

ИНСТИТУТ ПО ОРГАНИЧНА ХИМИЯ С ЦЕНТЪР ПО ФИТОХИМИЯ

ГОДИШЕН ОТЧЕТ ЗА 2012 ГОДИНА

1. ПРОБЛЕМАТИКА НА ЗВЕНТОТО

1.1. Преглед на изпълнението на целите /стратегическа и оперативни/ и оценка на постигнатите резултати в съответствие с мисията и приоритетите на звеното, утвърдени от ОС на БАН при структурните промени през 2010 година.

Институтът по органична химия с Център по фитохимия извършва фундаментални и приложни научни изследвания, обучение и експертна дейност в областта на органичната, металоорганичната и биоорганичната химия, развитие на експериментални синтетични, спектроскопски и изчислителни методи, насочени към разработване на стратегии за дизайн и синтез на нови съединения и подходи за изучаване на природни продукти.

Постигнатите резултати от ИОХЦФ през отчетната 2012 година са в съответствие с мисията и приоритетите на звеното. Благодарение на усилията на учените от института са разработвани 88 проекта и са организирани две международни мероприятия, получили финансиране по национални и международни програми и от фирми. Учените от института са работили и по 5 проекта финансирани от 7 FP и са взели участие в 4 COST акции. През отчетната 2012 лаборатория „ЯМР“ завършва два инфраструктурни проекта – един с ФНИ и един по 7^{ма} рамкова програма, които имат за цел изграждане на съвременна и ефективна ЯМР инфраструктура. През изминалата година беше организиран 14-тият Симпозиум по ЯМР спектроскопия и среща на потребителите на ЯМР спектрална апаратура на фирма „Bruker Biospin“ в страните от Централна и Източна Европа (CEUM 2012) (14th Central and Eastern European NMR Symposium and Bruker Users' Meeting), който даде възможност на младите учени в страната и региона да се запознаят с най-новите методики и тенденции за използването на новозакупеното оборудване в изследователската и приложна дейност. Оценка за дейността ни през последните години беше признаването на лабораторията по ЯМР от Европейската комисия за Европейска изследователска инфраструктура под номер 852. Отправено е искане до Министъра на образованието, младежта и науката за признаването и на национално ниво на лабораторията като Национален Център по ЯМР спектроскопия, което е подкрепено от НС на ИОХЦФ и от УС на БАН.

ИОХЦФ беше организатор и на Лятно училище по надмолекулярна химия, което се проведе през май в София с участието на около 70 учени от Балканския регион, Швейцария и Германия. Мероприятието е в рамките на проект по програма SCOPES на Швейцарската национална научна фондация SupraChem@Balkans.eu: Supramolecular Training for students and young researchers in the Balkan area (Обучение по надмолекулярна химия за студенти и млади учени от Балканския регион) между Университетите във Фрибург (Швейцария), Белград (Сърбия) и ИОХЦФ-БАН.

Със своите научни резултати и разработки учените от ИОХЦФ успешно участваха на редица международни и национални форуми (14 национални конференции (32 участия) и 24 международни конференции (38 участия)). Колектив с ръководител доц. П. Долашка и членове: Людмила Велкова, гл. ас. д-р Александър Долашки, Елена Костадинова, Огняна Анева и Бориска Иванова получи най-голямата награда, статуетка и грамоти «Изобретател на годината 2012», на IV-то изложение за ИЗОБРЕТЕНИЯ, ТЕХНОЛОГИИ, ИНОВАЦИИ "ИТИ'2012" за разработката - «Биоактивни компоненти с доказани терапевтични свойства».

В рамките на Югоизточноевропейската мрежа по фитохимия и химия на природните продукти, в която нашия институт е активен участник, беше организирана и

проведена регионална среща на управителния комитет. На срещата беше представена дейността на мрежата, дискутирана беше перспективата за сътрудничество в областта на функционалните храни и беше акцентирано върху необходимостта за пряка връзка с индустрията. Обсъдени бяха възможностите за разработването на общи проекти с участие на партньори от съседните балкански страни. В срещата участва и професор Берхану Абегаз, изпълнителен директор на асоциацията на Африканските академии на науките, който изнася лекция в ИОХЦФ на тема „Състояние на изследванията на природни продукти в Африка“

През декември 2012 ИОХЦФ беше посетен от индийска научна делегация водена от д-р Арабинда Митра, ръководител на отдела за международно сътрудничество към Департамента за наука и технологии в Министерството на науката и технологиите на Индия. Поводът беше провеждането на Седмата сесия на смесената българо-индийска комисия за сътрудничество в областта на науката и технологиите. По време на срещата в ИОХЦФ присъстваха и представители на Министерството на образованието, младежта и науката. Гостите се запознаха с основните постижения на учените от института, посетиха лабораторията по ЯМР и компютърен клъстер Мадара. Договорено беше провеждането през 2013 година на българо-индийска работна среща за установяване на контакти в области от взаимен интерес и подготовка на конкретни съвместни проекти.

През изминалата година бяха проведени две работни срещи на високо национално ниво - с министъра на образованието, младежта и науката проф. С. Игнатов и с Президента на РБългария г-н Р. Плевнелиев, на които бяха представени основните постижения на учените от ИОХЦФ и перспективите за развитието му. Министър Игнатов и президентът Плевнелиев бяха запознати с проект на ИОХЦФ за разработване на национална стратегия „Интелигентно оползотворяване на биоразнообразието в България за икономическо развитие и устойчив растеж“. Гостите дадоха висока оценка на работата на учените от института.

От декември 2012 в ИОХЦФ започна работа общоинститутския семинар, на който ежесечно ще се представят научни тематика, по които се работи в института, а така също водещи учени от страната и чужбина ще представят своите научни изследвания. Основна цел на общоинститутския семинар е да допринесе за идентифициране на актуалните научни тематика и работни колективи, за интегриране на научните изследвания в рамките на института и дефиниране на по-конкретни стратегически научни направления, съобразени с тематичните приоритети на предстоящата рамкова програма на ЕС „Хоризонт 2020“.

