

**ИНСТИТУТ ПО ОРГАНИЧНА ХИМИЯ С ЦЕНТЪР ПО ФИТОХИМИЯ,  
БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ  
(ИОХЦФ, БАН)**

**ГОДИШЕН ОТЧЕТ ЗА 2016 ГОДИНА**

**1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ЗВЕНТО:**

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

**В резултат на научно-изследователската дейност в института през 2016 г. са постигнати следните резултати по направления:**

**I. НАПРАВЛЕНИЕ „СИНТЕЗ, СТРОЕЖ И РЕАКЦИОННА СПОСОБНОСТ НА ОРГАНИЧНИТЕ СЪЕДИНЕНИЯ”**

- Разработени бяха подходи за синтез на нови мултифункционални съединения с потенциална биоактивност и/или приложения в модерните технологии. Синтезирани бяха нови хирални съединения с приложение в каталитични реакции за стереоселективни трансформации. Ефективността на синтезираните съединения като лиганди беше изучена в паладий и цинк катализирани реакции, при които с висока енантиселективност се получават интермедиати с приложение във фармацията. Синтезирани са редица нови съединения с обещаваща антитуберкулозна, антивирусна и антиракова активност.
- Разработени бяха подходи за екстракции с помощта на суперкритичен въглероден диоксид на семена от шипка, цветове от лайка и други лечебни растения, изучен беше съставът на получените екстракти и беше сравнен с екстракти, получени с други методи. Разработка е съвместна с направление „Изолиране, структура и приложение на природни съединения”.
- Изследвани бяха (експериментално и теоретично) тавтомерни системи в две направления: 1. използване на тавтомерния пренос на протон като елементарен процес в молекулната електроника и 2. влиянието на тавтомерията върху биологичната активност на лекарствени средства. В първото направление бяха изследвани превключващи системи базирани на различни тавтомерни платформи (азо багрила и алдехиди), както и молекулни ротори. Беше изследвана тавтомерията на лекарственото вещество пироксикам и негови аналози, както и на нови хетероциклени съединения за лечение на болестта на Паркинсон.
- Чрез методите на съвременната ЯМР спектроскопия бяха изследвани молекулна структура, динамика и свойства на следните обекти: паладиеви и платинови комплекси на азот-хетероциклени карбени; Pt(II) и Pd(II) координационни нанокапсули на основата на антрацен-бис-пиридилови лиганди с потенциално противотуморно действие; амфифилни агрегати на базата на полиоксометалати и приложението им за хидролиза на биологично активни моделни системи; термочувствителни съполимери на пропил-оксазолин и етиленимин в разтвор като потенциални системи за доставка на ДНК; мезопорести силикати модифицирани с органични функционални групи (NH<sub>2</sub> или NH<sub>2</sub>/COOH) като носители на противовъзпалителното лекарство месалазин; биологично-активни вещества, кумарини и хромени, хинолони (производни на норфлоксацин); моно- и олигозахариди в пчелен мед и вино.
- Продължи работата по въвеждане на пространствено селективната ЯМР спектроскопия в практиката на Центъра по ЯМР спектроскопия, като бяха разработени варианти на J-компенсирано спиново ехо и на техники за потискане на остатъчния сигнал на разтворителя, които значително повишават чувствителността на пространствено-селективните експерименти.
- Синтезирани бяха серия тиони на бензимидазола и бяха изпитани като цитопротективни агенти при оксидативен стрес в хепатоцити от плъх. На базата на теоретични методи беше изследвана ролята на радикал улавящата способност на изследваните съединения като възможен механизъм на цитопротективното им действие.

- Синтезирани бяха нови тиенопиримидинони, които бяха изследвани във връзка с антипролиферативното им действие спрямо ракови клетки. Установената е селективна цитотоксичност на някои от изследваните съединения спрямо клетки от рак на гърдата. Чрез молекулен докинг беше показано, че ефектът се дължи на свързването на изследваните съединения с ензим от групата на киназите, което би могло да се използва като успешна стратегия за противотуморна терапия.
- За първи път бяха изследвани чрез ИЧ линеен дихроизъм пиридин и тиофен алдехиди в нематичен кристал, за да се проследи как конформационната промяна в изследваните молекули влияе върху ориентацията на нейните вибрационни моменти на преход.
- Разработен беше хибриден подход, съчетание от молекулно-динамични и квантово-химични модели, за изследване на механизми на органични реакции в разтвор. Този подход беше приложен за изследване на ефекта на разтворителя върху процеси на пренос на протон в азаурацили и нуклеозиди. Теоретично беше изследвана тавтомерията при гуанозин и ацикловир във воден разтвор.
- С методи на изчислителната химия (молекулна механика и различни функционали в теория на функционала на плътността, DFT) са изследвани трансляционни изомери на молекули с механична връзка - ротаксан с обратимо превключване между трансляционни изомери при смяна на разтворителя (молекулна совалка с фулеренов стопер) и рН-превключван (контролиран чрез протониране) ротаксан, при който в резултат на различни взаимодействия между компонентите на системата са предпочетени различни ко-конформации в неутралното и в протонираното състояния.

## II. НАПРАВЛЕНИЕ „ИЗОЛИРАНЕ, СТРУКТУРА И ПРИЛОЖЕНИЕ НА ПРИРОДНИ СЪЕДИНЕНИЯ”

- Установено беше влиянието на екологични и биологични фактори (произход на семена, етап на развитие, възраст, метод на размножаване) върху натрупването на биологично активни сескитерпенови лактони в арниката *Arnica montana*. Доказано беше, че общото съдържание на сескитерпенови лактони е най-високо във фаза на пълен цъфтеж.
- Създадена беше и се поддържа *in vitro* колекция от над 20 вида лечебни, ароматични и ядливи растения със стопанско значение, характерни за флората на Балканския полуостров, Европа и Средиземноморския район на Северна Африка. Установени бяха условията за получаване на биомаса с повишено съдържание на ценни биологично активни вещества.
- Изолирани и идентифицирани бяха основните вторични метаболити на род ясен *Fraxinus xanthoxyloides* - кумарини и техни глюкозиди, секоиридоидни, флавоноидни и фенилетаноидни гликозиди, включително и две редки природни съединения, чиято структура е изградена от секоиридоид и кумарин, свързани чрез глюкоза.
- Изследвани бяха екстракти от корени и листа от омайниче *Geum urbanum*, показали обещаваща антимикробна и цитотоксична активност. Определено беше съдържанието на тотални феноли и флавоноиди. Изолирани и идентифицирани бяха 9 индивидуални компонента, от които три са нови за вида и два нови за род омайниче *Geum*.
- Екстрахирани бяха проби от редкия ендемичен вид тракийски ранилист *Stahys thracica*, отгледани в лабораторни условия от семенен материал с цел определяне на метаболитните им профили чрез ЯМР.
- Екстракти на корени от дялянка *Valeriana officinalis* – от избрани естествени находища и *in vitro* размножаване, бяха анализирани, като специфичните за дялянката съединения бяха установени само в пробите от естествени находища.
- Охарактеризирани бяха химичният състав и биологичната активност (антимикробна, антиоксидантна, противоязвена) на прополис от различни райони на света (Камерун, Фиджи). В прополис от о-вите Фиджи бяха идентифицирани две новооткрити природни съединения от типа на пренилираните стилбени.
- Установен беше алкалоидният профил на четири вида лечебни растения от род *Fumaria* (росопас), растящи в България. Идентифицирани бяха 20 изохинолинови алкалоида, като за

първи път беше определен алкалоидният състав на вида *Fumaria thuretii*. На база на алкалоидните профили бяха обособени две хемотипни групи.

