

## Информация за финансиран на проект

<b>Наименование на конкурса:</b>
Национална научна програма „Петър Берон и НИЕ“ 2021
<b>Основна научна област:</b>
Химия (СНЕ)
<b>№ на договор:</b>
КП-06-ДБ-7
<b>Начална дата на проекта и срок на договора:</b>
01.09.2022, 24 месеца
<b>Заглавие на проекта:</b>
Разработване на аналитична хеометрична платформа, базирана на ЯМР спектроскопия за ускорено откриване на нови ензимни инхибитори от природни източници, PhytoNMRmetrics
<b>Базова организация:</b>
Институт по органична химия с център по фитохимия - БАН
<b>Партньорски организации:</b>
няма
<b>Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):</b>
гл. ас. д-р Антигони Хилари
<b>Общ размер на договореното финансиране:</b>
120 000 лв.

**Резюме на проекта (до 1 стр. в рамките на полето по-долу):**

PhytoNMRmetrics има за цел разработване на високо-производителна ЯМР-базирана хемометрична методология за бързо идентифициране на ензимни инхибитори преди изолирането им сложни смеси, представляващи екстракти от природни съединения. Растителните продукти са източник на лекарствени средства в продължение на хиляди години и на тяхна основа са получени значителен брой съвременни лекарства от водещи ("lead") природни съединения. Откриването на лекарства, базирани на природни продукти, не е устойчива стратегия, т.к. изисква твърде много време, усилия и ресурси. През годините напредъкът в аналитичната химия допринесе за утвърждаването на хемометричните подходи за определяне състава на растителните екстракти. Откриването на нови биологично активни водещи съединения все още е област със значителен потенциал, а природата е най-разнообразната библиотека на биоактивни компоненти. Нашата цел е да разработим иновативен подход чрез валидиране на аналитична хемометрична платформа, посредством приложение на съвременни хроматографски и спектрални техники (FCPC, LC-HRMS/MS, NMR) и биоаналитични методи с използване на комплексни статистически алгоритми, за бързо и ефективно идентифициране на естествени ензимни инхибитори, преди тяхното изолиране от сложни смеси. Ще бъде подготвен и фракциониран моделен екстракт (смес от стандарти), източник на многоблокови масиви от ЯМР и TX-MS данни и след съпоставка с биологичния отговор ще бъдат разработени подходи за сливане на данните с цел разкриване на биоактивните съединения в сместа. След това нашата платформа ще бъде приложена към растителни екстракти от *Salvia sp.* за откриване на ензимни инхибитори, свързани със зарастването на рани (инхибиране на ксантинооксидаза, антиоксиданти; инхибиране на циклооксигеназа, липоксигеназа, противовъзпалително; инхибиране на еластаза, колагеназа, хиалуронидаза, влага и еластичност на кожата). Основната цел е създаването на платформата като надеждна процедура за експлоатация на растителни екстракти за идентифициране на естествени медикаменти с последваща социална и обществена значимост, тъй като тя може да бъде приложена за откриване на други терапевтични агенти.

## Членове на научния колектив

Организации/участници <sup>1</sup>	Бележка <sup>2</sup>
<b>Базова организация:</b>	
Институт по органична химия с център по фитохимия - БАН	
<b>Ръководител на научния колектив</b>	
гл. ас. д-р Антигони Хилари	ПД, УЧ
<b>Участници:</b>	
проф. д-р Павлета Шестакова	
<b>Партньорска организация:</b>	
<b>Участници:</b>	
<b>Партньорска организация:</b>	
<b>Участници:</b>	
<b>Партньорска организация:</b>	
<b>Участници:</b>	

<sup>1</sup> Отбележете академичната длъжност, научната степен, име и фамилия на всеки участник като включите и участниците, които са работили по проекта не през целия период за изпълнение на проекта

<sup>2</sup> Отбележете дали участникът в колектива е млад учен (МУ), постдокторант (ПД), докторанти (ДО) или студенти (СТ), или учен от чужбина (УЧ).