Показателни за високото ниво на научните изследвания провеждани от учените в ИОХЦФ през 2012 е и големият брой на публикациите в списания, които са реферирани и индексирани в световната система за реферирание, индексирание и оценяване (89) и големият брой цитати (1787).

Тези резултати са постигнати въпреки изключително тежките условия за работа в БАН през последните няколко години – значителното намаляване на бюджетната субсидия, което затрудни изследователската работа и доведе до напускане на част от младите и квалифицирани служители на института, както и проблемите в дейността на фонд «Научни Изследвания» през последните няколко години. На последната сесия „ФИНАНСИРАНЕ НА ФУНДАМЕНТАЛНИ НАУЧНИ И НАУЧНОПРИЛОЖНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ В ПРИОРИТЕТНИТЕ ОБЛАСТИ“ на фонд «Научни Изследвания» ИОХЦФ участва с 45 проектни предложения, като в 17 от тях координатори бяха учени от ИОХЦФ. Въпреки големия изследователски опит, много доброто ниво на научното оборудване на института и изключително актуалните теми на предложенията, не беше одобрено за финансиране нито едно проектно предложение с координатор от ИОХЦФ, а само две проектни предложения с участие на наши учени бяха одобрени за финансиране – «Приложение на ОМИКС технологиите за разкриване на здравословния потенциал на българския мед» с ръководител от ИОХЦФ проф. дн В. Банкова и «Получаване, очистване и съхранение на водород и други енергийни източници на основата на биомаса чрез

разработване на нови катализатори и адсорбенти» с ръководител от ИОХЦФ проф.дн Т. Цончева, като последният е с изключително намален бюджет. Радва ни обаче фактът, че учените от ИОХЦФ са успешни в международни конкурси – в края на 2012 стартира проект финансиран от Швейцарската Национална Научна Фондация и MOMH по Българо-Швейцарска програма за сътрудничество на тема “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. Това е един от тринадесетте одобрени проекти по тази програма за 2012 г.

Основните цели и приоритети за развитието на ИОХЦФ за периода 2013-2015 година са:

- провежданите фундаментални и приложни изследвания в областта на органичната и биоорганичната химия да бъдат съобразени с националните научни приоритети и да бъдат от полза за българското общество, националните институции и индустрията;
- поддържане на висок стандарт на научната дейност в национален и европейски мащаб;
- стимулиране на участието на учените с проекти в национални и европейски конкурси – ФНИ, програма «Конкурентноспособност», 7-ма рамкова програма и Хоризонт 2020 на ЕС и др.;
- привличане на млади учени и подпомагане на тяхната кариера;
- осигуряване на максимално добри условия за обучение на дипломанти, докторанти и постдокторанти;
- стимулиране и интензифициране на контактите на учените от института с научни институти, университети, институции и фирми от страната и чужбина.

1.2. Връзка с политиките и програмите от приетите от ОС на БАН на 23.03.2009 г. ”Стратегически направления и приоритети на БАН през периода 2009-2013 г.”

Научните и научно-приложни изследвания, провеждани в четирите направления на ИОХЦФ - *“Синтез, строеж и реакционна способност на органичните съединения”*, *“Изолиране, структура и приложение на природни съединения”*, *“Структура и функция на белтъци, ензими и пептиди”* и *“Термични и каталитични превръщания на въглеродороди”*, могат да бъдат отнесени главно към следните политики и програми, съдържащи се в приетите от ОС на БАН документи, а именно:

Политика 1: Науката – основна двигателна сила за развитие на националната икономика и общество, базирани на знания.

Програма 1.2: Устойчиво развитие, рационално и ефективно използване на природните ресурси.

Със своята дейност ИОХЦФ допринася за създаване и разпространение на нови знания в направление “Нанонауки, нови материали и технологии”, което е условие за устойчив растеж на икономиката на България и изграждането на общество базирано на знанието и иновациите, в съответствие с политиката и приоритетите на Европейския съюз.

В рамките на Центърът по фитохимия, който е част от института се провеждат изследвания на българските лечебни и ароматични растения, на които нашата страна е особено богата, търсят се възможности за създаване на иновативни продукти от тях с висока добавена стойност.

Програма 1.3: Конкурентоспособност на българската икономика и на научния иновационен капацитет.

Учените от ИОХЦФ осъществяват постоянна и висококачествена научна подкрепа на български фирми за синтезиране, изолиране и анализ на нови органични съединения в реализирането на нови иновативни проекти.

Програма 1.4: Човешки и научен потенциал за икономика и общество, базирани на знания.

Създадени са условия за научно израстване и реализация на учените от ИОХЦФ. През изминалата 2012 година са се обучавали 13 дипломанти по магистърски програми и 12 докторанти. Защитени са 3 дисертации за придобиване на научната и образователна степен „доктор”.

Програма 1.5: Информационно, експертно и оперативно обслужване на българската държава и общество.

Лабораторията по ЯМР и лабораторията по инструментална хроматография и мас-спектрометрия обслужват всички изследователски, приложни и образователни институции в страната. Оценка за дейността ни в последните години бе признаването на ЯМР лабораторията от Европейската комисия за Европейска изследователска инфраструктура под номер 852. 34 учени от института участват 25 експертни органи, като например: Национална агенция по акредитация; Междуведомствена работна група за създаване на концепция за Оперативна Програма "Наука и образование за интелигентен растеж 2014-2020" (заповед МОМН); Междуведомствена работна група за подготовка на договора с ЕС за финансиране на програмния период 2014-2020; Съюз на учените в България; Европейска асоциация за химични и молекулни науки (работна група по органометална химия); Българско общество за органична и металоорганична химия; „Изпълнителна агенция за насърчаване на малки и средни предприятия” към МПЕ; Национален комитет към IUPAC; "British Certification Institute"; Българско пептидно дружество, Европейско пептидно дружество-национален представител; Германско химическо дружество и др.