- Установено беше алкалоидното съдържание на жълт мак *Glaucium flavum Grantz.* от естествени находища в България. На база на алкалоидните профили бяха обособени три алкалоидни хемотипа.
- Сравнителният анализ на алкалоидите в диворастящия и култивирания татул *Datura stramonium* установи, че в култивиранията растения не се съдържат характерните за вида тиглоилови естери на тропановите алкалоиди за сметка на увеличаване на броя на апо- и нор-съединенията.
- Установен беше алкалоидният състав на лечебни растения от Монголската флора – *Sedum telephium, Hyosciamus pussillus, Logochilus ilicifolius, Datura stramonium* и *Thalictrum simplex*. Идентифицирани бяха общо 36 индивидуални алкалоида, някои от които се откриват за първи път в изследваните видове. Установена беше значителна антибактериална активност на суровата алкалоидна смес от *Logochilus ilicifolius*.
- Получени бяха 9 пречистени полизахаридни фракции от цветовете на сребролистна липа, лавандула и корените на коприва и беше установена структурата на три от тях. Получените полизахариди показаха *in vitro* и *ex vivo* имуномодулираща активност и противотуморна активност срещу различни туморни клетъчни линии.
- В резултат на изследванията върху киселите полизахариди от цветовете на сребролистната липа беше открит необичаен полизахарид богат на глюкуронова киселина, който е от пектинов тип и представлява силно глюкуронидиран и ацетилиран рамногалактуронан. На базата на биологичните анализи беше установено, че изолираният полизахарид проявява едновременно имуностимулиращо и противовъзпалително действие, което разкрива широк фронт на приложение на липовите полизахариди и техни продукти при имунотерапията на различни заболявания.
- Направена беше оценка на автентичността и качеството на арганово масло от различни търговски марки, продавани на българския пазар чрез анализ на липидните компоненти, като за една от пробите беше установено по стероловия състав, че представлява смес с друго растително масло.
- Изследвано беше натрупването на микроелементи в орехи в зависимост от сорта и годината на отглеждането им. Установено беше, че влияние върху натрупването на мед, желязо, манган и цинк оказва само сорта. Наред с това беше изяснено, че основен източник за натрупване на токсични елементи в ядките е почвата за кадмий и замърсяването във въздуха за олово.
- Изследван беше ароматният профил на трите основни типа тютюнево абсолю, произвеждано в България (Бърлей, Ориент и Вирджиния), като бяха идентифицирани 90 индивидуални съединения. Получен беше специфичен за всеки тип абсолю хроматографски пръстов отпечатък, даващ възможност за бърза оценка на качеството и автентичността на търговски проби за нуждите на фармацевтичната промишленост и козметиката.
- Предложени бяха нови зависимости за определяне на ефектите на взаимодействие между индивидуалните компоненти на еквимоларни двойни смеси, съдържащи моно-, би- и полифеноли в смес с алфа-токоферол.
- Направен беше сравнителен анализ на редица природни и синтетични аналози на кумарина и беше изучена зависимостта структура-антиоксидантна и антирадикалова активност чрез прилагане на комбинации от хроматографски, спектрални и теоретични подходи. Получените резултати дават възможност за дизайн на нови кумаринови производни с очаквана антиоксидантна и антирадикалова активност.
- Установено беше за първи път, че еквимоларни двойни смеси на противотуморния препарат флуороурацил с тимол, карвакрол и техните димери, както и с куркумин и евгенол, не проявяват синергизъм в действието си, но запазват инхибиращата си способност (максимално висока при кумарина). Получените резултати могат да се използват за изясняване механизма на действие на смеси от два природни продукта при нови фитохимични терапии.

### III. НАПРАВЛЕНИЕ „СТРУКТУРА И ФУНКЦИЯ НА БЕЛТЪЦИ, ЕНЗИМИ И ПЕПТИДИ”

- Разработена беше нова ефективна синтетична процедура за получаване на заместени с amino- и с карбокси- групи фталоцианинови комплекси, като прекурсори за конюгирането им с аминокиселини и къси пептиди с биологична-активност. Синтезиран беше фталоцианинов комплекс на цинка, конюгиран с тирозин-амидо фенокси група и бяха изследвани основните му фотофизични и фотохимични свойства като фотосенсибилизатор с антитуморна активност.
- Установен беше ефектът на четири повърхностно-активни вещества, широко употребявани при анализа на хидрофобни лекарствени препарати, върху протеолитичната активност на панкреатин. Направена беше препоръка за оптимизиране на процедурата за ензимното разграждане на омержени желатинови капсули в симулирани интестинални течности.
- Разработен беше метод за оценка на отношението живи/мъртви клетки в моделна бактериална клетъчна система на базата на ЯМР спектроскопия. Проведени бяха изследвания и беше разработена процедура за изолиране на чисти бактериални клетъчни линии от естествени нефторазграждащи съобщества, обитаващи крайбрежната зона на Черно море.
- Разработен беше алгоритъм за автоматично разпознаване на типовете атоми от скелета на белтъчни молекули, зададени с атомните си координати. Проведени бяха изследвания върху конформационната стабилност на молусков хемоцианин посредством комбиниране на различни методи. Установена беше значителна термостабилност на хемоцианина с температура на прехода 80 °C. С помощта на кръгов дихроизъм бяха проследени промените във вторичната структура на хемоцианина с повишаване на температурата.
- Доказано беше *in vitro* цитотоксичното действие на хемоцианин от мекотелите *Rapana venosa* и една функционална единица от хемоцианина върху туморни клетъчни линии от пикочен мехур. Най-висок инхибиращ ефект (~70%) върху растежа на тези туморни клетки беше установен за една функционална единица от хемоцианин, който вероятно се дължи на специфичните олигозахаридни структури, изложени на повърхността на гликопротеина. Установен беше антимикробен ефект на две от функционалните единици от *Rapana* хемоцианин срещу грам положителния бактериален щам *Staphylococcus aureus*, а за други две функционални единици от същия хемоцианин беше показано, че потискат растежа на *Staphylococcus aureus*, *Streptococcus epidermidis* и *Escherichia coli*.
- Изолирани бяха късо и средбоверижни пептиди от секрети на земноводни и бяха изследвани антибактериалните им свойства срещу грам-положителни, грам-отрицателни бактериални щамове и дрожди.

### IV. НАПРАВЛЕНИЕ „ТЕРМИЧНИ И КАТАЛИТИЧНИ ПРЕВРЪЩАНИЯ НА ВЪГЛЕВОДОРОДИ”

- Разработен беше нов, оригинален метод за синтез на нанопорест въглерод с различни структурни и текстурни характеристики, на основата на продукти от преработката на биомаса, въглища и полимери. Методът се основава на обогатяване на сместа с кислородсъдържащи съединения посредством полимеризационни и поликондензационни процеси и позволява регулиране на свойствата на получените материали чрез вариране състава на суровината. Това е предпоставка за получаването на продукти без минерални примеси с предварително зададени свойства в зависимост от предназначението им. Изследвана беше приложимостта на получените материали в различни области на електрониката – при производството на суперкондензатори и батерии и в пречиствателната техника за извличане на замърсители от вода и въздух и катализа-катализаторите, получени на основа на нанопорест въглерод, показват много добра активност при разпадане на метанол и др.
- Разработена беше нова стратегия за контрол на текстурните, структурните и каталитичните характеристики на смесена Ce-Zr оксидна система чрез комбиниране на метод на хидротермален синтез и съутаяване с карбамид. Демонстрирани бяха възможностите за контрол на свойствата на получените материали чрез температурата на хидротермален синтез и присъствието на органичен темплейт по време на синтеза.
- Направено беше системно изследване на влиянието на природата на дотиращия метален оксид върху свойствата на титанооксидни катализатори. Доказано беше, че изоморфното

