

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

ГОДИШЕН ОТЧЕТ ЗА 2022 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 подходи за изучаване на природни продукти.

В резултат на научно-изследователската дейност в Института през 2022 г. са постигнати следните резултати по направления:

НАПРАВЛЕНИЕ „ПРИРОДНИ И СИНТЕТИЧНИ БИОЛОГИЧНО АКТИВНИ СЪЕДИНЕНИЯ“

- Синтезирани и охарактеризирани са серии от хетероциклени съединения като ацил пиразолони, аминокиназолини, перимидини и др.
- Разработени са нови тирозинкиназни инхибитори със значително подобрени фармакологични свойства и селективност.
- Синтезирани са разнообразни серии от съединения и е изследвана тяхната ин витро активност срещу ентеровируси и туберкулоза.
- Получени са серии от цианинови, стирилови и нафталимидни багрила с приложение като флуоресцентни биомаркери.
- Проведена е трикомпонентна Vetti реакция, водеща до получаване на хирални съединения с приложение като катализатори в асиметрични каталитични реакции.
- Установен е съставът на лечебни растения от род *Artemisia*, *Seseli*, *Angelica*, *Alchemilla* и *Pandanus*. Изолирани са серия от съединения, сред които един нов кумарин, а два алкалоида са нови за вида *P. tectorius*. Чрез Vox–Behnken design са оптимизирани условията за микровълнова екстракция на фенолни съединения от *Inula britannica*. С продукцията на фенолни съединения и ендогенни фитохормони е оценено влиянието на еволюционното развитие на видове *Hypericum*.
- Чрез ЯМР профилиране е установен съставът на екстракти от диворастящ, ин витро култивиран и екс витро адаптиран *Stachys thracica* (балкански ендемит), а чрез ВЕТХ е определено количеството на стевиолови гликозиди в ин витро култури на *Stevia rebaudiana*.
- Установен е съставът на прополис от медоносни и 6 вида безжилни пчели. За първи път от прополис са изолирани макроциклични дитерпени (вкл. ново природно съединение), характерни за видове *Euphorbia*.

- Доказани са антиоксидантна, антимицробна и противовъзпалителна активност за растителни екстракти (вкл. получени чрез природни дълбокоеквентични разтворители), фракции и изолирани съединения.

- Обобщена е наличната до момента информация за методите, прилагани за регио- и стереоспецифичен анализ на триацилглицероли. Проследено е развитието на методологията във времето с усъвършенстването на използваната апаратура, и са представени скорошни постижения на дву- и многомерни методи, използвани като инструменти в липидомиката.

- Разработени са корелационни модели за анализ на основни компоненти в проби българско розово масло чрез спектрометрия в близката инфрачервена област и хемометрия.

- Разработена е методика за количествен анализ чрез използване на вътрешен стандарт на проби екстракти от феромони на *Vipera ammodytes* с цел изследване на феромонната активност.

- Установено е, че маслата от γ -облъчени ядки показват по-кратък индукционен период в сравнение с тези от необлъчените. Добавянето на α -токоферол има ефект само в смес(и) със синергист като аскорбил палмитат. Ефективността на палмитата зависи изцяло от неговата концентрация и съотношение спрямо нативните токофероли.

- За първи път е изследван ефектът на облъчването с γ -лъчи върху фитохимичния състав на шипкови плодове.

- За първи път са изследвани два дрождеви (*Vishniacozyma victoriae* и *Tremellomycetes* sp.) щама от Антарктида за синтез на екзополизахариди. Установено е, че единият полизахарид е по-хомогенен и е от β -мананов тип, а вторият – от β/α -хетеромананов и β -глюканов тип.

- Установено е, че ксилоолигозахаридите, изолирани от царевица проявяват *in vitro* антитуморна активност срещу клетки на хистиоцитен лимфом.

- Чрез ЯМР химично профилиране са установени разлики в състава на екстракти от иглички от смърч и от ела, както и от дървета, растящи на различни надморски височини.

- Посредством ^{13}C ЯМР спектри са сравнени основните органични компоненти в мед от мексикански безжилни пчели и от български европейски пчели.

- Чрез ЯМР спектрални техники е доказана структурата на нови хидразонови производни с невропротективен ефект и с антимицобактериални свойства, както и на нови пептидни производни на галантамина, предназначени за превенция и лечение на болестта на Алцхаймер.

НАПРАВЛЕНИЕ „ФУНКЦИОНАЛНИ МАТЕРИАЛИ, КОМПЮТЪРНО МОДЕЛИРАНЕ И ТЕХНОЛОГИИ“

- Установено е, че формирането на дефекти в желязо-цериевооксидните композити, обезпечава висока дисперсност на локализираните в близост до дефектите никелови частици.

- За първи път е показано, че каталитичната активност и стабилност при висока температура на Ni-Fe-Ce оксидните композити се подобрява под влияние на реакционната среда, създадена при разлагане на метанол, поради капсулиране на

никеловите частици във въглеродни нанотръбички и стабилизирането им във фино дисперсно състояние. Демонстрирано е, че благодарение на този ефект, използваните в разпадането на метанол катализатори са много активни и в електрокаталитичното получаване на водород от вода, което определя потенциалното значение на получения резултат за развитие на „кръговата икономика“.

- Установено е, че Ni- и Ru-модифицирани ZSM-5 зеолити са високоактивни катализатори за оползотворяване на CO₂ чрез неговото хидриране до метан. Количеството на Ni и Ru и последователността на модификацията с два метала са от ключово значение за получаването на биметални катализатори с подходящи физико-химични характеристики. 10Ni5Ru/ZSM-5 катализаторът показва най-висока активност и висока селективност за образуване на метан, достигайки равновесна конверсия и 100% селективност при 400 °C, което се свързва с формирането на фино дисперсни наночастици от никел и рутенийев оксид върху външната повърхност на зеолита с доминиране на никеловите частици. Установена е висока стабилност и добра рециклируемост за биметалния 10Ni5Ru/ZSM-5 катализатор.

- Получените от промишлени отпадъци активни въглени и въглеродна пяна са успешно използвани за отстраняване на органични замърсители и Ni йони от вода.

- Синтезирани са Fe-Cr и Ce-Fe-Ni композити от промишлени отпадъци и използвани моторни масла, които са успешно приложени за синтез на водород чрез разлагане на метанол и електролиза на вода.

- Синтезирани и изследвани са хибридни графен/FeO материали.

- Изследвани са геохимичните особености на модифицирани въглеродни аргилити от Марица Изток.

- Изследвани са кобалт (III) корин комплексите циано- и хидроксикобаламин (витамин B12), като фотосенсибилизатори за фотодинамичен метод. Доказана е антитуморна активност за кобаламини при туморни клетъчни линии с резистентност. Установено е, че фотодинамичното действие е конкурентен механизъм на въздействие.

- Разработени са нови подходи и методи за изолиране и пречистване на биологично активни вещества от хемолимфата на черноморски охлюв *Rapana venosa* и градински охлюви *Helix lucorum* и *Helix aspersa*.

- Чрез тандем масспектрометрия са установени първичните структури на редица нови пептиди от слузта и хемолимфата на градински охлюви *Cornu aspersum* и *Helix lucorum*, а чрез софтуер iAMPpred е прогнозирана антимикробната им активност. Установени са пептиди с висока антибактериална активност, както и такива с противогъбична и антивирусна активност.

