

Авторска справка за приносите на научните трудове
на гл.ас. д-р Станислава Борисова Йорданова-Томова
във връзка с участие в конкурс за доцент (професионално направление
4.2. Химически науки (Органична фотохимия),
обявен в ДВ, бр. 103 от 12.12.2023 г.

Обща информация за наукометричните показатели на кандидата

Номерацията на статиите следва номерацията според файл 10B SelectedPublicationsList

Съавтор съм на 23 научни публикации, от които 22 са в списания с импакт фактор, 1 в списания без импакт фактор, 2 от статиите са използвани за защита на дисертация за придобиване на научна степен „Доктор“, поради което не са включени в настоящия конкурс. В конкурса за доцент, кандидатът участва с 19 научни публикации в списания с импакт фактор и съответно:

2 статии в списания с Q1 - № 3,12

8 от статиите са в списания в група Q2 - № 1, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 13

8 от статиите са в група Q3 - № 4, 11, 14, 15, 16, 17, 18, 19

1 статия в Q4 - № 2

Публикациите обхващат периода 2014-2021 г., който включва 6 активни изследователски години и 2 години отпуск по майчинство. В 4 от представените документи съм първи автор. В голяма част от статиите имам основен принос в провеждането на синтеза, фотофизичните измервания и изследването на сензорната способност на серия мономерни и дендримерни съединения, както и техни метални комплекси. Имала съм активно участие в обсъждането на резултатите, подготовка и написване на статиите.

Към момента на оформяне на документите за конкурса са забелязани 109 цитата (без да се отчитат автоцитати на всички автори) върху работите участващи в конкурса, h факторът на ми е 7. Представените данни за цитируемост и h-фактор са извадени от базата данни на Scopus.

Научните резултати са представени на над 10 национални и международни конференции като постерни съобщения и устни доклади.

Основните ми научни приноси най-общо са в областта на органичната фотохимия и молекулната спектроскопия. Тези приноси могат да бъдат обобщени в няколко направления:

- 1) Изследване на фотофизични характеристики на новосинтезирани съединения в разтворители с различна полярност – 1,3,4,6,8,9,14,15,17,18,19
- 2) Изследване на сензорните свойства на новосинтезираните съединения към различни метални йони – 1,3,4,5,6,10,14,19
- 3) Изследване влиянието на рН на средата върху абсорбционния и флуоресцентния интензитет – 1,7,8

- 4) Изследване на микробиологични, антимикуробни и антибактериални свойства на новосинтезираните лиганди, както и на техните медни и цинкови комплекси – 1,2,3,4,5,6,8,9,11,14,16,17

За първи път 4-хлоро-7-нитробензофуразан е използван за периферна модификация на полипропилен имин дендример от втора генерация, за да се получи многофункционално съединение. В органичен разтворители този дендример проявява наситен жълт цвят и излъчва жълто-зелена флуоресценция, чийто интензитет зависи силно от полярността на средата. Този ефект може да се обясни с възможна поява на ефекта на фотоиндуциран електронен трансфер. Сензорният капацитет на новия флуоресцентен дендример е бил изследван срещу различни метални йони (Ag(I), Co(II), Sr(II), Pb(II), Mg (II), Cu(II) и Fe(III)). Установено е, че най-добър ефект на йоните върху интензитета на флуоресценция на дендримера има по отношение на Fe(III) йони, докато по отношение на другите тествани йони, той проявява слаба сензорна активност. Това показва капацитета на дендримера да се използва като селективен сензор за откриване на Fe(III) йони. В алкална среда е установено, че новият дендример има слаб интензитет на флуоресценция, докато в кисела среда интензитетът се увеличава многократно. Следователно може да се използва и като детектор при промени на pH в околната среда. За първи път е изследвана микробиологична активност на 4-нитробензофуразан. Предварителните резултати показват добра антимикуробна активност на дендримера срещу *B. cereus* и *A. johnsonii* и умерена активност срещу *P. aeruginosa*. Активността се запазва след отлагане на новосинтезираното съединение върху памучна тъкан, предотвратяваща образуване на бактериален биофилм върху текстилната повърхност. Тези наблюдения ни дават основание да продължим проучванията с фокус върху антибактериалните свойства на текстила за клинични и домашни приложения. (Статия 1)

Ефектът на Zn(II) и Al(III) йони върху UV/Vis, флуоресценцията и ^1H NMR спектрите на P1 беше изследван в разтвор на DMSO и беше показано, че може да се образува както моно-, така и двуядрени комплекси между циклам-4-нитро-бензофуразан и съответните йони. Антимикуробните изследвания предполагат, че лигандът е биологично активен и неговият цинков комплекс показва засилена антибактериална и противоположна активност срещу микробни щамове в сравнение със свободния лиганд. Значителна дейност от новите съединения, наблюдавани спрямо тестваните патогени *B. cereus* и *C. lipolytica* ги правят обещаващи при проектирането на нови антимикуробни препарати. Освен това значителна активността на цинковия комплекс срещу фитопатогенни бактерии *X. oryzae* предполага тяхното потенциално приложение за използване като препарат за растителна защита. (Статия 2)

За първи път е синтезиран нов конюгат бензофуразан-циклам чрез директно взаимодействие на amino групата на циклама със 7-хлоро-4-нитробензофуразан. Изследвани са фотофизичните характеристики на съединението в разтворители с различна полярност, като се наблюдава силно изразен положителен солватохромизъм както за абсорбционните, така и за емисионните максимуми. Установено е също, че квантовия добив силно зависи от полярността на средата, като в неполярни разтворители има по-