включване на  $\text{Ce}^{4+}$  или  $\text{Fe}^{3+}$  в титанооксидната решетка генерира формирането на дефекти, което благоприятства кристализиране в съседство на финодисперсна цериево оксидна или хематитна фаза. Това води до допълнително повишаване на дисперсността на  $\text{TiO}_2$  и променя киселинно-основните и окислително-редукционните му свойства. В резултат на синергичния ефект между различните металооксидни частици многократно се повишава каталитичната активност на  $\text{TiO}_2$  в реакции на пълно окисление на етилов ацетат и на разлагане на метанол до синтез газ;

- Показано беше, че състоянието на нанесените желязооксидни частици върху титанов оксид може лесно да бъде контролирано чрез модифицирането му с  $\text{HfO}_2$ . Малки добавки от последния способстват за отлагането на финодисперсна хематитна фаза, която обезпечава висока активност в окисление на етилов ацетат;
- Демонстрирано беше, че активен въглен, получен от отпадни суровини (биомаса и полиолефинов восък), може да послужи като матрица за отлагане на финодисперсни цинково-феритни частици, чийто състав и свойства могат успешно да се контролират чрез метода на получаване, повърхностните и текстурните характеристики на въглеродния материал. Доказано беше, че формирането на финодисперсна и активна феритна фаза може съществено да се подобри чрез генерирането на микропори и сравнително ниско съдържание на повърхностни функционални групи във въглеродния носител.
- Получени бяха функционализирани със сулфонови групи мезопорести материали с различна пореста структура (три-дименсионална кубична (SBA-16) или дву-дименсионална хексагонална (SBA-15)) чрез следсинтезно модифициране. Установено беше, че структурата на мезопорестия силикат оказва съществено влияние върху киселинните свойства и каталитичното поведение в реакция на естерификация на глицерол на модифицираните катализатори. Модифицираните със сулфонови групи катализатори с дву-дименсионална хексагонална структура от типа SBA-15 показаха по-висока активност за естерификация на глицерол, получен от възобновяеми източници, до ценните глицеролови естери.
- Разработни бяха доставящи системи на природния флавоноид кверцетин в мезопорести силикати с различна структура, модифицирани с различно количество Zn. Използваният метод на импрегниране позволи да бъде постигнат висок капацитет за натоварване на кверцетин (над 40 %) както върху изходните, така и върху цинк-съдържащите носители. За първи път беше доказано образуването на стабилен Zn:кверцетин комплекс в мезопорест силикат. Цитотоксичните експерименти доказаха, че разработената доставяща система на кверцетин има по-голям антинеопластичен потенциал спрямо ракови клетки в сравнение със свободното лекарствено вещество. Модифицираните с цинк мезопорести силикатни частици могат да бъдат надеждни носители за дермално доставяне на кверцетин.

## **1.2. Изпълнение на *Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2020*. Извършвани дейности и постигнати резултати по конкретните приоритети**

Провежданите от ИОХЦФ научни изследвания са в четири от петте приоритетни направления на Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2020, а именно: 1. Енергия, енергийна ефективност и транспорт. Развитие на зелени и еко-технологии; 2. Здраве и качество на живота, биотехнологии и екологично чисти храни; 3. Нови материали и технологии; 4. Културно историческо наследство.

Публикационната дейност на учените от института продължава да е на високо ниво като резултатите от проведените научни изследвания са отразени в **104** публикации в списания, които са реферирани и индексирани в световната система за реферирание, индексирание и оценяване, от които **89** в списания с импакт фактор и импакт ранг и **2 426** цитати. Можем да отбележим, че колегите д-р Свилен Симеонов и доц. д-р Ваня Куртева са съавтори на обзорна статия в списание Chemical Reviews с импакт фактор за 2015 – 37.4. Учените от ИОХЦФ взеха участие в 29 международни форуми с 87 устни и постерни доклада

Постигнатите резултатите в тези научни направления са свързани с изпълнението на **58** проекта, от които **15** финансирани от ФНИ, включително **3** нови за съфинансиране по COST, **9** проекта по ЕБР, **един** проект, финансиран от програма Хоризонт 2020, **9** проекта, финансирани от европейски и международни програми и фондове (Швейцарската Национална Научна Фондация, Международната агенция за ядрена енергия, ЮНЕСКО и др.), **8** проекта, финансирани по договори с министерства, ведомства, фирми от страната и чужбина и **16** проекта финансирани от БАН. Учени от института са национални представители в 6 COST акции финансирани от Европейската Научна Фондация.

Получените средства от изпълнение на проекти са: от Министерство на образованието, вкл. средства от ФНИ – 560 991 лв.; от поделение на Министерство на земеделието и храните – 6 000 лв.; по 7 РП на Европейския съюз и по програма Хоризонт 2020 – 191 449 лв.; проект, финансиран по линия на Българо-Швейцарска програма за сътрудничество 2013-2016 – 20 763 лв.; по научни проекти чрез БАН – Администрация и други институти на БАН – 85 321 лв.

През изминалата 2016 ИОХЦФ спечели **16 проекта** финансирани от БАН по „Програмата за подпомагане на младите учени“ с ръководители: гл. ас. д-р Явор Митрев, ас. Мартин Равуцов, докторант Яна Манолова, ас. Станислава Тодорова, ас. д-р Юлиана Райнова, ас. Ивалина Трендафилова, докторант Иванка Стойчева, ас. Радостина Иванова, докторант Мелиха Алиосман, ас. д-р Адриана Славова-Казакова, ас. д-р Манол Огнянов, докторант Ивайло Славчев, ас. д-р Мирослав Дангалов, ас. д-р Мая Маринова, ас. Яна Николова и ас. Ирена Загранярска. За отлично представен първи етап беше отличен проектът на докторант Мелиха Алиосман.

На последната сесия на **ФНИ „Конкурс за финансиране на фундаментални изследвания в приоритетни области – 2016 г.“** бяха одобрени за финансиране **6 проекта** с базова организация ИОХЦФ: Моделиране на процеси на образуване на пребиотични молекули на повърхността на метеорити, р-л проф. дн Венелин Енчев, Дизайн на нови мезопорести нанокompозитни лекарство-доставящи системи за цитостатици и модулатори на множествената лекарствена резистентност, р-л доц. д-р Маргарита Попова, Трансфер на сигнал в молекулната електроника чрез тавтомерен пренос на протон: малки молекули с роботизирани функции (MolRobot), р-л доц. д-р Даниела Антонова, Интегриран подход за подобряване качеството, органолептичните свойства и биологичната активност на функционални храни от арония (*Aronia melanocarpa*) чрез копигментация и синергизъм в антиоксидантната активност, р-л доц. д-р Петко Денев, Фитохимично и биологично проучване на видове от род *Inula* (*Asteraceae*) от българската флора-нови източници на биологично активни вещества, р-л доц. д-р Антоанета Трендафилова, Протеомен анализ на нови природни пептиди с антибактериална и противогъбична активност, изолирани от охлюв *Cornu aspersum*, р-л проф. д-р Павлина Долашка, и **6 проекта** с участието на ИОХЦФ: Нови блоксъполимерни носители на фенетилов естер на кафеена киселина, с р-л от ИОХЦФ чл. кор. проф. дн Вася Банкова, Дизайн на иновативни метални и хибридни цинкови покрития за подобряване на защитата от корозия на стомана с р-л от ИОХЦФ д-р Надя Табакова, Механизми, катализ и реактивоспособност при органични реакции с р-л от ИОХЦФ проф. дхн Светлана Симова, Геохимични промени в състава на органичното вещество в насипища на Източно-Маришкия басейн, с р-л от ИОХЦФ проф. д-р Мая Стефанова, Фенотипиране и генотипиране на образци пипер (*Capsicum annuum* L.) с произход Балканите за създаване на core-колекция, с р-л от ИОХЦФ доц. д-р Петко Денев и Промени в състава и термодинамичните свойства на мозъчния протеом при невродегенеративни нарушения – връзка на екзотермните процеси в протеома с механизма на формиране на плаки с р-л от ИОХЦФ проф. д-р Павлина Долашка.