- Проведени са флуоресцентни изследвания на конформационната стабилност на пептиди при различни концентрации на карбамид и гуанидин хидрохлорид и промяна на pH на средата в широк диапазон и са потвърдени антимикробните свойства на дву- и три-компонентни пептидни смеси.

- Разработени са методи за получаване на биологични Ag-, Cu- и Zn-наночастици, редуцирани с екстракти от лайка и живовляк при различни условия.

- Проведено е теоретично изследване на местата за свързване и механизма на инхибиране на волт-регулирани натриеви канали от N-модифицирани аналози на хеморфини, обясняващо наблюдаваната им антиконвулсивна активност.

- Получени са нови 1,3-дизаместени бензимидазол-2-тиони с подобрени невропротективни свойства чрез включване на арилни фрагменти с фенолни и метокси групи.

- Установена е обещаваща противоракова активност на редица нови бензимидазолони и тиенопиримидинови производни.

- Установена е добра корелация между изчислените квантово-химични афинитети на полихетероциклени ароматни молекули (синтезирани в ИОХЦФ) към гуанинов квадруплекс Г4 и тяхната експериментална активност (IC₅₀) срещу меланома.

- С помощта на докинг и квантово-химични методи е установено значително инхибиране на седем неструктурни протеина на SARS-Cov-2 от съединения, влизащи в състава на проантоцианидинова фракция от растението каменен лотус.

- Теоретично са изследвани нелинейните оптични и полупроводниковите свойства на серия незаместени и заместени ацени и фенацени с цел потенциалното им приложение в оптоелектрониката и е дискутирана ролята на параметризацията на различните функционали в теорията на матрицата на плътността за определяне на молекулните характеристики.

- Чрез ЯМР спектроскопия в твърда фаза е охарактеризирана структурата на нови материали на базата на зеолити с потенциално приложение като катализатори или адсорбенти на CO₂. Въведени са двумерни MQMAS експериментални ЯМР техники за изследване квадрупулни ядра, с което са разширени възможностите на ЦЯМРС за изследване на нови материали.

- Извършени изследвания за фотоактивиране на реакция на кръстосано свързване чрез методи за *in situ* LED ЯМР.

Получените резултати са в съответствие с научните приоритети на ИОХЦФ и отговарят на приетите тематички 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**:

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

- Установена е селективна цитотоксичност на различни производни на хемоцианините от *Rapana venosa* (RvH) и *Helix lucorum* (НН) върху клетъчна линия Т24 на рак на пикочния мехур и нормална уротелна клетъчна линия НL 10/29 в сравнение с доксорубицин. Третирането с функционалната единица βс-НН-h демонстрира най-висок антипролиферативен ефект (подобно на доксорубицин) и води предимно до апоптотични и в по-малка степен до късни апоптотични или некротични промени в туморните клетки. Въз основа на протеомния анализ на 2D-PAGE, маспектрометричните изследвания и биоинформатиката, са идентифицирани редица протеини в раковата клетъчна линия Т24

с ключово значение и значителна промяна на експресията си след третиране с активния хемоцианин. Това е първото изследване за експресия на протеин в T24 човешки ракови клетки на пикочния мехур под действието на хемоцианин - ФЕ βс-НН-н.

- Получени и химически охарактеризирани са кисели арабиногалактани от тъканни култури на родопски силивряк (*Haberlea rhodopensis* Friv), както и пектини от листата на кръвен здравец (*Geranium sanguineum* L.). От листата и корените на лечебното растение кръвен здравец са изолирани и охарактеризирани водно-екстрахируеми пектинови полизахариди с ясно изразени *ex vivo* и *in vitro* имуностимулиращи свойства, които потискат образуването на биофилми от патогенни щамове на *Escherichia coli*, *Streptococcus mutans* и *Salmonella enterica*.

- В плодните тела на ядливата гъба сърнела (*Macrolepiota procera* Scop. Singer) е установено съдържанието на α-D-глюкани, хетеро-β-D-глюкани с 1,4-β-D-Glcp и 1,4,6-β-D-Manp структури, и α-L-фуко-2-(1,6)-D-галактани, които показват пребиотична активност при смесени култури от *Clostridium beijerinckii* и *Lactobacillus* sp. ZK9, изолирани от български ферментирали храни.

- Проучен е пробиотичният потенциал на щам *Lactobacillus helveticus* 2/20 и е определена способността му да инхибира растежа на някои хранителни патогени.

- Изследван е ефектът от добавяне на лечебни растения върху химичния състав, антиоксидантната активност и интензитета на цвета на функционални напитки от арония. Установено е, че добавката на лечебни растения обогатява напитките с фенолни съединения и повишава антиоксидантната им активност с до 52%. В същото време поради копигментация, билковите полифеноли увеличават интензитета на цвета на напитките и забавят тяхната деградация по време на съхранение.

- Извършени се химични, физикохимични и спектрални анализи на екзополisahариди, образувани от дрожди, изолирани от Антарктида, в процеса на тяхното непрекъснато дълбочинно култивиране.

- Анализирани са мастно-киселинният състав и окислителната стабилност на масла от семена на 52 генотипа камелина (*Camelina sativa*) като потенциални суровини за хранителни и технически цели.

- Чрез газова хроматография-маспектрометрия е проведено детайлно химично профилиране на лавандулово абсолю (*Lavandula angustifolia*). Получените резултати показват, че лавандуловото абсолю има състав близък до този на лавандуловото етерично масло и може да се използва в козметичната и фармацевтична 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).

- Разработена е формулировка на основата хибриден носител, изграден от мезопорест силикат с магнитни наночастици, натоварен с куркумин и обвит с липиден слой, която показва отлични качества за контролирано освобождаване на биоактивното вещество.

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

- Изследван е остатъкът след филтруване при получаване на немлечна напитка на основата на елда. Анализът с ВЕТХ показва, че фенолният профил на метанолен екстракт

от страничния продукт е по-разнообразен от този на целевия продукт. Общото фенолно съдържание и антиоксидантната активност на остатъка са също много по-високи.

- Чрез оползотворяване на въглищна пепел са получени зеолити с високо съдържание на Fe, които имат приложение като ефективни адсорбенти и катализатори.

- Чрез двуетапен процес на улавяне на CO₂ върху модифицирани мезопорести силикати или зеолити и последващо метаниране на CO₂ в присъствие на катализатор е предложен подход за намаляване на вредните емисии от CO₂.

- Получени са въглеродни материали и композити с приложение за пречистване на води и въздух от органични замърсители, метални катиони, вируси и бактерии.

Съвременни енергийни източници и енергийно ефективни технологии.

- Осъществено е оползотворяване на отпадъци от полимери и биомаса, твърдо отпадно гориво, отпадъци от преработката на горива и др. чрез тяхната конверсия до ценни въглеродни материали – 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 отпадъчна биомаса в присъствие на бифункционални зеолитни катализатори е получен гама-валеролактон, използван като добавка в горивата;

- Разработен е оригинален подход за капсулиране на модифицирани с Ni Ce-Fe оксидни мезопорести материали във въглеродни влакна за електрохимично получаване на водород.

Мехатроника и чисти технологии.