Програма 1.6: Качествено и конкурентоспособно обучение.

Обучаваните от наши учени студенти, докторанти и специалисти са доказали своя научен потенциал в условията на силно конкурентното европейско научноизследователско пространство. Учени от ИОХЦФ активно участват в разработването на учебните програми и документацията на Изследователския университет на БАН. Предложени са 7 магистърски и една бакалавърска програма по химия. 7 учени от ИОХЦФ четат лекционни курсове, семинари и упражнения в бакалавърски и магистърски програми в Факултета по химия и фармация - СУ»Св Климент Охридски» и Медицински Университет-Пловдив.

Политика 2: Научен потенциал и изследователска инфраструктура – част от Европейското изследователско пространство.

Програма 2.1: Технологично развитие и иновации.

В ИОХЦФ се разработват нови технологии за получаване на функционални храни и добавки с антиоксидантна и имуностимулираща активност, които да се използват за превенция на социално-значими заболявания - сърдечно съдови и метаболитни, някои форми на рак и др.

Програма 2.3: Качество на живота и интердисциплинарни изследвания на човека и живата природа.

ИОХЦФ работи активно по тематика обединяващи различни направления на науката в актуалните направления храни и здраве, свързани с подобряване качеството на живота.

1.3. Извършвани дейности във връзка с точка 1.2.

Извършваните през 2012 година дейности в ИОХЦФ във връзка с точка 1.2. могат да бъдат обобщени както следва:

- Синтезирани са нови хирални аминокислотни трикомпонентна кондензация без използване на разтворители. Изучена е активността на получените съединения при употребата им като хирални катализатори. Синтезирани са нови хирални азот и фосфор съдържащи лиганди, ефективни като катализатори при паладий-катализирани асиметрични трансформации. Получени са серии хирални бета-лактами посредством индуцирано от хирални амини и аминокислотни стереоселективно циклоприсъединяване по Щаудингер. Разработен е директен метод за превръщане на 2-амино пиридин в заместени имидазо[1,2-а]пиридинови и е показано, че вида на заместване на продуктите зависи от използвания катализатор и заместителите в ацетофенон и пиридина. Синтезирани са серии екстрагенти (ацил пиразолони и ацил оксазолони) и синергисти (разнообразни хетероциклически молекули, съдържащи хидроксилна и/или аминокислотна функция) за синергистична екстракция на

лантаноидни йони, при което е постигнат синергистичен ефект до 10^6 и добра селективност.

- Синтезирани са няколко серии циклодидепсипептиди и съответните им нециклични прекурсори, както и анионни производни на избрани представители от тях. Изследванията показаха висок антиоксидантен потенциал на синтезираните циклодидепсипептиди, а така също и инхибиторна активност спрямо ксантин оксидаза. Чрез съчетано използване на експериментални ИЧ спектри и квантовохимични изчисления са изследвани структурите на биологично активни молекули, съдържащи сулфокарбоксимидна група, техните диастереоизомери, тавтомери и анионни производни. Развит е нов аналитичен метод за определяне посоките на вибрационните моменти на преход и средната ориентация на ниско симетрични планарни молекули в нематични течни кристали. Методът е тестван с помощта на ИЧ-линейно дихроични спектри на 1-деутеро и 2-деутеро нафталин. Въпросната методика може да намери директно приложение в производството на течнокристални дисплеи. Получени са нови органични луминофори на основата на р-пирролидинови производни на 1,8-нафталимида, заместени при имидния азотен атом с дълги алифатни вериги и завършващи с тиолна група, позволяваща тяхното химично свързване към повърхности на благородни метали. Луминофорите са използвани за модифициране на различни златни наноструктури – наночастици, наноклетки и нанозвезди с възможно приложение като био- и химични сензори.

- Получени са серии нови съединения на основата на фенил азонафтол и съответните азометинови аналози, притежаващи разнообразни хетероциклични фрагменти в страничната верига. Изследвано е влиянието на донорни и акцепторни заместители във фенилния фрагмент върху тавтомерното равновесие в новополучените молекулни превключватели. Предложен е едностадиен синтез на нов тип заместени перилени със силни донорни заместители, които са подходящи за сензори и соларни клетки. Завършени са изследвания с методите на изчислителната химия върху охарактеризиране на предпочетените конформации на големи циклодекстрини (потенциални хост-системи за големи молекули и наноразмерни частици) за целия обхват от стойности за степента на полимеризация от 10 до 30.

- Чрез ЯМР спектроскопия в течна и твърда фаза детайлно са изследвани структурата и взаимодействието на широк спектър продукти и материали, както от природни източници, така и на редица нови био- и наноматериали, получени чрез различни синтетични методи. Чрез ЯМР спектроскопия с висока разделителна способност при въртене под магическия ъгъл е изследвана структурата и степента на набъбване на хидрогелове на полисулфобетайни в зависимост от концентрацията на нискомолекулна сол и е доказан „ефект на изсолване“ при промяна концентрацията на електролита. Тези материали са известни със своята много добра биосъвместимост и нарастващо приложение в медицината. Посредством ЯМР в твърда фаза с въртене под магическия ъгъл е установено, че заместването на алуминий със скандий в алуминиев волфрамат, материал с висока проводимост по алуминий и нисък коефициент на термично разширение, използван като среда за пренастройваеми лазери, протича с формирането на две дискретни локални координации на алуминия.