Радостен е фактът, че младите колеги от института спечелиха 3 от финансираните 4 проекта в конкурса на **ФНИ за „ФИНАНСИРАНЕ НА НАУЧНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ НА МЛАДИ**

**УЧЕНИ - 2016**“ в направление „Химични науки“, а именно: Нови монометин цианинови багрила като потенциални нековалентни биомаркери: синтез, охарактеризиране и изследване на фотофизични свойства, с р-л ас. д-р Атанас Куруто, Разработване на нови молекулни сензори, базирани на тавтомерен пренос на протон, с р-л ас. д-р Вера Денева, Разработване на нови наноструктурирани мулти-компонентни материали на основата на промотирани с Се, Zr и Sn мед-титаново-оксидни системи с потенциално приложение като катализатори за получаване на алтернативни горива и опазване на околната среда, с р-л ас. д-р Глория Исса.

През 2016 г. ИОХЦФ спечели проект за подпомагане на организацията на Първата международна конференция по биоантиоксиданти на тема: „Природните биоантиоксиданти - като основа за нови синтетични лекарства и хранителни добавки” в София през 2017 г. ИОХЦФ-БАН е организатор на международната проява, а доц. д-р инж. Весела Кънчева е председател на организационния комитет.

През изминалата година отбелязахме 50-годишнината от въвеждане на ЯМР метода в България. Първата ЯМР лаборатория в страната и в региона беше основана с инсталирането на ЯМР спектрометър с работна честота 60 МХц през 1966 г. На годишнината на Центъра по ЯМР спектроскопия беше посветен и проведения от 18 до 20 септември 2016 г. в София **XVIII Симпозиум по ЯМР спектроскопия и Срещата на потребителите на ЯМР спектрална апаратура от фирма „Bruker Biospin” в страните от Централна и Източна Европа (CEUM 2016)**. В симпозиума взеха участие 85 учени от 12 страни (България, Румъния, Сърбия, Белгия, Словения, Унгария, Полша, Германия, Гърция, Франция, Швеция, Португалия), сред които и много млади учени. Проектът беше съфинансиран по проект на ФНИ за за подпомагане на организацията на научни прояви в страната. В рамките на симпозиума учени от осем европейски държави представиха постижения в изключително динамични области на магнитния резонанс като нови методи за регистрация и обработка на многомерни спектри, за изследване на структура и динамика на биомолекули и за ЯМР метаболомика. Представени бяха и последните постижения на магнитния резонанс в областта на материалознанието, включително метода за динамична ядрена поляризация. Сред значимите резултати на научния форум са създадените нови контакти между младите учени в региона, както и тези с утвърдени учени от страните на Европейското изследователско пространство. Присъдени бяха постерни награди, в това число и специалната награда, посветена на 80 годишнината на един от основателите на лабораторията проф. Валентин Димитров (1936-2005).

Учени от ИОХЦФ взеха участие в организирането на **Деветата конференция на Асоциацията за лечебни и ароматични растения на страните от Югоизточна Европа съвместно с Българското фитохимично сдружение**, която се проведе в Пловдив от 26 до 29 май 2016. Председател на организационния комитет беше чл. кор. проф. дн Вася Банкова, член – доц. д-р Калина Алипиева, а членове на научния комитет – проф. дн Светлана Симова и доц. д-р Милена Попова. В конференцията участваха над 150 учени от 26 държави.

Приложните разработки на учени от института традиционно печелят награди. През м. март 2016 г за заслуги към Българската академия на науките на проф. Петър Недков беше връчена престижната награда „Марин Дринов“ на лента. Високото отличие е за неговия личен принос за създаването на иновативни препарати за лечение на хронични рани.

Колектив с ръководител проф. д-р Павлинка Долашка и участници гл. ас. д-р А. Долашки, гл. ас. д-р Л. Велкова беше награден със златен плакет на "VII Национално изложение за изобретения, трансфер и иновации - 2016". Проф. д-р Павлина Долашка участва в VIII Европейска среща за иновации, проведена от 14 до 17 ноември 2016 в Европейския парламент в Брюксел. Тя представи разработката по изолиране и характеризиране на биологично активни вещества, патентована през 2015 г. с автори проф. д-р Павлина Долашка, гл. ас. д-р Людмила Велкова и гл. ас. д-р Александър Долашки.

През изминалата година общоинститутският семинар даде трибуна за докладване на съвременни научни разработки, представени от водещи в своята област специалисти - проф. Стойчо Язджиев от Физически Факултет, СУ „Св. Климент Охридски“, доц. д-р Станислав Балухев от Института по полимери „Макс – Планк“, Майнц, Германия, доц. д-р Иван Бъчваров от Физически Факултет, СУ „Св. Климент Охридски“, проф. Jérôme Lacombe от департамента по органична химия към Университета в Женева, д-р Румен Воденичаров, както и даде трибуна на заключителната среща и представяне на основните резултати по проект PhytoBalk, финансиран по българо–швейцарската програма за научно сътрудничество 2013-2016 - д-р Калина Данова, д-р Evelyn Wolfram и инж. Samuel Peter от Университета за приложна наука на Цюрих, Института по химия и биотехнологии, фитофармация и природни продукти, Ваденсвил, Швейцария.

### **1.3. Полза / ефект за обществото от извършваните дейности**

Научно-изследователска дейност на учените от института е свързана с разработки, които са с пряка полза за обществото.

Центърът по ЯМР спектроскопия извършва изследователска, преподавателска и експертна дейност при непрекъснат режим на работа в сътрудничество с повечето университети и научни организации в страната, както и с водещи изследователски центрове в чужбина. Учени от института са изготвили експертни становища за Софийски градски съд в качеството си на вещи лица.

Под ръководството на проф. Петър Недков продължи приготвянето на препаратите Neprolysin и Post-NeproI и техни производни, като се получават отлични отзиви за техните лечебни резултати.

Приоритет в научната дейност на ЛБАВ е изучаването на биологично активните компоненти в български плодове, зеленчуци и билки и тяхното въздействие върху човешкия организъм. На базата на тези изследвания се създават технологии за функционални храни и адитиви с антиоксидантна и имуностимулираща активност, които да се използват за превенция на социално-значими заболявания.

Направен беше принос към решаване на екологични проблеми, като беше показана възможността за ефективно оползотворяване на органични отпадъци чрез получаване на тяхна основа на високо технологични продукти и беше установена възможността за тяхното приложение за пречистване на вода и въздух.

За първи път са сравнени свойствата на етанолни и водни екстракти на облъчени и необлъчени с гама лъчи традиционни български чайове, консумирани от имуноподтиснати пациенти. Установено е, че и в двата случая се наблюдава повишаване на общото количество на феноли след облъчване. Установено е наличие на танини само в някои от чайовете, като количеството им след гама-облъчване също се повишава.

### **1.4. Взаимоотношения с други институции.**

Сътрудничеството ни с редица научни институти от БАН и университети в страната е свързано с изпълнение на договори по научно-изследователски проекти. Дългогодишни са връзките ни с колеги от други институти на БАН - Институт по полимери, Институт по обща и неорганична химия, Институт по катализ, Институт по микробиология, Институт по физикохимия, Институт по физиология на растенията и генетика, Институт по невробиология, Институт по биоразнообразие и екосистемни изследвания, Институт по микробиология и Национален



природо-научен музей, Институт по електрохимия и енергийни системи, Институт по оптически материали и технологии, както и с повечето Университети: Факултет по химия и фармация и Биологически Факултет на СУ „Св. Климент Охридски“, Факултет по фармация на МУ - София, Агробиоинститут – Селскостопанска академия, ПУ „Паисий Хилендарски“, ЮЗУ „Неофит Рилски“, Тракийски Университет – Стара Загора, Русенски университет „Ангел Кънчев“ – филиал Разград, Аграрен университет – Пловдив. Учените от ИОХЦФ предоставят и експертни становища за държавни институции.