- Разработени са адсорбенти на базата на зеолити с подходяща структура за пречистване на води от метални йони, които след улавяне на металните йони се използват като високоефективни катализатори за елиминиране на летливи органични съединения.

- Разработени са зеолитни и хибридни катализатори за превръщане на платформени молекули (алкил феноли, левулинова киселина), получени при първичната преработка на отпадъчна биомаса до ценни химикали и горива.

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

- Изяснени са материалите за изработка, художествена украса, консервационна намеса и настъпили промени при фолклорен текстил и сравнителни текстилни еталони от Национален Етнографски музей, ИЕФЕМ-БАН; живописни произведения от фонда на Националната галерия; стенописи от Гробищната църква, Рилски манастир; църковни стенописи и икони, обект на реставрация в Национална художествена академия, Исторически музей – Шумен и частни организации.

- Анализирани са художествени артефакти на стенописи-алафранга от възрожденска къща в гр. Пловдив и образец от стенопис – къща „д-р Ст. Чомаков“, гр. Пловдив чрез ИЧ спектроскопия.

В традиционното класиране на институциите SCImago (SIR) за 2022 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 **четвърто** място в общата класация на българските научни институции (след БАН, Тракийски Университет и Университет по химични технологии и металургия). 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 2022 г. учените от ИОХЦФ са публикували **132** статии, от които **119** са в списания, индексирани в WoS/Scopus. Публикациите в списания от категории Q1 и Q2 като те са съответно **60** и **25** или **63.0 %** от общия брой публикации като 1 статия е в списание оглавяващо ранг листата **Applied Surface Science (IF= 7.4)** (автор от ИОХЦФ – гл. ас. д-р **Иванка Стойчева**). В сравнение с предходните години през 2022 г. се е увеличил броят на публикациите от категория Q1 в списания с **IF ≥ 6 (общо 15)**. От тях, 2 статии са в списания с **IF > 10: Carbon (IF=11.307)** с автори от ИОХЦФ ас. **К. Росмини, проф. Т. Цончева, доц. М. Димитров, проф. Б. Цинцарски** и **ACS Applied Materials & Interfaces (IF=10.383)** с автори от ИОХЦФ проф. **Т. Цончева, ас. К. Росмини, Р. Иванова**.

Публикуваните резултати на учените от ИОХЦФ са получили **3853** цитата в научни издания, от които **3296** са цитирания в списания индексирани в WoS/Scopus (**85.5 %** от общия брой цитати).

Член-кор. проф. дхн **Вася Банкова**, проф. д-р **Милена Попова** и доц. д-р **Боряна Трушева** са сред първите 2% на най-цитираните учени в света 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.

Двама учени от ИОХЦФ-БАН получиха награда „**Питагор**“ за принос в науката на Министерството на образованието и науката. В областта на природните и инженерните науки беше отличена проф. дн **Маргарита Попова**, а наградата за утвърден учен в областта на науките за живота и медицината е за проф. дн **Павлина Долашка**.

В края на 2022 г. **53** изследователи от ИОХЦФ – БАН получиха допълнително трудово възнаграждение за авторство или съавторство на научни публикации в списания от категории Q1 и Q2, реферирани или индексирани в световните бази данни WoS/Scopus за първи етап на НП “Стимулиране на публикационната активност в авторитетни международни научни списания и отворен достъп до научна информация“. Програмата е в изпълнение на Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2017-2030 (специфична цел 5, дейност 1) и на Националния план за развитие на инициативата за отворена наука в Република България (дейност 3). Сумата, получена по тази програма е 62821.84 лв.

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 1 433 201 лв., включително трансфери за партньорите. През 2022 г. в рамките на ИОХЦФ-БАН са провеждани дейности като подготовка на техническа документация за обявяване на обществена поръчка за закупуване на материали и консумативи, на обществена поръчка за дооборудване на ЯМР спектрометрите, закупени за ЦК, координиране дейността на партньорите за изпълнение на научните и административни задачи. Изпълняват се задачи от научния план на проекта и са постигнати следните по-важни резултати:

- Чрез свръхкритичен въглероден диоксид са получени екстракти от тученица (*Portulaca oleracea*), които, съвместно с колеги от Института по полимери-БАН успешно са включени във влакна на основата на биоразградими полимери с висока антиоксидантна активност. Получените материали са обещаващи за лечение на раневи инфекции, както и в регенеративната медицина и тъканното инженерство.

- Получени и фитохимично охарактеризирани са екстракти от лечебни растения, които са предоставени на партньорите в Центъра за компетентност за оценка на тяхната биологична активност и за разработване на полезни модели.

През октомври 2022 г. беше официално открита и **новата лаборатория по ЯМР спектроскопия**, оборудвана с апаратура, финансирана от проект **Център за компетентност**.

През 2022 г. по проект за изграждане на **Център за върхови постижения „Мехатроника и чисти технологии“** са получени 100 853 лв. След успешно проведена ОП е сключен договор с фирма Инфолаб за доставка, монтаж и въвеждане в експлоатация на оборудване за надграждане на ЯМР спектрометър Bruker Avance II+ 600 MHz, което ще бъде доставено в средата на следващата година. Проведени са научни изследвания със закупеното ново оборудване в съответствие с научната програма на проекта. Назначени са 2 нови изследователи с научна степен. Получени са следните по-важни научни резултати:

- Изследван е потенциалът на природни (клиноптилолит) и синтетични (зеолит 4А) зеолити като адсорбенти за пречистване на отпадъчни води. И за двата вида зеолити селективността за адсорбция се променя в следния ред $Fe^{3+} < Cu^{2+} < Mn^{2+}$. Термично обработените (калцинирани) зеолити след улавяне на металните йони са използвани като високо активни катализатори за пълно окисляване на толуен. Проведените експерименти показаха висока каталитична активност за натоварените с метали клиноптилолит (96% превръщане при 510°C) и по-ниска активност за натоварените с метали зеолит 4А (60% превръщане при същата температура). Натоварените с метали материали на базата на клиноптилолит показаха по-висока стабилност, която се дължи на наличието на

достъпни металоксидни наночастици с фина дисперсност. Предимството на природните зеолити е, че те са по-евтини и лесно достъпни.

- Получени са манган и цериеви оксидни материали с различно съотношение Ce/Mn чрез съвместно утаяване и прилагане на хидротермална техника в присъствие на темплейт. Получените катализатори са показали висока активност в реакция на пълно окисление на етилацетат, използван като моделно летливо органично съединение. Установено е, че взаимодействието между наночастиците от манган и цериев метален оксид се осъществява чрез интерфейсен слой от изоморфно заместени или включени в цериева решетка манганови йони в различно окислително състояние. Физикохимичните данни доказват, че този междинен слой стабилизира "обвивка" от фино диспергирани CeO_2 върху "ядрото" от MnO_x , което играе решаваща роля в каталитичния процес.

- Установено е, че монометални (Cu, Ni) и биметални (Cu-Ni) катализатори, нанесени върху зеолит-мезопорести силикатни композити са активни за хидриране на левулинова киселина, получена от лигноцелулозна биомаса, до γ -валеролактон. Сред изследваните катализатори, CuNi-ZSM-5/KIT-6 показва най-висока конверсия на левулинова киселина (100%) и добив на γ -валеролактон (81%) при 250 °C. Високата конверсия на левулинова киселина и добив на γ -валеролактон може да се отдаде на високата специфична повърхност на композитния материал, на баланса между зеолитните кисели и металните Cu-Ni центрове с висока дисперсност. Освен това, катализаторът CuNi-ZSM-5/KIT-6 показва висока стабилност след 24 часа реакционно време, с добив на γ -валеролактон над 80% и без промяна в структурата на носителя и дисперсността на металните наночастици.