- Разработен е клиничен метод за фотодинамична дезинфекция на протези и отпечатъци в протетичната стоматология на базата на фотодинамичната терапия (ФДТ) с използване на синтезирани при нас метил-пиридил-окси заместени фталоцианинови комплекси и червена светлина. Получени са в чист вид и е доказана структурата на трехалозо липиди от нов щам *Nocardia NB60*. Установен е *in vitro* антитуморен ефект на тези трехалозо липиди при левкемични клетъчни линии. Разработена е и оптимизирана процедура за липаза-катализирано получаване на структурирани триглицериди с приложение в клиничното хранене. Постигнато е до 98% превръщане на изходните растителни природни масла, като добива на целевите продукти надхвърля 97,5%. Прилагайки различни методи и техники бяха определени четвъртичните и въглехидратни

структури на хемоцианини от молюски и артроподи. Установено е значението им за антитуморния ефект на хемоцианин от *Rapana venosa* върху туморни клетъчни линии. Показано е, че хемоцианинът от морски гастропод *Rapana thomasi* (RtH), притежава силен анти-туморен и анти-пролиферативен ефект *in vitro* върху лимфомни клетки. Проведено е детайлно изследване върху процеса на термична денатурация на хемоцианини. Установени са два етапа в процеса на разгъване на хемоцианиновата молекула: обратим преход, свързан с промени в областта на кислород-свързващите активни центрове, предхождащ необратимата денатурация на молекулата, която е съпроводена със загуба на вторична структура и формиране на аморфни агрегати.

- Установен е етерично-масленият състав на ендемитни растения от български и монголски произход. Изследвано е съдържанието на сескитерпенови лактони в *Arnica montana* получени от *in vitro* размножаване и адаптирани в две високопланински експериментални бази. Определено е количеството на нор-сескитерпеноида птаквилонид в българска орлова папрат, за който се знае, че е основния причинител на ракови заболявания при тревопасни домашни животни. За първи път е изследван българският ендемит *Papaver degenii* и са идентифицирани 10 изохинолинови алкалоиди. От медицински растителни видове с монголски произход са изолирани 18 алкалоиди и са идентифицирани 12. За първи път е установена разлика в химичния състав на прополиса от пчелни семейства, устойчиви на паразита *Varroa destructor* и прополиса на неустойчиви семейства, и са посочени вещества с потенциална активност срещу паразита. За първи път халкони са получени чрез ензимно-катализиран синтез и е доказана проява на ензимен промискуитет от страна на 2 липази. Определена е радикал-улавящата активност на голям брой синтетични съединения и растителни екстракти.

- Определен е липидният състав на маслодайната култура лалеманция и е показана възможността за използване на маслото ѝ като хранителна добавка – източник на полезните за здравето омега-3 и омега-6 мастни киселини. Чрез газова хроматография и мас-спектрометрия е определен мастно-киселинният състав на диворастящи гъби от разред *Agaricales*. С помощта на хемометрични методи е показано, че мастните киселини могат да бъдат използвани като хемотаксономични маркери за разграничаване на отделните семейства гъби. Изследвана е антирадикаловата и антиоксидантна активност на нови био-антиоксиданти.

- Изучена е структурата на полизахариди изолирани от праз и е установена връзката между химична структура и биологична активност. Получени са модифицирани пектинови полизахариди с висока имуностимулираща активност.

- Проведени са изследвания върху рационалното оползотворяване на биомаса и нискокачествени въглища чрез преработката им до високотехнологични продукти – въглеродни адсорбенти, въглеродни влакна и въглеродна пяна. Получени са въглеродни композити и въглеродна пяна на базата на синтетични пекове с висока механична якост и добри адсорбционни характеристики, подходящи като констукционни материали, електродни материали и катализатори. Получен е въглероден материал и силициев карбид на основата на силициево-полимерен композит, отличаващи се с голяма механична здравина и твърдост. Изследването по биодесулфуризация на нисък ранг въглища позволяват да се обогатят познанията за формите на органичната сяра в геоложки обекти, както и да се оценят възможностите на микробиалното третиране на изкопаеми горива и да се усъвършенства подхода за количествено определение на сярата в продукти от изгаряне на въглища.

- Получени са нови наноструктурирани материали и материали с йерархична пореста структура. Чрез подходящо функционализиране на повърхността на порестите материали и инкорпориране на наноразмерни метал/металооксидни частици в порестата структура са разработени материали с необичайни електрични, магнитни и каталитични свойства. Проведени са каталитични изпитания на материалите в реакции с потенциално приложение в екологията и синтеза на алтернативни горива. Проучени са възможностите

за приложение на получените материали като носители на липази. Разработени са нови доставящи системи на лекарства и антиоксиданти с контролируемо освобождаване и подобрени биоадхезивни свойства на основата на мезопорести силикатни носители.

1.4. Полза / ефект за обществото от извършваните дейности по точка 1.3.

Основните ползи за обществото от извършваните дейности в ИОХЦФ през 2012 година са:

- Изучени са биологично активни компоненти в някои растения и тяхното въздействие върху човешкия организъм. На базата на тези изследвания се разработват технологии за функционални храни и адитиви с антиоксидантна и имуностимулираща активност, които да се използват за превенция на социално-значими заболявания - сърдечно съдови и метаболитни, някои форми на рак и др. Чрез договор за научно-изследователска и внедрителска дейност разработваните в ЛБАВ технологии и продукти се внедряват в редовното производство на фирма „ВИТАНЕА” ООД и се предлагат на пазара.
- Колектив с ръководители проф. дн Петър Недков от ИОХЦФ-БАН и доц. д-р Драгомир Дарданов от МВР Болница – София са разработили предоперативна **въглехидратна хранителна добавка *Коннап*** на базата на бавно-разграждащи се въглехидрати (малтодекстрини), и следоперативна **протеинова хранителна напитка *Протеинап***, която представлява стабилизирани 10%-ен разтвор на ензимен хидролизат от колаген.
- Новополучените органични молекули се изследват за биологична и/или екстракционна активност, което при положителен резултат би довело до разработка на нови лекарствени препарати и агенти за селективно извличане на метални йони от природни суровини.
- Лаборатория ЯМР и лабораторията по инструментална хроматография и мас-спектрометрия са основно изследователски, педагогически и приложни звена, на които разчитат редица институции в страната в приоритетните направления „Материалознание и нанотехнологии”, „Здраве, храни и биотехнологии” и „Екология, климатични промени, биоразнообразие и биологични ресурси”.
- Разработени са нови катализатори с потенциално приложение в екологията за елиминиране на токсични газови емисии на летливи органични вещества от индустриалните производства и за получаване и съхранение на водород чрез каталитично разлагане на метанол като алтернативно гориво за автомобили, газови турбини и индустрията.
- Разработени са нови мезопорести силикатни носители на лекарства, ензими и антиоксиданти.