## **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/.**

**23 учени от института участват в 21 експертни органи**, като например: Национална Агенция за Оценка и Акредитация, Съюз на Учените в България, Съюз на химиците в България, Съюз на изобретателите в България, Българско фитохимично сдружение, European Society for Photobiology, European Federation for Lipid Science and Technology, Deutsche Gesellschaft fuer Fettwissenschaft, Gesellschaft Deutscher Chemiker, Fachgruppe Magnetische Resonance, International Honey Commission, Society for Medicinal Plant and Natural Product Research, Association for Medicinal and Aromatic Plants of Southeastern Europe, European Food Safety Authority, International Union of Pure and Applied Chemistry, French Organic Geochemistry, Българско Пептидно Дружество, Българско кристолографско дружество, European Peptide Society, International Humus Science Society, American Chemical Society, Swiss Chemical Society.

Учените от лаборатория ХТГ са включени в базата данни на Комитета на НАТО по индустриално планиране (IPC) за разработчици и производители на материали за химическа, биологическа и радиационна защита към Министерството на икономиката.

Учени от ИОХЦФ извършват експертна дейност като оценители на научни проекти в програмите на ЕК. Проф. дн С. Симова, проф. дн Л. Антонов и доц. д-р П. Шестакова са участвали през 2016 година като експерти към Европейската комисия по програми Мария Склодовска-Кюри (Horizon 2020), а доц. д-р Петко Денев е бил оценител на проекти по програма Eurostars (Co-funded by EUREKA member countries and Horizon 2020 Framework Programme). Проф. д-р Павлина Долашка е участвала като независим експерт по ОП "Конкурентоспособност".

Доц. д-р Весела Кънчева е участвала в изготвяне на експертни оценки като Зам. Председател на ПНЕК по двустранно сътрудничество и по програма COST и е била член на ВНЕК по Химически науки 2016.

През изминалата 2016 година проф. дн Светлана Симова участва в заседанията на постоянната комисия по природни науки, математика и информатика при НАОА и като наблюдаващ при акредитацията на докторска програма по направление химически науки в Университет по хранителни технологии в Пловдив.

От Центъра по ЯМР беше извършена консултантска дейност и качествен и количествен анализ на продукти, произведени или извлечени в производствени предприятия в страната, както и такива от внос. През настоящата година помощ за анализ на химически продукти беше оказана на следните производствени предприятия: КОНТИЛИНКС ТРЕЙДИНГ И АГЕНТСТВО ЕООД, Кортек Нет България, Елаците-Мед АД, Балканфарма Троян АД, "КУПРО-94" ООД, „Гален-Н ЕООД" и СиПиЕй ЕООД“.

В Лабораторията по Инструментална хроматография бяха проведени анализи на серия

търговски проби розово масло, розово абсолю, етерично масло от маточина и др. по заявка на фирми. Разработена беше аналитична процедура за количествен анализ на розмаринова киселина в сух екстракт от *Melissa officinalis*.

Чрез използването на инфрачервена спектроскопия, както и ЯМР спектроскопия, бяха охарактеризирани знакови технологии (мазилки, стенописи, пигменти и органични компоненти) от тракийски гробници и есхари, от Казанлъшко, Мъглиж, Долно Луково, Ружица, Хелвеция и др. Изследванията са част от проект „ТРАКИТЕ - генезис и развитие на етноса, културни идентичности, цивилизационни взаимодействия и наследство от древността“, провеждан в сътрудничество с други институти на БАН, подкрепени с дарения на г-н Петър Манджуков и д-р инж. Добрин Иванов.

В лаборатория Химия на твърдите горива се провеждат регулярно анализи на проби нефтен кокс на фирма „Огняново-К“ АД, като резултатите подпомагат избора на доставчик на нефтен кокс.

### **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.**

По поръчка на фондация „Информация и природозащита“ бяха разработени ефективни технологии за получаване на фитоекстракти от цветовете на липа, лайка и невен, на етерично масло от плод хвойна и на семенно масло от шипка, чрез екстракции със суперкритичен въглероден диоксид. Разработката е по проекта на фондация „Информация и природозащита“ „Модел за опазване и устойчиво ползване на лечебните растения на общинско ниво с участието на организациите на гражданското общество, местните общности и медиите“, финансиран от Българо-швейцарската програма за сътрудничество чрез „Фонд за реформи, свързани с участието на гражданското общество“. Ръководител на проекта е проф. дн Владимир Димитров, а участници ас. д-р Ангел Конакчиев, доц. д-р Милена Попова, доц. д-р Светлана Момчилова, ас. Яна Николова, хим. Събина Тенева, ас. д-р Мариана Каменова.

През 2016 г. беше сключен договор за научно-приложен проект с фирма “ВИТАНЕА” ООД на тема: „Получаване на биологично активни компоненти за функционални храни и адитиви от плодове, зеленчуци и билки и технологии за тяхното производство” с ръководител доц. д-р М. Крачанова. В рамките на проекта през 2016 г. беше разработена и внедрена технология за билков сироп от котешка стъпка (*Clinopodium vulgare*), арония и червено грозде мавруд „Клиновитал“, както и билков сироп от черен бъз, арония „Витафит“ и водни билкови екстракти.

През изминалата година в ИОХЦФ беше проведено обучение на 13 студенти, а в подготовка са над 10 нови практики в рамките на втория етап на проект „Студентски практики“, финансиран по ОП „Развитие на човешките ресурси“, съфинансирана от Европейския социален фонд.

## **2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНОИЗСЛЕДОВАТЕЛСКАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2016 ГОДИНА**

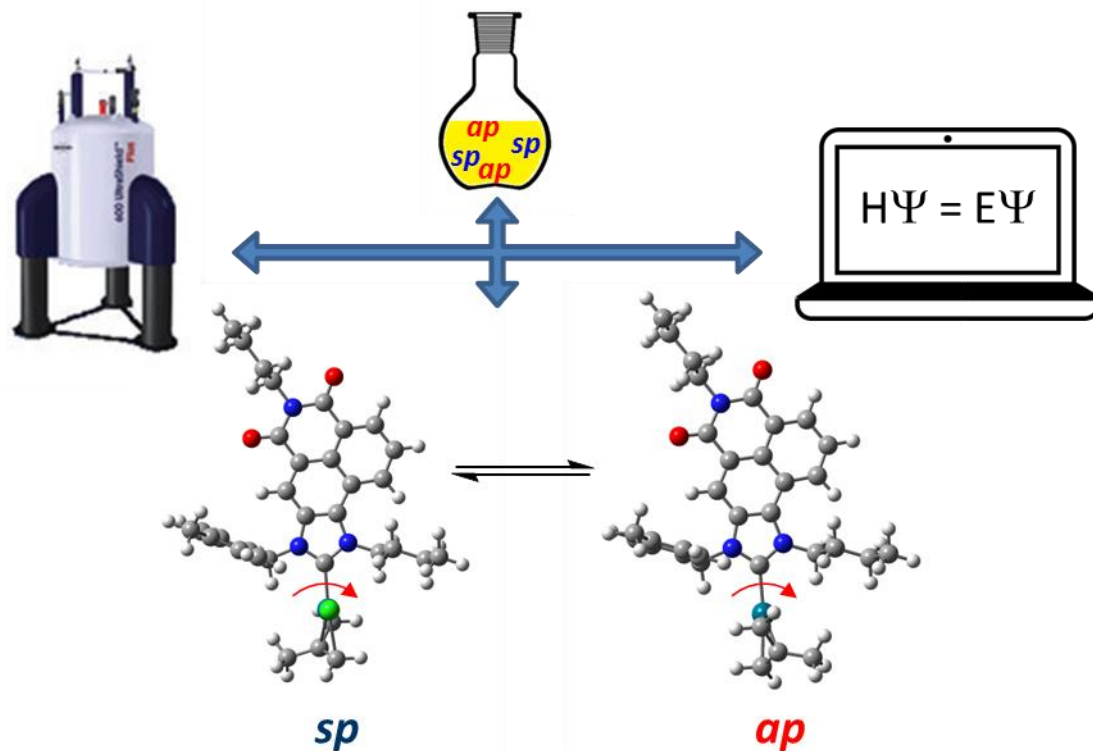
**Според преценките на четирите Колоквиума, предлагаме следните научни и научно-приложни постижения на ИОХЦФ.**