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 2022 г. са получени и изразходвани средства за 189 795 лв. Получени са следните по-важни резултати:

- Получена е нова информация за състава на 9 минерални извора в района на Велинград чрез определяне на макроелементите Mg, K, Ca и S, както и редица микроелементи като Au, Se, W, B, Mo, Sb, Te и др. Установени са специфични кристални структури, някои от които със сулфатна природа, посредством анализ на сухи остатъци на водни проби от минералните извори с Раманова спектроскопия и микроскопия. Анализът чрез 12.5% SDS-PAGE, установи протеини с MW 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 264 320 лв. за 2022 г. Закупен е нов апарат за измерване на плътност (лабораторен денситометър) с вграден термостат, модел Anton Paar DMA 4100M, закупен е софтуерен пакет и лицензи за програмата ACDLabs за анализ на ЯМР и мас-спектрални данни, извършени са дейности по ремонт, поддръжка и профилактика на апаратурата, поддържана от проект ИНФРАМАТ, закупени са консумативи и материали необходими за подготовка на пробите за анализ. Въведена в експлоатация е електронна платформа

(E-NMR Service), за автоматизирано управление и организация на сервизната дейност на Центъра по ЯМР спектроскопия.

През 2022 г. бяха проведени заключителни изследвания и беше обобщена работата по изпълнение на **Национална научна програма „Нисковъглеродна енергия за транспорта и бита (ЕПЛЮС)“**, ДО1-214/28.11.2018 (2018-2022). През годината са получени следните по-важни резултати:

- Получени са зеолити от въглищна пепел, за които е установен висок капацитет за адсорбция на CO₂ в интервала от 1.5-4.3 ммол/г. Най-висока адсорбционна способност на CO₂ е установена за зеолита с високо съдържание на Ca²⁺ и Fe^{2+/3+} йони и висока специфична повърхност. Резултатите показват, че след 30 мин десорбция при 80 °С, адсорбентите напълно възстановяват адсорбционния си капацитет.
- Проведени са успешни изследвания насочени към получаване на високо реактивни радикали за свързване на CO₂, и последващо куплиране с аминали като “маскирани” алдехиди водещо до получаването на ценни алфакето карбоксилни киселини.

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) са получени следните по-важни резултати:

- Получена е информация за механизма на цитотоксично действие на фракция с Mw 50-100 kDa от хемолимфата на морски охлюв *Rapana venosa* срещу гъбния щам *Penicillium griseofulvum*, чрез протеомен анализ на 2D-гел електрофореза и биоинформатика. Идентифицирани са редица протеини, свързани с оксидативния стрес и процесите на детоксикацията, които променят значително експресията си в резултат на действието на активната фракция.
- Въз основа на резултатите от проведен протеомен анализ на 2D-PAGE и биоинформатика, е получена информация за механизма на невропротективно действие на екстракта от слюзта на *H. aspersa* върху кортекса и хипокампа на плъхове в експериментален модел на индуцирана от скополамин деменция от типа на Алцхаймер. Определени са редица протеини с ключова роля като: α- и β- тубулини, малат дехидрогеназа, кофилин-1, калбиндин В, Cu-Zn супероксид дисмутаза, глиален фибриларен киселинен протеин (GFAP), алфа-синуклеин и протеини на топлинен шок.
- Съчетавайки три съвременни подхода - протеомен анализ на денатурираща SDS-PAGE електрофореза, *de novo* MALDI-MS/MS секвениране и биоинформатика, са определени протеините в активната фракция от хемолимфата на *Rapana venosa*, свързани с цитотоксичен ефект срещу редица клетъчни линии на рак на гърдата: MDA-MB-231, MDA-MB-468, BT-474, BT-549, SK-BR-3 и MCF-7, и неракова клетъчна линия MCF-10A.

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:

- Анализирани са шест проби сръбски пчелен мед посредством ЯМР спектроскопия. Химическият им профил е сравнен с наша база данни за мед с различен ботанически произход. Пробите са етикетирани като манов мед, без посочен точен ботанически произход. С цел определяне на растителния произход на маната, от която е получен медът, данните са сравнени с тези от захарните профили на 3 проби мед от иглолистна растителност, 3 проби от дъб и 3 проби от кестен. Данните показват, че две от сръбските проби представляват дъбов манов мед, други две са предимно от мана на кестен, а останалите две са разредени със захар и/или захарни сиропи. Анализът показва ясна разлика между отделните видове мед с различен географски произход. В българските проби дъбов манов мед от области извън Странджа е установена по-висока концентрация на пролин и неидентифицирани вещества.

- Проведен е сравнителен количествен анализ за съдържание на въглехидрати чрез ЯМР и на фенолни съединения (фенолни киселини, антоциани и флавоноиди) чрез HPLC на плодове и люспи от сини сливи, отгледани върху различни подложки и е оценена тяхната антиоксидантна активност.

- Изследвани са основните фитохимични компоненти на плодовете от скоруша (*Sorbus domestica* L.). Намерено е, че палмитинова киселина, калий, желязо, бор, глюкоза, фруктоза, ябълчна киселина и кверцетин- β -3-гликозид са сред основните фитоконпоненти на плодовете.

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” (ReCat4VALUE)** с ръководител доц. д-р Свилен Симеонов и финансиране от 210 000 лв. за 2022 г. Проведените през изминалата година изследвания са насочени към разработване на нови синтетични подходи за получаване на гуанидинови супер бази. Получените гуанидини са използвани в реакции на Ir-катализирано борилиране на арени в условията на изцяло стеричен контрол на региоселективността. Проведени са изследвания на Ru-катализирана изомеризация на алилови алкохоли в продукти на Ахматович. Реакционните механизми са напълно изучени чрез деутериово маркиране на субстратите и DFT калкулации. Разработеният синтетичен подход е приложен в тотален асиметричен синтез на природния биологично активен лактон ацетогенинин.

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. Калина Алипиева беше проведен конкурс за нови проектни предложения по **Национална програма „Млади учени и постдокторанти“ Модул „Млади учени“ и Модул „Пост-докторанти“**. Одобрени бяха **14** нови проекта в Модул „Млади учени“ на Славея Кръстанова, Ралица Чимширова, Петър Петров, Виктория Иванова, Десислава Гергинова, Мария Аргирова, Мануела Ойкова, Георги Георгиев, Николай Лумов, Консолато Росмини, Ани Петрова, Виктор Маркулиев, Карина Маринова и Оюундари

Тумурбаата, както и един проект на чуждестранен учен от Индия в **Модул „Пост-докторанти“**. Отпуснатите средства по тази програма за 18-месечен период са 89 750 лв.