1.5. Взаимоотношения с институции

Научната и научно-приложната дейност на ИОХЦФ включва коопериране с редица български фирми, научни институти от БАН, Университети, както и с държавни институции. Учени от института работят по съвместни договори с университети и институти на БАН, обучават се докторанти под съвместното ръководство на учени от ИОХЦФ и от други институти или университети.

Лабораториите по ЯМР, по инструментална хроматография и мас-спектрометрия и групата по електронна спектроскопия към лаборатория „Структурен органичен анализ” извършват анализи, на която разчитат много частни фирми и държавни институции. Лабораторията по ЯМР спектроскопия извършваше регулярни сервизни анализи за нуждите на химическите факултети на Софийския, Пловдивския и Шуменския университет и на фармацевтичния факултет на Медицинския университет - София, както и за нуждите на институтите по Полимери и по Обща и неорганична химия на БАН и на други академични звена от страната.

1.6. Общонационални и оперативни дейности, обслужващи държавата

1.6.1. 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/.

Независимо от недостатъчната субсидия ИОХЦФ извършва редица практически дейности, с които обслужва не само основните научни институции, но и редица частни фирми и национални и държавни институции.

Лаборатория „Химия на твърдите горива“ е включена в базата данни на Комитета по индустриално планиране на НАТО (IPC) за научноизследователски организации и производители на оборудване и стоки за химическа, биологическа и радиоактивна защита на гражданското население. Базата данни е към Министерството на икономиката, енергетиката и туризма за използване от официални държавни органи в случай на спешни нужди при извънредни ситуации.

Служител на лабораторията е експерт в Изпълнителната агенция за насърчване на малките и средните предприятия (ИАНМСП) към Министерството на икономиката, енергетиката и туризма; Британски сертификационен институт (BSI).

34 учени от института участват 25 експертни органи, като например: Национална агенция по акредитация; Междуетовствена работна група за създаване на концепция за Оперативна Програма "Наука и образование за интелигентен растеж 2014-2020" (заповед на МОМН); Междуетовствена работна група за подготовка на договора с ЕС за финансиране на програмния период 2014-2020; Съюз на учените в България; Европейска асоциация за химични и молекулни науки (работна група по органометална химия); Българско общество за органична и металоорганична химия; „Изпълнителна агенция за насърчване на малки и средни предприятия“ към МПЕ; Национален комитет към IUPAC; "British Certification Institute"; Българско пептидно дружество, Европейско пептидно дружество-национален представител; Германско химическо дружество и др.

За нуждите на български фирми са извършени количествени и качествени анализи за потвърждаване структурата на произведени от тях продукти, както и количествен анализ на установени примеси в тях както следва:

От лабораторията по ЯМР през изминалата година беше предоставена експертна помощ и бяха извършени анализи за следните производствени предприятия в а) добивната промишленост: Асарел-Медет АД, Метхимтрейд ЕООД, Елаците-Мед АД, б) фармацевтичната промишленост - Биовет АД, в) малко предприятие "СиПиЕй", както и на митницата на аерогара София.

В Лабораторията по Инструментална хроматография и мас-спектрометрия са извършени следните анализи по поръчка на външни възложители:

на розово масло и розова вода - за фирмите Гален-Н ЕООД, Алтея Органикс ООД, Денива ООД, Булатгарс ПК ООД и Роза Веда България ЕООД;

на хранителна добавка "Цитрогард" ("екстракт от грейпфрут") – за фирма Биосепт ЕООД;

на пиролизно масло и продукти – за фирмите АГ Еко ООД и Приста Ойл Холдинг ЕАД;

на инсектицида флуметрин – за фирма Примавет София ООД;

на препарат за почистване на прозорци – за фирма Кукуда Груп ООД.

- От групата по електронна спектроскопия към Лаборатория „Структурен органичен анализ“ се провеждат регулярно анализи на лекарства с помощта на флуоресцентна спектроскопия за нуждите на фирмите Унифарм АД и СОФАРМА АД.

- С цел подпомагане и опазването на българското културно наследство, лаборатория “Вибрационна Спектроскопия“ – СОА участва активно в изследване и идентифициране на български и свързани с България археологически и художествени обекти посредством ИЧ-спектрални методи като съдейства с тази си изследователска дейност на Центъра за реставрация на художествени ценности “ЦРХЦ“ ООД и Националната Художествена Галерия.

- В лаборатория ХББЕ под ръководството на проф. Петър Недков са разработени предоперативна **въглехидратна хранителната добавка *Коннан*** и следоперативна

протеинова хранителна напитка Протеинап. Продължава работата по получаване на препаратите **Neprolysin** и **Post-Neprol** в два варианта - с и без обезболяващото вещество Лидокаин.

- Разработен е метод за количествено определяне на стевиол-гликозиди в суха дрога от стевия и храни и напитки. В рамките на договор за съвместна научно-изследователска работа със Земеделски Институт – Шумен е определено съдържанието на стевиол-гликозиди в 24 генотипа стевия, култивирани в България. Получените резултати сочат, че при климатичните условия на България е възможно получаването на сортове стевия с високо съдържание на стевиол-гликозиди.
- По заявка на фирма „Брандекс” България е изследвана автентичността на партида екстракт от Гинко Билоба (*Ginkgo biloba*), предназначен за влагане в хранителни добавки. По заявка на същата фирма е изследвано и съдържанието на аскорбинова киселина в партида хранителни добавки, произвеждани от фирмата.
- Научни резултати с иновативен характер доведоха до създаването на нов, екологично съобразен и ефективен инхибитор, предотвратяващ обратното разтваряне на метала в процеса на електроекстракция на цинк. Разработката е на учени от ИОХЦФ и ИФХ-БАН, като са предприети необходимите действия по защита на патент за изобретение.