### **2.1. НАУЧНО ПОСТИЖЕНИЕ**

**Нови Pd(II) и Pt(II) комплекси с потенциално приложение в органичния хомогенен катализ**

Синтезирани и охарактеризирани са шест нови паладий(II) и платина(II) комплекси с потенциално приложение в органичния хомогенен катализ. Тези комплекси включват N-хетероцикленни карбени и са получени от заместени 1,8-нафтилимиди и алилни лиганди. Структурата и конформацията на комплексите е доказана чрез комбинация от изследвания с методите на динамична ЯМР спектроскопия и с изчислителни методи на база функционал на плътността. Проведени са конформационни изследвания по отношение на затруднената ротация около връзката Pd-C (Pt-C). Резултатите от експерименталните и теоретични изследвания позволяват еднозначно определяне на механизма на обменния процес в тези комплекси като затруднена ротация около връзката Pd-C (Pt-C).

**Ръководител на разработката: доц. д-р Николай Василев**



Доказана е структурата на шест нови ННС паладиеви и платинови комплекси с потенциално приложение в органичния хомогенен катализ чрез изследване на химичния обмен посредством ЯМР спектроскопия и изчислителни методи.

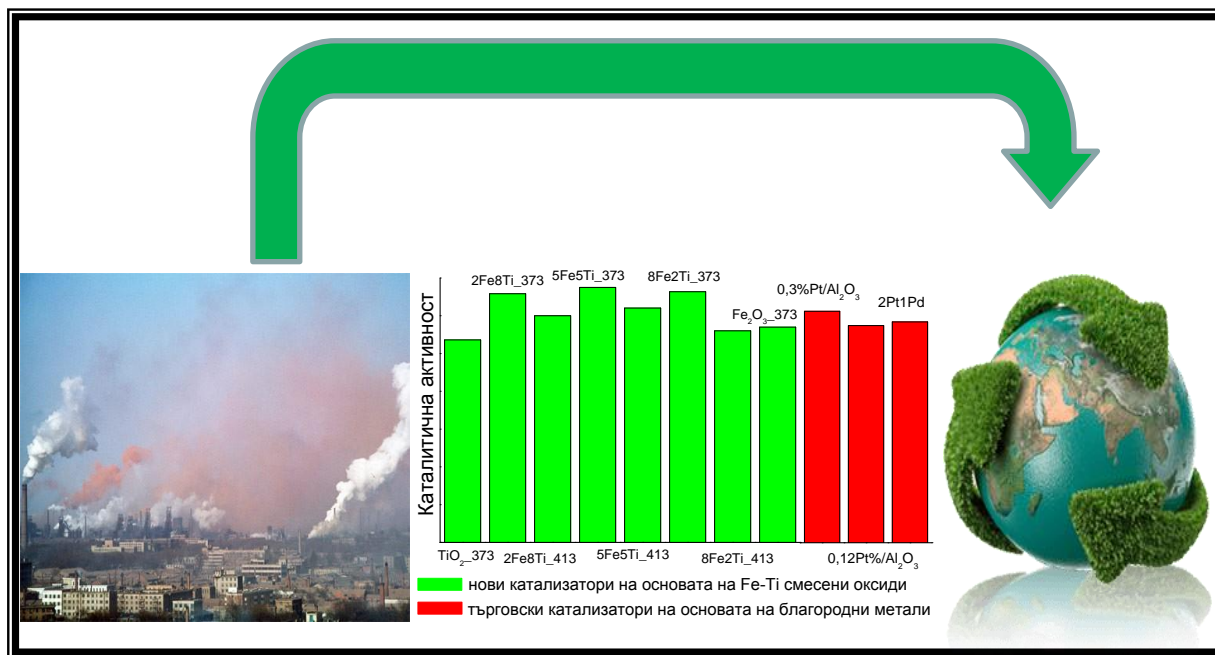
## 2.2. НАУЧНО - ПРИЛОЖНО ПОСТИЖЕНИЕ

**Ефективни катализатори на основата на желязо-титан смесенооксидни наноматериали за унищожаване на вредни емисии от летливи органични съединения във въздуха**

Разработката засяга решаването на екологични проблеми, свързани със замърсяването на въздуха с един от най-често използваните в индустрията разтворители, етилацетат. На основата на смесени мезопорести желязо-титан оксидни системи са разработени евтини катализатори, които по своята активност и селективност са близки, а в някои случаи и по-добри, от най-често описваните в литературата. Оригиналноста на разработката е в разкриване на научно обоснован подход за лесно и контролирано оптимизиране на каталитичната активност чрез вариране на състава и температурата на синтез на катализаторите. Доказано е, че активността на желязо-титан оксидните катализатори се определя предимно от състоянието на желязото в тях. Демонстрирано е, че сравнително малки добавки на желязо към титановия оксид при помехи условия на получаване на катализаторите водят до изоморфно заместване на  $Fe^{3+}$  йони и генериране на дефекти в титаново оксидната кристална решетка. Това подпомага кристализирането на фино дисперсни хематитни частици, които в синергично действие с

титановия оксид обуславят висока каталитична активност и селективност в пълно окисление на етилацетат.

Ръководител на разработката: проф. дн Таня Цончева



### 3. МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ЗВЕНТО.

През изминалата година учените от ИОХЦФ са работили по изпълнението на 15 проекта, които са получили финансова подкрепа по договори и програми с ЕС и международни организации, от които един проект е по Хоризонт 2020, 4 проекта са финансирани от европейски и международни програми и фондове (Швейцарската Национална Научна Фондация, Международната агенция за ядрена енергия, ЮНЕСКО и др.), 6 COST акции, финансирани от Европейската Научна Фондация и 4 проекта, финансирани от чужди фирми.

В рамките на договори и спогодби на ниво Академия в ИОХЦФ са разработвани 9 проекта с редица страни – Белгия, Чехия, Унгария, Сърбия, Италия, Полша, Египет, Украйна и Македония. Проведени са и изследвания в резултат на сътрудничество с учени от Швейцария, Холандия, Норвегия, Япония, САЩ, Индия, Монголия, Испания, Индонезия и др. Във връзка с провеждане на съвместни изследвания, разработване на нови проекти, специализации и консултации ИОХЦФ е бил посетен от 11 чуждестранни учени от 7 страни.

**Най-значимият международно финансиран научен проект на ИОХЦФ, разработван през 2016 г. е:**

**“Експлоатация на страничните продукти от ароматични растения за разработка на нови козметични и хранителни добавки” (EXANDAS - H2020-MSCA-RISE-2015), с координатор за ИОХЦФ проф. дхн Владимир Димитров**

Проектът EXANDAS има за цел прилагането на най-съвременни технологии в областта на химията на природните продукти за пълно и ефективно оползотворяване на терапевтичния потенциал на отпадъци и странични продукти от преработката на лечебни и ароматични растения. Работи се по създаването на нови възможности за производство на иновативни продукти с висока добавена стойност в областта на козметичните препарати и хранителните добавки, като едновременно с това се преодоляват съществуващи екологични предизвикателства. Изпълнението на проекта EXANDAS се стреми да развие успешен и устойчив международен и междусекторен модел на сътрудничество, който ще допринесе към

иновативния потенциал на Европа за най-ефикасното използване на природни ресурси и развитието на новаторски козметични продукти и хранителни добавки.