Успешното развитие на младите учени в Института е свързано и с получаване на награди за техните резултати. Гл. ас. д-р инж. **Йордан Георгиев** от Лаборатория "Биологично активни вещества" – Пловдив беше отличен с наградата в конкурса за млади учени „Марин Дринов“ за постижения в научно направление „Биомедицина и качество на живот“, д-р **Виктория Иванова** от Лаборатория „Химия на природните вещества“ - с наградата на Националния конкурс „Изявен млад учен в областта на органичната химия“ на името на академик Иван Юхновски, ас. **Мария Аргирова** от Лаборатория „Структурен органичен анализ“ – с Първа награда в направление „Нанонауки, нови материали и технологии“ на Трети интердисциплинарен докторантски форум и Грамота за спечелено първо място в секция "Химични науки" на XIX Научна постерна сесия за студенти, докторанти и млади учени на ХТМУ. Гл. ас. д-р **Ивалина Трендафилова**, която понастоящем постдокторант в Университета в Намюр, Белгия е кавалер на Националната награда „13 века България“ за млади таланти в съвременното изкуство и наука за 2022 г. и също така беше отличена с награда „Проф. Христо Баларев“ на Съюза на химиците в България „Изявен млад учен в областта на неорганичната химия“.

Постигнатите резултати в основните научни направления са свързани с изпълнението на **82** проекта по национални, европейски и международни програми, от които **30** финансирани от ФНИ, вкл. за съфинансиране по COST, **18** участия по Национални научни програми и проект ИНФРАМАТ, **5** проекта, финансирани от рамкови, европейски и международни програми и фондове, **12** проекта по ЕБР, **1** проект, финансиран от университет, **6** проекта, финансирани по договори с фирми и **10** проекта, финансирани от други източници.

В традиционната конкурсна сесия на **ФНИ в „Конкурс за финансиране на фундаментални научни изследвания – 2022 год.“** бяха одобрени **2** проекта в научно направление „Химически науки“ - „Потенциал на йонни течности на основата на бетулинова киселина като модулатор на Toll-like рецепторите в мононуклеарни клетки и клетъчни линии от рак на млечната жлеза“ с ръководител доц. д-р **Мая Гунчева** и „3D принтирани катализатори на основата на отпадъчни материали за устойчиво получаване на синтетични горива и ценни химикали“ (3DCatFuel&Chem)“ с ръководител проф. дн **Маргарита Попова** и **1** проект в научно направление „Биологически науки“ - „Разработване на нови биологични наночастици от слюзта на градински охлюв *Cornu aspersum* като антимикробни агенти“, с ръководител доц. д-р **Александър Долашки**. В научно направление „Химически науки“ ИОХЦФ е партньор в проект на тема „Зелен обрат в синергентната екстракция и разделяне на редкоземни метали“ (координатор от ИОХЦФ проф. д-р **Ваня Куртева**), а в научно направление „Науки за земята“ ИОХЦФ е партньор в проект на тема „Изследване на времевите и пространствени промени в условията на отлагане и трансформиране на органичното вещество в терциерни български въглищни басейни с различна степен на въглефикация (Еоцен-Олигоценска Пернишка въглищна провинция и Късно Миоценски-Плиоценски Източномаришки басейн)“ (координатор от ИОХЦФ проф. д-р **Мая Стефанова**). В „Конкурс за

финансиране на „Фундаментални научни изследвания на млади учени и постдокторанти - 2022“ в научно направление „Химически науки“ е одобрен 1 проект за финансиране на гл. ас. д-р **Жанина Петкова**: „Синтез, антибактериална и антивирусна активност на камфор сулфонамиди и техни хидразонови производни“.

През 2022 г. учени от ИОХЦФ са представили резултати от проведените научни изследвания на **76** международни и национални форумата като са изнесени **202** устни и постерни доклада, от които **107** са от участия на международни мероприятия. ИОХЦФ-БАН беше съорганизатор на международния форум 8th International Black Sea Coastline Countries Scientific Research Conference, проведен в София, 29-30.08.2022, а проф. дн П. Долашка беше отличена с награда от турския организационен комитет за организирането и провеждането на този форум.

ИОХЦФ-БАН се включи за четвърти път в организираната от Международния съюз по чиста и приложна химия (IUPAC) в световен мащаб закуска “**Global Women’s Breakfast**” на **16 февруари 2022 г.** през работното пространство **Microsoft Teams**. Учени от Института представиха резултати от изследвания в рамките на Центъра за върхови постижения, двата Центъра за компетентност, Националната научна инфраструктура „ИНФРАМАТ“ и трите Национални научни програми, в които ИОХЦФ-БАН участва.

1.3. Полза / ефект за обществото от извършваните дейности.

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

- ЦЯМРС извършва значителна по обем сервизна дейност, като извършва анализи и предоставя научна експертиза за университети и научни организации, работещи в различни направления на НСРНИ, както и за предприятия и държавни институции. През 2022 г. са извършени над 2500 броя ЯМР сервизни анализи за научни институции в България като Институт по полимери-БАН, ПУ „Паисий Хилендарски“, Факултет по химия и фармация на СУ „Св. Кл. Охридски“, ХТМУ-София, Фармацевтичен Факултет на МУ-София, Медицински университет – Плевен, Институт по микробиология – БАН, Институт по катализ - БАН, Институт по Минералогия и кристалография - БАН и др.

- 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 захарния състав и фенолното съдържание на различни видове български мед.

- Провеждат се изследвания за приложение на природни дълбокоектектични разтворители („зелени разтворители“) като алтернатива на често използвани токсични органични разтворители при извличане на биологично активни компоненти от лечебни растения и прополис. Данните показват, че екстрактите имат потенциал за влагане в

хранителни, козметични и фармацевтични продукти без отстраняване на разтворителя, тъй като проявяват добра антиоксидантна и антибактериална активност и ниска токсичност и генотоксичност.

- Поддържане на жива колекция от *in vitro* култивирани лечебни и ароматични растения с консервационна и изследователска цел.
- Изучават се биологично активните компоненти в български плодове, зеленчуци, гъби и билки и тяхното въздействие върху човешкия организъм.
- Извършват се сервизни анализи и се изпълняват договори за изследователски задачи с частни фирми и научно-изследователски институции от страната. През 2022 г. в рамките на договор с Институт по криобиология и хранителни технологии към ССА е изследван въглехидратния състав на 36 проби малцови брашна.
- Изследване на културни и археологически обекти
- Успешно се произвеждат препаратите Neprolysin и Post-Neprol и техни производни.
- Синтезирани са ефективни катализатори на базата на модифицирани с метални наночастици зеолити за получаване на ценни химикали и горива чрез процеси на оползотворяване на отпадъчна биомаса и CO₂.
- Разработени са катализатори на базата на смесени наноразмерни метални оксиди и зеолити (природни и получени от въглищна пепел) за елиминиране на летливи органични съединения за опазване чистотата на въздуха.

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, Институт по овощарство – Пловдив 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“, Университет Проф. д-р „Асен Златаров“, Бургас 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. (относими към получаваната субсидия).

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, Клуб на каталитиците в България, 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, Sigma Xi The Science Research Honor Society 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. дн Маргарита Попова са оценители на проекти по Хоризонт 2020 и ФНИ, а проф. д-р Петко Денев - на проекти към Национален Иновационен Фонд и Датски Иновационен Фонд, ФНИ и е член на оценителен панел „Природни науки“ по Програма COST. Проф. дхн Владимир Димитров е член на “Научен консултативен съвет“ към президента на Организацията за забрана на химическите оръжия (Scientific Advisory Board, OPCW), а проф. дн Павлинка Долашка - Експерт към "Комисия по наука" към Народното Събрание.