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

През 2012 е разработен научно-приложен проект с фирма “ВИТАНЕА” ООД – гр. Пловдив на тема: „Горски плодове и билки за получаване на адитиви и функционални храни за превенция на социално значими заболявания”, ръководител доц. д-р Мария Крачанова. В рамките на проекта са разработени и внедрени в редовно производство технологии за нискокалорични плодови нектари с добавка на естествен подсладител стевиол-гликозиди и технология за сух плодов чай от арония.

Чрез фирма ВИТАНЕА ООД е осъществен износ за Япония на една партида 100% сок от арония с добавен 1% пектин, разработен в ЛБАВ

Извършен е аналитичен качествен контрол на готовата продукция на фирма ВИТАНЕА ООД - общо 55 партиди плодови сокове, нектари и сиропи, и 48 партиди гранулирани пектини.

- През 2012 бяха сключени договори с две частни фирми (ВИ „Кехлибар” ООД и „Т енд Т инженеринг”) за извършване на консултантски услуги.

2. РЕЗУЛТАТИ ОТ НАУЧНАТА ДЕЙНОСТ ПРЕЗ 2012 ГОДИНА

Според преценките на четирите Колоквиума, за общия годишен отчет на БАН предлагаме следните едно най-важно научно и едно най-важно научно-приложно постижение на ИОХЦФ за 2012 г.

2.1.НАУЧНО ПОСТИЖЕНИЕ

➤ Нарастващото разпространение на туберкулозата в световен мащаб (и то не само в развиващите се страни) съчетано с непрекъснатото развитие на нови туберкулозни щамове, резистентни към клинично използваните медикаменти, налага непрекъснато търсене на нови и по-ефективни антитуберкулозни вещества. В рамките на настоящото изследване са синтезирани с добри добиви 47 разнообразни производни на (R)-2-аминобутанола чрез използване на няколко метода и в рамките на 1-2 стадия, като са използвани търговски химикали. Пет от тези нови съединения са показали 5-11 пъти по-

висока активност отколкото клинично използвания етамбутол спрямо стандартен туберкулозен щам *Mycobacterium tuberculosis* H37Rv. Високата им активност е съчетана с изключително ниска цитотоксичност спрямо ембрионални човешки клетки, което ги прави подходящи кандидати за по-нататъшно разработване на лекарства. Синтезирани са и петте (S) енантиомера на тези съединения, чиято липса на антитуберкулозно действие доказва огромната роля на конфигурацията на хиралните съединения за тяхната биоактивност, **ръководител на колектива - гл.ас.д-р Г. Добриков и участници – В.Вълчева, М. Стоилова-Дишева, Г.Момеков, П. Цветкова, А. Чимов, В. Димитров.**

2. 2. НАУЧНО - ПРИЛОЖНО ПОСТИЖЕНИЕ

➤ В последните години мановият мед придобива все по-голяма популярност като здравословна храна. Този мед се смята за по-полезен за човешкото здраве в сравнение с нектарния и затова е по-търсен и цената му е по-висока. Това налага необходимостта от бърз и ефективен метод за доказване на неговата автентичност. Досега съществуващите методи се основават на анализ на многобройни показатели, както и на приложението на хроматографски методи, изискващи сериозна пробоподготовка. В България се произвежда основно дъбов манов мед. Ние разработихме иновативен ЯМР метод, позволяващ бързо и сигурно да се определи автентичността на дъбов манов мед, като подготовката на пробата е сведена само до разтваряне на меда в тежка вода. Методът се основава на доказване на присъствието на циклитола кверцитол (дезоксиинозитол), който е характерен само за дъбовия манов мед, с помощта на ¹H- и ¹³C-ЯМР спектри. Кверцитол не се среща в нектарен мед и манов мед от други дървесни източници, като ела, бор и др. Подходът дава възможност да се разработи и количествен анализ на кверцитол в меда, **ръководител проф. дн Б. Банкова и участници - С. Симова, А. Атанасов, М. Шишиниова.**

3.МЕЖДУНАРОДНО НАУЧНО СЪТРУДНИЧЕСТВО НА ИОХЦФ

3.1. В РАМКИТЕ НА ДОГОВОРИ И СПОГОДБИ НА НИВО АКАДЕМИЯ

През 2012 г. в ИОХЦФ са разработвани 16 проекта с научни институции в рамките на договори и спогодби на БАН с редица страни от ЕС - Германия, Франция, Унгария, Белгия, Италия, Испания, Чехия, Румъния и др. ИОХЦФ е бил посетен от 33 чуждестранни учени от 14 страни във връзка с провеждане на съвместни изследвания, разработване на нови проекти, специализации и консултации.

Успешното партниране на нашите учени и техните чуждестранни колеги се вижда от прерастването на тези междуакадемични договори в успешни проекти по 7FP и изработване на докторски дисертации под съвместното ръководство на учени от двете научни организации. В резултат на успешното сътрудничество между учени от Турският съвет за научни и технически изследвания и учени от ИОХЦФ стартира проектът **“Нови материали за системи за пречистване на отпадни води за инсталиране в туристически и други малки обекти, замърсяващи Черноморското крайбрежие“**, финансиран по 7FP с координатор за ИОХЦФ проф. д-р Нарцислав Петров. В рамките на проект за междуакадемичен обмен през 2012 година успешно е защитена дисертация от Ления Гонсалвеш под съвместното ръководство на доц. д-р С.Маринов от ИОХЦФ и проф. Иперман от Университета в Хасел, в резултат на което на докторантката е присъдена докторска степен, както от наша страна, така също и европейска диплома за доктор издадена от Университета в Хасел.