Научните цели на проекта се осъществяват чрез обмен на учени между академични институции и фирми.

В ИОХЦФ се създава и в рамките на 2017 г. ще бъде в експлоатация апаратура за радиовъглеродно датироване. Закупен е и пуснат в експлоатация „ултра нискофонов“ сцинтилационен детектор за определяне на концентрации на радиовъглерод ( $C^{14}$ ) в проби, получени от археологически обекти (дърво, тъкани, кости и др.). Апаратът е закупен и инсталиран в началото на 2008 година. Пробоподготовката, за да се проведе измерване включва химически процес на превръщане на въглерода от обектите във бензен, който подлежи на измерване за съдържание на радиовъглерод, с помощта на сцинтилационния детектор. Понастоящем, апаратурата за осъществяване на пробоподготовка и получаване на бензен от археологически обекти е в процес на изграждане, чрез финансиране от „Международната агенция за ядрена енергия“ (проект BUL0011 стартираше в началото на 2016 г.). Проектът е с ръководител проф. д-р Владимир Димитров (от страна на ИОХЦФ) и доц. д-р Петя Ковачева (от страна на ФХФ, СУ „Св. Климент Охридски“). Бюджета на проекта е 129 000 евро, като тези средства се управляват от „Международната агенция за ядрена енергия“.

Успешно приключи и работата по проект на тема: **Нова концепция за трансформация на въглехидрати до ценни химически продукти, финансиран от PhosAgro/UNESCO/IUPAC Partnership in Green Chemistry for Life**, с ръководител д-р Свилен Симеонов. Изпълнението на проекта е в сътрудничество с Университета на Лисабон, Португалия и Технологичния Университет на Виена, Австрия. Проектът беше насочен към провеждане на фундаментални научни изследвания в областта на биорафинерията и използването на въглехидратите като биовъзобновима суровина с цел да се отговори на актуалните потребности на обществото за нови, модерни и нетоксични биовъзобновими химически продукти. В рамките на проведените изследвания беше разработен и оптимизиран нов подход за получаване на полиалкохоли с приложение като мономери за получаване на хидрогелове. Бяха идентифицирани още 4 съединения достъпни чрез прегрупировка на Ахматович, 3 киселини и 1 алкохол, които отговарят на първоначално зададените критерии за ниска токсичност и потенциал за индустриално производство, като оптимизацията на реакционните условия ще бъде обект на следващи изследвания.

През изминалата 2016 година завърши работата по изпълнението на проект **“Стандартизиран биотехнологичен добив на фитофармацевтични средства от ценни балкански лекарствени растения чрез оценка на биологичната им активност“ (PhytoBalk)** с ръководител гл. ас. д-р К. Данова, финансиран от Швейцарската Национална Научна Фондация и МОН по **Българо-Швейцарска програма за сътрудничество 2013-2016**. Създадена беше *in vitro* колекция от лечебни и ароматични растения, характерни за Балканския полуостров. Установени бяха протоколи за контролираната продукция на биологичноактивни вещества с терапевтичен потенциал, като: балкански ендемит *Pulsatilla montana ssp. balcana* (котенце); *Sideritis scardica* (Мурсалски чай); *Artemisia alba* (бял пелин); *Inula britannica* (британски оман); видове от род *Hypericum* (кантарион); *Clinopodium vulgare* (котешка стъпка). Бяха установени ацетилхолинестераза- и липаза-инхибиторни активности в получени проби от отгледаните растения и беше определено съдържанието на полифенолни съединения и терпени обуславящи тяхната биологична активност. Установен беше процес за получаване на голямо количество растителна биомаса в биореакторна система (RITA temporary immersion system) от *Pulsatilla montana ssp. balcana* (котенце).

В рамките на проект: **SupraMedChem@Balkans.Net: Биомедицинско измерение на супрамолекулната химия в обучението и научните изследвания на Балканите**,

финансиран от Швейцарската национална научна фондация в партньорство с Университета на Фрибург (Швейцария) и Университета на Крагуевац (Сърбия) беше организирано Международно лятно училище по надмолекулярна химия за студенти, докторанти и млади учени, което се проведе в Боровец от 16.06 до 18.06. 2016 с 41 участници от България, Сърбия, Хърватска, Швейцария, Германия и Франция. Изнесените лекции разглеждаха съвременните аспекти на надмолекулярната химия в рентгеноструктурния анализ, молекулярната спектроскопия и теоретичните методи. Беше организирана специална лекционна сесия по бионеорганична химия, както и постерна сесия, където бяха представени 24 постера. Ръководител на проекта от ИОХЦФ е проф. дн Людмил Антонов.

#### **4. УЧАСТИЕ НА ЗВЕНТО В ПОДГОТОВКАТА НА СПЕЦИАЛИСТИ**

**6 учени** от ИОХЦФ (чл. кор. проф. дн В. Банкова, доц. д-р Н. Василев, проф. д-р М. Стефанова-Петрова, проф. д-р П. Долашка, доц. дн И. Стойнева, д-р Явор Митрев) са чели лекционни курсове и са водили семинари и упражнения в бакалавърски и магистърски програми във Факултета по химия и фармация – СУ ”Св Климент Охридски”, Химикотехнологичен и металургичен университет-София, Югозападен Университет ”Неофит Рилски”, Биологически факултет към Софийски университет, Минно-геоложки университет ”Св. Ив. Рилски” и към Центъра за обучение - БАН.

През изминалата година в ИОХЦФ са се обучавали 12 докторанти, защитили са 6 докторанти. В резултат на обявени конкурси по ЗРАСРБ са избрани трима доценти и двама главни асистенти.

#### **5. ИНОВАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНТО И АНАЛИЗ НА НЕЙНАТА ЕФЕКТИВНОСТ**

Съгласно класификацията на Центъра за иновации към БАН, основната част от разработките на ИОХЦФ през 2016 г. са на различен етап от iR-изследователска фаза. Като разработка с висока степен на зрялост iM и защита на интелектуална собственост iP4 е един полезен модел, който беше издаден 2016: „Състав на водоразтворима форма на прополис“, с автори П. Петров, Хр. Цветанов, П. Тонева, В. Банкова, Б. Трушева и М. Попова.

ИОХЦФ поддържа и **патентите** „Биологично активен продукт, съдържащ хемоцианин“ с автори П. Долашка-Ангелова, А. Долашки, Л. Велкова, „Инхибитор за защита от корозия на метали и сплави в кисели среди“ с автори Н. Табакова-Асенова, Я. Стейскал, И. Пожарлиев, Н. Петкова, В. Мирчева, Н. Божков и „Метод и състав за пречистване на води от масла и органични съединения“, с автори В. Бешков, В. Мирчева, М. Ал Афори, Н. Табакова.

В процедура са следните **7 патенти**: „Биокомпоненти от охлюви“ с автори П. Долашка-Ангелова, А. Долашки, Л. Велкова; „Екстракти от охлюв *Helix aspersa*, а автори П. Долашка-Ангелова, Л. Велкова; „Опитни образци от слуз от охлюви *Helix aspersa* за козметичната и хранително-вкусовата промишленост“, с автори П. Долашка-Ангелова, Л. Велкова, А. Долашки; „Устройство за събиране на екстракт от градински охлюв“ с автори П. Долашка-Ангелова, Д. Атанасов; „Наноразмерни полиелектролитни асоциати с противотуморно действие, метод за тяхното получаване и приложението им“ с автор от ИОХЦФ доц. д-р П. Шестакова; „Метод за синергично повишаване на антиоксидантната активност на плодови и билкови екстракти“ с автори: доц. д-р М. Крачанова, доц. д-р П. Денев, проф. Хр. Крачанов; „Електролит за електроекстракция на цинк с инхибитор на обратното разтваряне на цинка“ с автори И. Кръстев, И. Иванов, Н. Табакова, И. Енчев, Я. Стефанов, Ц. Добрев и **един полезен модел** „Състав за синергично повишаване на антиоксидантната активност на плодови и билкови екстракти“ с автори М. Крачанова, П. Денев, Хр. Крачанов.