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.

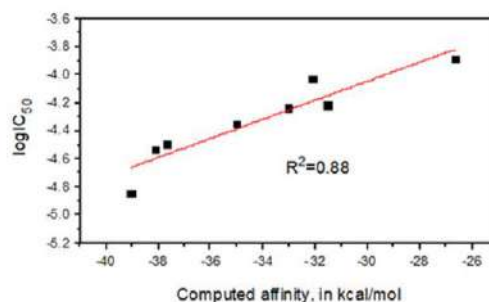
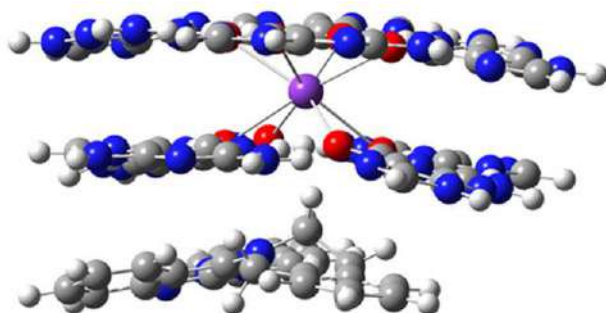
2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНОИЗСЛЕДОВАТЕЛСКАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2022 г.

2.1. Научно постижение

Тема: Малки хетероциклени лиганди като противоракови агенти: QSAR с моделен Г-квадруплекс

Колектив от ИОХЦФ-БАН: Хозе Канети, Ваня Куртева, Надежда Табакова, Жанина Петкова, Снежана Бакалова

Molecules, 2022, 27, 7577 IF = 4.927, Q1



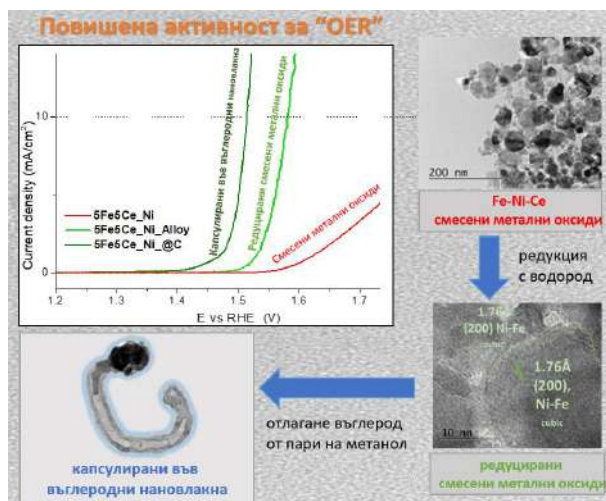
Гуаниновите квадруплекси Г4 са неканонични четири-спирални структури в нуклеиновите киселини, които притежават изключително важна роля в регулацията на огромен брой клетъчни процеси при висшите организми. Предложен е модел на Г4, който позволява изчислителното моделиране на взаимодействията му с хетероциклени лиганди на сравнително високо теоретично ниво и предсказване на афинитета на лигандите към Г4. Синтезирани са серия нови 4-хетариламино-хиназолини и 2-хетарил-перимидини и е определена тяхната цитотоксичност и инхибиторна активност (IC₅₀) върху човешки злокачествен меланом A375. На базата на получената добра линейна зависимост между теоретично изчислените афинитети и експериментално определените log (IC₅₀) стойности е предложен механизъм на противоракова активност на хетероцикличните лиганди. Получената зависимост може да се използва като елемент на изкуствен интелект за намиране на средства за борба с рака.

2.2. Научно-приложно постижение.

Тема: Иновативен подход за получаване на мезопорести Ce–Fe–Ni нанокompозити, капсулирани във въглеродни нановлакна с приложение като евтини и лесно достъпни катализатори за получаване на чиста енергия

Колектив от ИОХЦФ-БАН: Консолато Росмини, Таня Цончева, Момчил Димитров, Бойко Цинцарски

Carbon, 196 (2022) 186-202, IF=11.3, Q1



Предложен е иновативен подход за получаване на капсулирани Fe–Ni–Ce мезопорести материали във въглеродни нановлакна с приложение като евтини и лесно достъпни катализатори за електрохимично разпадане на вода за получаване на чиста енергия. За да се увеличат електрокапацитивните свойства и да се намали присъщия импеданс на изходните метални оксиди, те бяха първоначално модифицирани чрез редукция с водород, за да се получат високо дисперсни Ni–Fe сплави в цериевооксидна матрица. Оригиналноста на подхода се състои в последващото използване на реакцията на разпадане на метанол, при която в допълнение към производството на синтез-газ и метан, чрез процес на химическо отлагане на въглерод от газова фаза се получават метални сплави, капсулирани във въглеродни нановлакна. Получените нанокомполитни катализатори показаха много висока активност в реакцията на отделяне на кислород (OER) в алкална среда (1M KOH), показвайки и много силно намаляване на свръхпотенциала при 10 mA/cm² плътност на тока, което води до намаляване на енергийните разходи за получаване на кислород и водород чрез разпадане на вода. Капсулираните Fe–Ni–Ce мезопорести материали се отличават с по-висока активност в реакцията на разпадане на вода, дори от тази на търговските и значително по-скъпи катализатори съдържащи благородни метали (IrO₂, RuO₂), което ги прави изключително перспективни за получаване на чиста енергия.

3. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ЗВЕНТО.

През изминалата година учените от ИОХЦФ са работили по изпълнението на 5 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, Словакия, Сърбия, Полша, Египет, Турция и Виетнам, както и 3 международни проекта с Индия, Русия и Китай, финансирани от ФНИ. Учени от ИОХЦФ извършват съвместни научни изследвания и с учени от Университетите на Осло, Норвегия и Вагенинген, Нидерландия.

През 2022 г. продължи 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. През изминалата година в рамките на проекта са извършвани съвместни научни изследвания с Технически университет на Айнховен, Холандия в областта на електрохимичното окисление на хидроксиметилфурфурал и с Университет Сорбона, Париж в областта на Ir-катализирано C-H функционализиране на арени. Осъществени са два двумесечни изследователски обмена на млади учени от ИОХЦФ-БАН в Технически университет на Айнховен (докторант Консолато Росмини, лаб. ОРММ) и Университет Сорбона, Париж (гл. ас. Мирослав Дангалов, лаб. ЦЯМРС). Постигнати са следните по-важни резултати:

- Разработен е синтезът на каталитични носители от смесени волфрам-циркониеви оксиди и е изследван техният каталитичен добив в реакцията на хидрогениране на фурфурилов алкохол. Катализаторите показват добра селективност и бяха напълно охарактеризирани с помощта на съвременни методи (SEM-EDX, NH₃-TPD, XRD, XPS).