3.2. НА ИНСТИТУТСКО НИВО

През отчетната 2012 година учените от ИОХЦФ са работили по 15 проекта, които са получили финансова подкрепа по договори и програми с ЕС и международни организации, от които 5 са по Седма Рамкова Програма ИОХЦФ участва и в 4 COST акции, финансирани от Европейската Научна Фондация.

В рамките на проект по програма SCOPEs на Швейцарската национална научна фондация SupraChem@Balkans.eu: Supramolecular Training for students and young researchers in the Balkan area” (Обучение по надмолекулна химия за студенти и млади учени от Балканския регион) между Университетите във Фрибург (Швейцария) и Белград (Сърбия) и ИОХЦФ-БАН за периода 2012-2014 ще бъдат организирани 3 летни училища, 3 работни срещи и ще бъде осъществена обмяна на научен персонал за допълнително обучение. През изминалата година ИОХЦФ беше организатор на Лятно училище по надмолекулна химия.

В края на 2012 стартира нов проект на тема “Стандартизиран биотехнологичен добив на фитопармацевтични 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 МОМН по Българо-Швейцарска програма за сътрудничество.

Най-значимите международно финансирани научни проекти на ИОХЦФ, разработвани през 2012 г. по наша преценка са:

➤ **“Получаване на нови антивирусни препарати срещу инфлуенца”, акроним “FLUCURE”** - проект финансиран от Седма рамкова програма на ЕС, с координатор за ИОХЦФ доц. д-р Лилия Витева.

В изпълнение на основната цел на проекта – разработка на оригинални антивирусни препарати против инфлуенца - колективът от ИОХЦФ е работил върху синтеза на 4 аналогови серии с цел установяване връзката структура/ активност (Structure Activity Relationship). Химичните скелети, обект на оптимизация, са резултат от виртуален докинг анализ, SPR (surface plasmon resonance) скрининг и *in vivo* експерименти. Разработени са схеми за синтез на аналоговите серии и/или отделни продукти и са получени, изолирани и структурно охарактеризирани **87** съединения (без многобройните междинни продукти). Съединенията са предоставени на съответните партньори за SPR и *in vivo* изследвания. В резултат са излъчени две надеждни **водещи (lead)** структури за последваща оптимизация.

➤ **“Пчелите в Европа и измирането на пчелните семейства” BEEDOC** - проект финансиран от Седма рамкова програма на ЕС с координатор за ИОХЦФ проф. дн Вася Банкова

Цел на проекта е да се изяснят причините за масовото измиране на пчелните семейства, което се наблюдава в последните години в различни райони на света, включително и в някои европейски страни. Изучават се различни заболявания на пчелите, взаимодействието между паразити, вируси и пестициди и ролята им за повишената смъртност на пчелите. Търсят се начини да се противодейства на тези заболявания и на влиянието на замърсяването. Задачата на участниците от ИОХЦФ беше да бъдат изолирани биологично активни вещества от прополис, както и да изследва прополис от кошери с различен здравен статус. В резултат на изпълнението на проекта за първи път в прополис бяха намерени вещества с активност срещу причинителя на американски гнилец при пчелите. Беше установена за първи път връзка между химичния състав на прополиса и устойчивостта на пчелните семейства срещу паразита *Varroa destructor* който има отношение към измирането на пчелните семейства.

➤ **“Нови материали за системи за пречистване на отпадни води за инсталиране в туристически и други малки обекти, замърсяващи Черноморското крайбрежие”, договор № BS-ERA-NET-226160** с Европейската комисия (IMAWATCO) - проект финансиран от Седма рамкова програма на ЕС с координатор за ИОХЦФ проф. д-р Нарцислав Петров

Цел на проекта е синтезиране на основата на органични съединения на нови материали /полимерни мембрани и въглеродни адсорбенти/, които заедно с природни зеолити да бъдат вложени в инсталации за пречистване на отпадни води. Тези инсталации могат да бъдат монтирани в туристически обекти/хотели/ и други малки замърсители на питейни води по Черноморското крайбрежие. Задачата на участниците от ИОХЦФ е да бъдат получени и охарактеризирани синтетични въглеродни адсорбенти с висок адсорбционен капацитет спрямо замърсители от органичен / например детергенти и др./ и неорганичен / например метални йони и др./ характер.

4. УЧАСТИЕ НА ИОХЦФ В ПОДГОТОВКА НА СПЕЦИАЛИСТИ

Преподавателската дейност на учените от ИОХЦФ е неотменна част от приоритетите на Института. През изминалата година в ИОХЦФ са се обучавали 13 дипломанти по магистърски програми и 12 докторанти. Защитени са 3 дисертации за придобиване на научната и образователна степен „доктор”. Учени от ИОХЦФ активно участват в разработването на учебните програми и документацията на Изследователския университет на БАН. Предложени са 7 магистърски и една бакалавърска програма по химия. 7 учени от ИОХЦФ са чели лекционни курсове, семинари и упражнения в бакалавърски и магистърски програми в Факултета по химия и фармация – СУ”Св Климент Охридски” и Медицински Университет-Пловдив.

5. ИНОВАЦИОННА ДЕЙНОСТ НА ЗВЕНТО И АНАЛИЗ НА НЕЙНАТА АКТИВНОСТ

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

Научни резултати с иновационен характер са постигнати при изучаването на структурата на изолираните полизахариди от праз и връзката между химична структура и биологична активност. Получени са модифицирани пектинови полизахариди с висока имуностимулираща активност.

Създават се технологии за функционални храни и адитиви с антиоксидантна и имуностимулираща активност, които се използват за превенция на социално-значими заболявания – сърдечно-съдови и метаболитни, някои форми на рак и др. Чрез договор за научно-изследователска и внедрителска дейност разработваните в ЛБАВ технологии и продукти се внедряват в редовното производство на фирма „ВИТАНЕА” ООД и се предлагат на пазара.