#### **6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНТО**

##### **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;**

Извършен беше качествен физико-химичен анализ на 56 партиди плодови сокове, нектари и сиропи, 35 партиди гранулирани пектини и две партиди плодов чай, произведени от фирма ВИТАНЕА.

Разработена беше технология за лечебен винен оцет от арония, която е на етап производствено внедряване във „ВИТАНЕА”, планирано за 2017 г.

Разработена беше технология за инфузионен чай от арония, внедрена в производството през 2016 г. Произведеният продукт е посрещнат добре на пазара у нас и в чужбина (Словения, Хърватска, Япония, Корея). Очаква се определен икономически ефект в производството на ВИТАНЕА през 2017 г.

По заявка на фирма Роял Бийс бяха проведени серия от анализи за определяне на качеството на суров прополис и прополисови екстракти. Ръководител за изследванията е чл. кор. проф. дн Вася Банкова.

Бяха синтезирани органични съединения за нуждите на фирма CNM Technologies GmbH. Ръководител на проекта е проф. дн Вл. Димитров и участник ас. д-р Мариана Каменова.

Беше сключен договор с фирма “ГЛЕ“ ООД, преименувана в „ПОБЕЛЧ-ГЛЕ“ ООД за „Разработване на методи за оползотворяване на индустриален коноп“, ръководител: проф. дн Вл. Димитров и участници: доц. д-р Павлета Шестакова, ас. д-р Ангел Конакчиев, ас. д-р Мариана Каменова, ас. Яна Николова, ас. Красимира Дикова.

Изпълняван е договор с фирма „А.Д.А.“ ЕООД за „Разработване на съставки за козметични продукти на базата на български етерични и други масла“ с ръководител: проф. Владимир Димитров и участник ас. д-р Ангел Конакчиев.

Продължава работата по оценка на стабилността при съхранение на инсектицида перметрин в търговския продукт Zeckenrollen, по заявка на холандската фирма Roekel&Dalsum.

Приходи са постъпили и от изпълнение на договори с фирмите: Toyota Motors Europe – Белгия и фирма Поленержи – Франция.

## **6.2. Отдаване под наем на помещения и материална база**

<b>Фирма</b>	<b>Сума за годината в лв.</b>
“Свети Никола“ ЕООД	5 586 лв.
ЕТ „Влади – Пламен Василев”	1 282 лв.
“Гален-Н” ЕООД	3 943 лв.
„ВНГ Груп” ООД	60 000 лв.
„ВНГ Груп” ООД – приходи от наем срещу инвестиция	47 742 лв.
“Солво” ООД	1 174 лв.
“Арх Ком” ООД	1 941 лв.
“Холоист” ООД	7 276 лв.
“ИТЦ“ ООД	4 157 лв.
“СМС България” ООД	1 760 лв.
“Теленор България ” ЕАД	9 600 лв.
“Дабъл Ю Комюникейшън” ЕООД	1 477 лв.
„Балев Корпорейшън” ЕООД	5 633 лв.
”Акредитив финанс” ЕООД	2 738 лв.
„Аспарухов 2002” ООД	1 579 лв.
„ГЪЛЪБ-87” ЕООД	1 056 лв.
„Гле ООД“ ООД	6 759 лв.
„Биовет“ АД	6 050 лв.
„Кортек Нет България “ ЕООД	3 188 лв.
„Кермит“ ЕООД	5 366 лв.
„Пролаб инструментс“ ЕООД	9 245 лв.

„Саба инженеринг“ ООД	3 385 лв.
„Сентър фор дистраптив иноуейшънс“ ООД	3 286 лв.
„АУТОМАТ КАФЕ ООД	352 лв.
„Алкол холдинг груп“ ООД	4 882 лв.
„Планед 12“ ООД	1 807 лв.
„Меа 360“ ЕООД	3 325 лв.

ОБЩО: 156 846 лв. без ДДС. /без сумата 47742 лв. наем от ВНГ Груп ООД срещу Инвестиция/. Преведени са данъци по ЗКПО и в партида “Развитие” при БАН - Администрация са преведени 75 582 лв.

**Остатъкът за ИОХЦФ е 75 126 лв.**

### 6.3. Друга стопанска дейност

**Приходите от сервизни дейности са в размер на 43225 лв., разпределени по лаборатории и анализи както следва:**

Лаборатория ЯМР	15 185 лв.
ИЧ спектроскопия – лаб. СОА	505 лв.
Елементен анализ	1 625 лв.
Лаб. ГХ/МС	2 310 лв.
Непролизин	17 010 лв.
Лаборатория Природни вещества	2 570 лв.
Флуоресцентен анализ	813 лв.
Анализи лаб. ОСС	420 лв.
Лятна школа	1 947 лв.
Анализи лаб. ХТГ	840 лв.

**Получени средства по договори с фирми от чужбина – 22 851 лв.:**

- договор с “Toyota Motors Europe” – Белгия	11 338 лв.
- договор с фирма Поленержи – Франция	1 661 лв.
- договор с фирма “Roekel & Dalsum” B.V., Холандия	3 167 лв.
- договор с фирма CNM Technologies GmbH	5 515 лв.
- договор с университет Колумбия	1 170 лв.

**Получени средства по договори и заявки на български фирми – 52 760 лв.:**

- фирма Витанеа ООД	23 410 лв.
- Фондация Информация и природозащита	17 167 лв.
- фирма Роял Биис ЕООД	783 лв.
- фирма Алгае ООД	452 лв.
- фирма Подбелч Гле ООД	7 872 лв.
- Д-р Деница Гроздева	877 лв.
- фирма А.Д.А. ЕООД	2 000 лв.

## 7. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ФИНАНСОВОТО СЪСТОЯНИЕ НА ИОХЦФ ЗА 2016

Бюджетната субсидия за 2016 год. е била **1 586 283 лв.** Очакваме актуализация на бюджетната субсидия с допълнителни средства за платени данък върху недвижимите имоти, такса за битови отпадъци и за процедури за придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности – **20 284 лв.**

Към момента 84% от бюджетната субсидия е усвоена за фонд “Работна заплата”, обезщетения по КТ, разходи за конкурси по ЗРАСРБ, болнични от работодателя, задължителни осигурителни вноски от работодателя, стипендии на докторантите. Останалите 16% от бюджетната субсидия са изразходвани за заплащане на 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 /ПИИ, копирна техника, асансьори, телефонна централа, извозване на отпадъци/, застраховки и разходи за служебен автомобил, разходи за поддръжка на ЯМР спектрометрите, стъклодувната работилница и сървъра на Института, канцеларски и хигиенни материали, пощенски и куриерски услуги и др. са платени от собствени приходи на Института.

През 2016 ИОХЦФ кандидатства и спечели проект за саниране на сградата на института по Инвестиционна Програма за Климата, финансирана от Национален доверителен екофонд, който се очаква да бъде реализиран през 2017 г.

## **8. ИНФОРМАЦИЯ ЗА НАУЧНИЯ СЪВЕТ НА ИОХЦФ**

### **Приложение 1**

## **9. КОПИЕ ОТ ПРАВИЛНИКА НА ИОХЦФ**

[http://www.orgchm.bas.bg/vutreshna\\_info.html](http://www.orgchm.bas.bg/vutreshna_info.html)

## **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

НАОА – Националната агенция за оценяване и акредитация

ЛБАВ – Лаборатория “Биологично активни вещества”

Лаб. СОА – Лаборатория Структурен органичен анализ

Лаб. ХТГ – Лаборатория Химия на твърдите горива

Лаб. ОСС – Лаборатория Органичен синтез и стереохимия

Лаб. ГХ/МС – Лаборатория Газова хроматография/Масспектрометрия