- Разработен е нов метод за удобно и евтино получаване на амиди от амини и естери в базична среда. Извършено е задълбочено изследване на обхвата и ограниченията при прилагането му. Методът се отличава с изключителна бързина на реакциите (в рамките на няколко минути), много високи добиви и липса на странични продукти, при спазване на определени условия. Използваните базични системи (KOBu-t/DMSO или n-BuLi/THF) са нетоксични и лесно достъпни. Приложенията на метода са изследвани в няколко направления:

- Описана е за първи път автокондензацията на метилантранилат, водеща до получаване само в една стъпка на интермедиат с ключово значение за тоталния синтез на някои хиनाзолинови алкалоиди.
- Методът толерира разнообразни заместители при реагентите, като е показано и успешното му приложение при реакции на триетилфосфат с амини, водещо до получаване на фосфорамидати. Последните намират широко приложение в агрохимията и медицинската химия, поради което тяхното бързо и евтино получаване е желано от индустрията. Съществуващите процедури за получаването им изискват скъпи и токсични изходни фосфорни съединения, както и високи температури, дълго реакционно време и присъствие на метални катализатори.
- Показано е избирателното ацилиране на незащитени диамини, притежаващи алифатна и ароматна аминогрупи. Ацилирането протича изключително по ароматния азот, и то в една стъпка с висок добив. Не се наблюдават странични продукти.

През 2022 г. в рамките на работната програма на 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. д-р Владимир Димитров са реализирани 22 месеца изследователски престои в партньорски институции на колеги от института в изпълнение на работни пакети 3, 4 и 5. От партньорските институции са приети учени от Кипър, Сърбия и Испания. От страна на ИОХЦФ са събрани проби от 21 лечебни растения от списъка на планираните за България билки и са изготвени екстракти с различни разтворители при различни условия. Екстрактите са охарактеризирани с аналитични техники в ИОХЦФ. След определяне на

биологична им активност от партньорите в Атина са подбрани най-активните екстракти, които да бъдат обект на по-задълбочени изследвания.

През 2022 г. научните изследвания в рамките на проект **ITN-MSCA „Разработване на нова генерация би-метални катализатори за получаване на енергия“ (VIKE)** с ръководител от българска страна проф. дхн **Таня Цончева**, свързан с получаване и характеризиране на катализатори и носители на катализатори с приложение за получаване на водород чрез разлагане на метанол, течнофазов риформинг на етиленгликол и електрохимично разлагане на вода, бяха в заключителен етап. Докторантът по проекта Консолато Росмини беше отчислен с право на защита и след представяне на резултатите от научната си работа пред колоквиум „Функционални материали, компютърно моделиране и технологии“, беше насочен към защита. В средата на януари предстои защитата на докторантски му труд на тема: „Усъвършенствани материали на базата на желязо и никел за безопасно производство и съхранение на водород“.

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 2022 г. чл. кор. проф. дхн В. Банкова е участвала с лекционни курсове по Структурен анализ на органични съединения в магистърските програми на Факултета по химия и фармация – СУ ”Св. Климент Охридски“, а проф. дн Ив. Стойнева е водила 2 курса в ЮЗУ „Неофит Рилски“ – Благоевград: „Структурен анализ на органични съединения“ (магистърска програма) и „Анализ и контрол на лекарствени средства“ (бакалавърска програма), както и лекционен курс по „Молекулен дизайн на биологично активни вещества“ в магистърската програма на ХТМУ. Доц. д-р Мирослав Рангелов е изнасял лекции на тема „Микробиомен анализ и биоинформатика“ по програма за следдипломно обучение в Национален център по заразни и паразитни болести. Гл. ас. д-р Й. Георгиев е автор на „Учебно помагало по биохимия за студенти по медицина – Въпросник за самоподготовка за колоквиуми“ издадено през 2022 г. Проведени са също специализирани докторантски курсове към Център за обучение-БАН.

През изминалата година в ИОХЦФ са се обучавали **6** докторанта, от които двама са по програма за редовно обучение, трима - на самостоятелна подготовка, а един докторант е по програма за задочно обучение. Под ръководството на проф. П. Денев е изработена 1 дипломна работа на студент-магистърска степен.

По ЗРАСРБ са избрани 1 професор, 4 доцента, 3 главни асистента, 4 асистента и са защитени 2 дисертации за придобиване на образователната и научна степен „доктор“. С участието на 10 учени от Института са изготвени 20 рецензии и становища по процедури за научни степени и академични длъжности.

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.

В рамките на научно-изследователската работа на Центъра за компетентност „Чисти технологии за устойчива околна среда – води, отпадъци, енергия за кръгова икономика“ през 2022 г. е регистриран е полезен модел с наименование „ВЪГЛЕРОДЕН АДСОРБЕНТ ЗА АДСОРБЦИЯ НА ВИРУСИ И БАКТЕРИИ И ФИЛТЪР, КОЙТО ГО СЪДЪРЖА“ с автори П. Долашка и Н. Петров. Полезният модел се отнася до въглероден адсорбент с развита порьозна текстура и преобладаващо съдържание на макропори с размери от 50 до 3000 nm. Съдържанието на микро- и мезопори определя голямата му адсорбционна повърхност 820 m²/g. Въглеродният адсорбент притежава размер и свойства на повърхността, определящи много добри адсорбционни характеристики. Голямото съдържание на макропори (60-70%) от общия обем на порите прави въглеродния адсорбент подходящ за адсорбиране на адсорбати с по-големи размер, които получават достъп до по-голяма част от неговата повърхност. Това значително повишава неговата ефективност при адсорбция на бактерии и вируси и определя приложимостта му при защитни маски, противогази и др. Въглеродният адсорбент притежава сравнително хомогенна микрографитна структура. Полезният модел се отнася и до филтър, който съдържа въглеродния адсорбент.

Поддържани са следните **3 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, „Антикорозионни хибридни галванични цинкови покрития съдържащи нанодисперсни частици полианилин, състав на електролит и метод за електроотлагане на покритията“ с автори Н. Божков, Н. Табакова-Асенова, Н. Божкова както и **3 полезни модела** със заявител ИОХЦФ „Състав на водоразтворима форма на прополис“ с автори П. Петров, Хр. Цветанов, П. Мокрева, В. Банкова, Б. Трушева, М. Попова, „Козметичен крем, съдържащ тополов прополис и мурсалски чай“ с автори П. Петров, Г. Георгиев, В. Банкова, В. Димитров, Б. Трушева, М. Каменова-Начева и „Състав с антибактериално действие“ с автори П. Долашка, Я. Топалова, Л. Велкова, А. Долашки, М. Белухова, Е. Даскалова, Н. Желева.

В Патентното ведомство е подадена също заявка от ИОХЦФ-БАН и ИП-БАН за патент „Козметичен крем, съдържащ прополис и мурсалски чай“ с автори П. Петров, Г. Георгиев, В. Банкова, В. Димитров, Б. Трушева, М. Каменова-Начева.

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.

През 2022 г. Патентното ведомство на Република България отличи **проф. дн П. Долашка** с вписване в “Златната книга“ за най-високи научни и творчески постижения.

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 2022 г. са 10714 лв. 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 2022 г. са сключени договори за ЯМР анализи с фирмите „ППРисърч ООД“ - за доказване на структура и определяне на чистота на биологично активни съединения, и с „ЕМКО ООД“ за доказване на структура чрез използване на комбиниран подход включващ набор от аналитични техники.

