0012, (получени са 5319185 лв., вкл. трансфери за партньорите АБИ-28923лв., ИП-БАН-792522лв., СУ-1044214лв.)	3375368
Център за компетентност „Чисти технологии за устойчива околна среда – води, отпадъци, енергия за кръгова икономика“ ОПНОИР – BG05M2OP001-1.002-0019	133794
Център за върхови постижения „Мехатроника и чисти технологии“ ОПНОИР – BG05M2OP001-1.001-0008	20383
Общо	**3529545**

Средствата, с които сме разполагали през 2021 г. и осигурили цялостната издръжка на ИОХЦФ са общо 8632688 лв., от които 3251011 л в . бюджетна субсидия, 1693790 лв. допълнително привлечени средства по проекти и договори, 158342 лв. от наеми и 3529545 лв. по ОПНОИР. Допълнително привлечените средства по проекти и договори са 62.3 % от получените през 2021 г. средства в Института.

2582356 лв. от бюджетната субсидия са усвоени за фонд “Работна заплата” и осигурителни вноски за щатния състав. Останалите средства от бюджетната субсидия са изразходвани за заплащане на болнични за сметка на работодателя, за процедури по ЗРАСРБ, за обезщетения по КТ, електроенергия, топлоенергия и вода, местни данъци и такси. Недостигът за заплащане на тези разходи се финансира от собствените средства на Института.

Всички останали разходи: ремонти и поддръжка на инфраструктурата на сградата, телефонни разходи, абонаментно поддържане (пожаро-известителна инсталация, копирна техника, асансьори, телефонна централа, извозване на отпадъци и др.) застраховки и разходи за служебен автомобил, стъклодувната работилница и сървър на Института, канцеларски и хигиенни материали, пощенски и куриерски услуги и др., са платени от собствени приходи на ИОХЦФ.

Във връзка с изпълнение на проектите, които ИОХЦФ координира или участва като партньор, са проведени 1 1 обществени поръчки на обща стойност 2821361 лв., като са сключени 22 договора с 13 фирми. В изготвяне на техническата документация към ОП активно са работили повече от 10 учени от Института.

8. ИНФОРМАЦИЯ ЗА НАУЧНИЯ СЪВЕТ НА ЗВЕНОТО

проф. д-р Антоанета Трендафилова, ИОХЦФ-БАН
доц. д-р Бистра Стамболийска, ИОХЦФ-БАН
доц. д-р Бойко Цинцарски, ИОХЦФ-БАН

доц. д-р Боряна Трушева, ИОХЦФ-БАН
проф. д-р Ваня Куртева, ИОХЦФ-БАН
чл.-кор. проф. дхн Вася Банкова, ИОХЦФ-БАН
проф. дхн Владимир Димитров, ИОХЦФ-БАН
проф. д-р Деница Панталеева, ИОХЦФ-БАН
доц. д-р Калина Алипиева, ИОХЦФ-БАН
проф. дн Маргарита Попова, ИОХЦФ-БАН
доц. д-р Мая Гунчева, ИОХЦФ-БАН
проф. д-р Милена Попова, ИОХЦФ-БАН – председател на НС
проф. д-р Нели Косева, ИП-БАН
проф. д-р Николай Василев, ИОХЦФ-БАН
проф. д-р Павлета Шестакова, ИОХЦФ-БАН
проф. дн Павлинка Долашка, ИОХЦФ-БАН
проф. д-р Петко Денев, ИОХЦФ-БАН
проф. дхн Светлана Симова, ИОХЦФ-БАН
доц. д-р Светлана Момчилова, ИОХЦФ-БАН
доц. д-р Свилен Симеонов, ИОХЦФ-БАН
проф. дхн Таня Христова, ИОХЦФ-БАН

- Дата на избиране на съвета - 05 март 2020 год.

https://www.orgchm.bas.bg/struktura.html

9. КОПИЕ ОТ ПРАВИЛНИКА ЗА РАБОТА В ЗВЕНОТО.

https://www.orgchm.bas.bg/dokumenti/obshti/IOCCP/Pravilnik_deinost_IOCCP.pdf

10. СПИСЪК НА ИЗПОЛЗВАНИТЕ В ОТЧЕТА И ПРИЛОЖЕНИЯТА КЪМ НЕГО СЪКРАЩЕНИЯ

ИОХЦФ – Институт по органична химия с Център по фитохимия
ЯМР – Ядрено-магнитен резонанс
ФНИ – Фонд Научни Изследвания
МОН – Министерство на образованието и науката
ЦЯМРС – Център по ЯМР спектроскопия
Лаб. ОСС – Лаборатория „Органичен синтез и стереохимия“
ЛБАВ – Лаборатория „Биологично активни вещества“
Лаб. ОРММ – Лаборатория „Органични реакции върху микропорести материали“
Лаб. ХПВ – Лаборатория „Химия на природните вещества“
Лаб. СОА – Лаборатория „Структурен органичен анализ“
Лаб. ХЛ – Лаборатория „Химия на липидите“
Лаб. ХТГ – Лаборатория „Химия на твърдите горива“