В ЛБАВ се изпълнява научно-приложен проект с фирма “ВИТАНЕА” ООД на тема: „Горски плодове и билки за получаване на адитиви и функционални храни за превенция на социално значими заболявания”. В рамките на проекта през 2012г в ЛБАВ са разработени и внедрени в редовно производство технологии за нискокалорични плодови нектари с добавка на естествен подсладител стевииол-гликозиди и технология за сух плодов чай от арония и са създадени 7 работни места за специалисти.

6. СТОПАНСКА ДЕЙНОСТ

6.1. Приходи от отдаване под наем на помещения 2012 г.

1. „Графис А“ ЕООД	880.08 лв.
2. ЕТ “„Мира Арт-Миряна Блажева“	1239.24лв.
3. ЕТ „Влади – Пламен Василев“	854.32 лв.
4. „Гален-Н“ ЕООД	3942.96 лв.
5. „Медитрайл“ ООД	5632.80 лв.

6.	„Биовет“ АД	5867.52 лв.
7.	„Солво“ ООД	1173.48 лв.
8.	„Арх Ком“ ООД	19620.84 лв.
9.	„Холоист“ ООД	7275.72 лв.
10.	„Мебекс“ ЕООД	11899.03 лв.
11.	„СМС Б-я“ ООД	1760.16 лв.
12.	„Космо България Мобайл“ ЕАД	9100.00 лв.
13.	„Спектър Нет“ АД	2193.21 лв.
14.	„Балев Корпорейшън“ ЕООД	5632.80 лв.
15.	„Акредитив финанс“ ЕООД	2346.96 лв.
16.	„Био компоненти“ ООД	4420.20 лв.
17.	„ГЪЛЪБ-87“ ЕООД	88.01 лв.
18.	„ВНГ Груп“ ООД	13467.74 лв.

ОБЩО: 97395.07 лв. без ДДС. Преведени са данъци по ЗКПО, а в партида “Развитие” при ЦУ на БАН са преведени 51794 лв., в т.ч. и част за 2011 година.

6.2. Съвместна стопанска дейност с външни организации

Лабораторията по биологично активни вещества в град Пловдив, ръководена от доц. д-р Мария Крачанова, развива производствена и инженерингова дейност по договора с фирма “Витанеа” ООД, в резултат на което са създадени 7 работни места за специалисти. За 2012 год. приходите са в размер на 72012 лв., в т.ч. ДДС. Чист приход - 60010 лв.

7. КРАТЪК АНАЛИЗ НА ФИНАНСОВОТО СЪСТОЯНИЕ НА ИОХЦФ

Бюджетната субсидия получена от ЦУ на БАН за 2012 год. е 1426500 лв., като 90% от нея е усвоена за фонд “Работна заплата”, обезщетения по КТ, р-ди за конкурси по ЗРАСРБ, осигурителни вноски, стипендии за редовни докторанти. Отаналите 10% от субсидията са изразходвани за плащане на електроенергия, топлоенергия и вода. Всички останали разходи - ремонти и поддръжка на инфраструктурата в сградата, телефонни разходи, абонаментно поддържане на: ПИИ, копирна техника, асансьори, телефонна ц-ла, извозване на смет, застраховки и разходи за служебен автомобил, р-ди за стъклодувна р-ца и сървър на И-та, канцеларски и хигиенни м-ли, куриерски услуги и др. са платени от собствени приходи на Института. За аварийен ремонт на покрива и подпокривното пространство на сградата от БАН – ЦУ – от партида „Развитие” са получени целево общо 25631 лв.

От договори с ФНИ при МОМН са постъпили средства в размер на 198364 лв., за институти на БАН са преведени - 12640 лв., получили сме от Институт по генетика 1117 лв. На висши училища сме превели 23841 лв.

През годината по Оперативна програма „Развитие на човешките ресурси” - „Наука и бизнес”, бяха сключени 7 проекта на обща сума 16740 лв.

С МОМН беше сключен българо-швейцарски проект на тема Стандартизиран биотехнологичен добив на фитотерапевтични средства от ценни балкански лекарствени растения чрез оценка на биологичната им активност“ (PhytoBalk , който ще бъде финансиран както от швейцарска страна, така и от МОМН, като общата му стойност е 386 378 швейцарски франка /от МОМН – 40626 CHF, а от швейцарска страна – 345752 CHF/. През месец декември 2012 г. от МОМН получихме първи транш в размер на 34856 лв.

Надплановите договори са 6 броя, като 4 от тях са с чуждестранни възложители /“Поленержи” - Франция, ”Лизома интернешънъл”-Англия, ”Тенториум”-Русия, „Гълфлинкс трейдинг” – Оман/. Приходите по тези договори са в размер на 7535 лв.

Приходите от български фирми са от „Витанеа” ООД – 72012 лв. и от „Т енд Т инженеринг” – 1100 лв.

По 4 проекта по 7-ма РП е получена сумата 279 825 лв.

Приходите от дейността на сервизните лаборатории в Института са в размер на 93896 лв./в т.ч. възстановен вътрешен заем от предходната година на л-я ЯМР- 40000 лв./, т. е. действителните приходи са 53896 лв., както следва:

Дарения:

1. От чужбина:

За провеждането на Лятно училище „Надмолекулна химия – експериментални и теоретични методи за определяне”, организирано от ИОХЦФ са получени като дарение 28500 лв. от швейцарската национална научна фондация.

2. От страната:

5000 лв. за подпомагане на младите учени в ИОХЦФ са дарени от акад. И. Юхновски, които са разпределени , съгл. Решения на събранието на младите учени в ИОХЦФ.

1000 лв. за спонсориране на научно мероприятие са получени от „Софлаб” ООД.

Директор :

/ проф. дн П. Иванов/

Научен секретар :

/ доц. д-р М. Попова /