Извършени са сервизни ЯМР анализи на химически продукти и е предоставена ЯМР експертиза на предприятията Софарма АД, Балканфарма АД Троян, Си Пи Ей Кем ООД, ЕТ Игнат Игнатов - Тетевен, Лубрика ООД, Елаците Мед, Антибиотик Разград АД

В лаборатория „ХББЕ“ (проф. П. Долашка) е извършен LC-MS и LC-MS/MS анализ на проба от препарат Ензоимун актив (Enzoimmune active Rosetta), предоставени от фирма Розета Лайфкеър България ООД, както и анализи на екстракти от слузта на градински охлюви *Helix aspersa maxima* и *Helix pomatia* (Станислав Владимирович).

В рамките на Център за компетентност „Чисти технологии за устойчива околна среда – води, отпадъци, енергия за кръгова икономика“ са подписани са 9 договора за изследване на минералните извори в района на община Велинград и 1 договор със Специализирани болници за рехабилитация - Национален комплекс - филиал Велинград.

В лаборатория „СОА“ е извършен сравнителен ИЧ-спектрален анализ на фармацевтични образци: повидон-йод, на фирмата Купро94 ООД, както и на Galanthamine Hydrobromide на фирмата Galen N.

В лаборатория „Химия на липидите“ са проведени анализи на масла за фирма „Йор фрутс“ ЕООД;

В лаборатория „Инструментална хроматография и мас спектрометрия“ са проведени анализи чрез газова хроматография-мас спектрометрия, газова хроматография с пламъчно-йонизационен детектор и високоефективна течна хроматография за следните фирми: Гален-Н; Атмосфер, Дейтафарм, ЕмЕс Бизнес Солюшън и др.

В лаборатория „ОСС“ е определено енантимереното съотношение на компонентите розов оксид и цитронелол в розово масло чрез GC-FID за фирма "ЕССА БИО" ЕООД.

В „ЛБАВ“ са извършени анализи и услуги за УХТ – Пловдив и Институт по криобиология и хранителни технологии към ССА.

6.2. Отдаване под наем на помещения и материална база.

Наемател	Получена сума за годината, в лв.
Симона Халачева	2375.12
Ултима Ремап БГ ООД	1306.06
ВНГ Груп ООД	95775.18
Солво ООД	2788.32
Амала бюти ООД	2168.50
СМС България ООД	2112.36
Теленор България ЕАД, ЦЕТИН България ЕАД	11520.00
Арбю Козметикс ЕООД	6460.68
Балев Корпорейшън ЕООД	6759.36
ГЪЛЪБ-87 ЕООД	1706.27
Побелч Гле ООД	17156.64
Биовет АД	7041.00
Кермит ЕООД	2163.00
Пролаб инструментс ЕООД	10800.00
Саба инженеринг ООД	1747.92
АУТОМАТ КАФЕ ООД	418.52
Планед 12 ООД	3252.96
Бултехноплюс ООД	5407.44
Профикс Системс ООД	2013.70
Карино Натурал ЕООД	6759.36
Валанс 22 ЕООД	1807.19
ОБЩО с ДДС	191539.58
ОБЩО без ДДС	159616.52

Заплащането към НАП за данъци по ЗКПО за начислените наеми е 4345.07 лв., а в партида “Развитие” при БАН - Администрация са преведени 79 630 лв. Има неполучени наеми и възстановени консумативи от фирма ВНГ Груп за 20 217 лв. За тях е направено споразумение за разсрочване на дължимите суми, подписано и от БАН - Администрация.

6.3. Сведения за друга стопанска дейност.

Приходите от сервизни дейности са в размер на 60 980 лв. без ДДС, както следва:

Лаборатория/дейност	Сума без ДДС, лв.
Център по ЯМР спектроскопия	34638
Непролизин	10716
Лаб. ИЧ спектроскопия - М. Рогожеров	780
Лаб. ОСС Анализи	1050
Партида Елементен анализ /П. Денев/	3773
Партида Прополис – Милена Попова	238
Лаб. ГХ/МС	4285
Молекулна спектроскопия –Бистра Стамболийска	3530

ХББЕ (проф. Долашка) - Анализи	1400
Лаб. ХЛ	570
ОБЩО	60980

Получените средства по договори с български фирми и университети и чуждестранни фирми без ДДС са 20 621 лв.:

Фирма, организация	Сума без ДДС, лв.
Атмосфаер ООД – ГХМС	5697
Margaret Shanahan –Милена Попова	3533
АПИ ОРГАНИК ЕООД	60
University of Athens – програма ФИБРО	4890
Фирма Роял Бийс ЕООД	475
SA Phibro Animal Health – програма ФИБРО	1680
Конференция Черноморски регион	2886
Станислав Владимирович Приходько	1400
ОБЩО	20621

7. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ФИНАНСОВОТО СЪСТОЯНИЕ НА ЗВЕНОТО ЗА 2022 г.

Бюджетната субсидия за 2022 г. е 3 747 357 лв., с направената до 30.09.2022 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 защиты по ЗРАС, за редовни и допълнителни стипендии и други разходи. Получена е справка за предстоящата актуализация на бюджета с още 35 714 лева - за сумата 13 260 лв. за процедури и защиты и 20 454 лв. – обезщетение по чл. 222 и чл.224 от КТ.

Допълнително привлечените средства по проекти и договори са:

Проекти и договори	Сума, лв.
Договори с ФНИ като водеща организация (вкл. Вихрен)	1161485.24
Договори с ФНИ като партньорска организация	66500
Проекти по Хоризонт 2020	88422.21
Оперативни програми	1723849
Проект ИНФРАМАТ	264320
Национални научни програми, вкл. ННП „Млади учени и постдокторанти“	442175.23
НП „Стимулиране на публикационната активност“	62821.84
Договори по междуакадемичен обмен	22890.53

Средствата, с които сме разполагали през 2022 г. и са осигурили цялостната издръжка на ИОХЦФ са общо 5 447 686 лв., от които бюджетната субсидия 3 470 470 лв. представлява 63.7 % от разходите през 2022 г. в ИОХЦФ.

В сумата 5 447 686 лв. са включени и разходите от участието ни в изграждане на два Центъра за компетентност и Център за върхови постижения - изразходвани средства на стойност 478286 лв. (сумата е без преводите към партньорите) за изграждане на нова научна инфраструктура.

Сумата 3 014 241 лв. от бюджетната субсидия е усвоена за фонд “Работна заплата” (2 536 889 лв.) и осигурителни вноски (477 353 лв.) за щатния състав. Останалите средства от бюджетната субсидия са изразходвани за заплащане на болнични за сметка на работодателя, за процедури по ЗРАС, 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 Института.

Във връзка с изпълнение на проектите, които ИОХЦФ координира или участва като партньор, са проведени 21 обществени поръчки на обща стойност 1 766 684.14 лв. без ДДС, като са сключени 34 договора с 15 фирми. В изготвяне на техническата документация към ОП активно са работили повече от 10 учени от Института.

В края на 2022-та година бе направена финансова ревизия от НАП /Национална Агенция по Приходите/ на счетоводната дейност в Института за период от последните 5 години. Заключението на проверяващите е, че всички финансово-счетоводни дейности през този период са водени в Института точно, съобразно изискванията на Закона и няма забележки.

8. ИНФОРМАЦИЯ ЗА НАУЧНИЯ СЪВЕТ НА ЗВЕНТО

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 ЗВЕНТО.

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

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“