високи стойности. Изследвано е влиянието на медни йони върху интензитета на флуоресценция като е доказано, че един метален йон координира със съединението. ЕПР анализите също потвърждават координацията на металния йон с третичната аминок група от пръстена на циклама . Инвитро антиминобен скрининг на новосинтезираното съединение и неговият меден комплекс $[CuP1(NO_3)_2]$ показва променлива антибактериална и противогъбична активност срещу различни бактериални/гъбични щамове. Също така е наблюдавана обещаваща цитотоксична активност срещу човешки HeLa цервикален карцином и MDA-MB-231 ракови клетки на гърдата. Следователно изследваните съединения (циклам и неговия меден комплекс) имат потенциал за биомедицинско приложение. (Статия 3)

Бяха синтезирани два нови бис-1,8-нафталимида (L1 и L2) и са изследвани техните фотофизични характеристики в органични разтворители с различна полярност. Полярните разтворители вероятно дестабилизируют планарността на хромофорната система, чрез водородни връзки между лигандите и разтворителя. Комплексообразуването на Cu(II) възниква чрез хелатиране на азотни места на заместителите в C-4 позиция. $[Cu(L1)(NO_3)_2]$ и $[Cu(L2)(NO_3)_2]$ комплекси са охарактеризирани с помощта на ЯМР и FT-IR спектроскопии, които потвърждават образуването на хелатни комплекси между Cu(II) и азотните атоми в позиция C-4. *In vitro* антиминобен скрининг на новосинтезираните метални комплекси показва обещаваща антибактериална активност срещу някои патогенни Грам-положителни и Грам-отрицателни бактерии и добра противогъбична активност срещу щамове дрожди *S. Cerevisiae*, патогенни *C. Lipolytica* и *L. muscorrum*. Резултатите също показват, че разликата в химичната структура на 1,8-нафталимида повлиява микробиологичната активност на комплексите. Новите метални комплекси могат да намерят приложение в разработване на нови антиминобни препарати за контрол на разпространението на инфекции, причинени главно от видовете *E. coli*, *A. johnsonii* и *S. Lutea* и ефектът е по-добре изразен в случай на L1 като лиганд. (Статия 4)

Изследвани са медни комплекси на полипропилен имин дендримери от първо D4 и трето D16 поколение, модифицирани в периферията съответно с четири и шестнадесет 1,8-нафталиמידни единици посредством флуоресцентна и ЕПР спектроскопия. Установено е, че един Cu II йон координира с D4 и съответно четири Cu II йони с дендример D16. ЕПР анализа показва, че медните йони се координират с третичния азотен атом от ядрото на дендримерната молекула. Металодендримерите и техните лиганди D4 и D16 са отложени върху 100 % памучен плат, като са определени техните цветови координати посредством колориметрична техника Datascolor. Антиминобната активност на новосинтезираните съединения е изследвана в разтвор и след нанасяне върху памучен плат. Резултатите показват, че памучните тъканите, третирани с металодендримери предотвратяват образуването на бактериален биофилм. Получените антибактериални памучни тъкани могат да се използват за приготвяне на превръзки за рани или медицински текстил за използване в клиничната практика. (Статия 5)

Описан е синтеза на два нови полипропилен амин дендримери от първо и трето поколение, модифицирани в периферията с 4-амино-1,8-нафталимидни единици. Описани са също така и техните метални комплекси с Cu (II) и Zn(II) йони. Химичната структура на дендримерите, свободни от метални йони, както и на самите метални комплекси в твърдо състояние е изследвана чрез FTIR спектроскопия и бе доказано, че металният йон координира с азотния атом от ядрото на молекулата на дендримера. Изследвани са фотофизичните свойства на двете съединения в разтворители с различна полярност, при което е наблюдаван положителен солватохромизъм. Доказано бе също, че стойностите на квантовия добив на новосинтезираните съединения силно зависи от полярността на средата, като в неполярна среда стойностите са по-високи в сравнение с тези в полярна среда. Инвитро антимикуробен скрининг на новосинтезираните металодендримери показва обещаваща антибактериална активност на металните комплекси на дендримерите - $[ZnD4(NO_3)_2]$ и $[Zn_2D16(NO_3)_8]$ срещу някои патогенни Грам-положителни и Грам-отрицателни бактерии и добра противогъбична активност срещу патогенните дрожди *C. lipolytica*. Резултатите също показват, че комплексите - $[Cu_2D16(NO_3)_8]$ и $[Zn_2D16(NO_3)_8]$ имат леко повишена антимикуробна активност в сравнение с тази на $[CuD4(NO_3)_2]$ и $[ZnD4(NO_3)_2]$. Новосинтезираните метални дендримери могат да бъдат допълнително проучени за лечение на инфекции, причинени от някой от изследваните организми. (Статия 6)

Фотофизичните характеристики на три нови 1,8-нафталимидни съединения (M1 , M2 , M3) са оценени в органични разтворители с различна полярност. Изследвано е влиянието на заместителя в позиция С-4 на нафталимидната структура и е установено, че химичната структура има значителен ефект върху тези стойности. За съединения M1 и M2 , съдържащи третични аминок групи, свързани към хромофорната система чрез етиленов мост, интензитетът на флуоресценция зависи силно от полярността на средата. За съединение M3 тази зависимост е незначителна. Това показва, че тестваните съединения M1 и M2 могат да се използват при проектирането на базирани на фотоиндуциран електронен трансфер сензорни системи. Чрез използване на DFT и TDDFT изчисления сензорният механизъм беше рационализиран и редуктивният ФЕТ механизъм беше потвърден. Изследван е ефектът, който различни метални йони (Ag^+ , Ba^{2+} , Cu^{2+} , Co^{2+} , Mg^{2+} , Pb^{2+} , Sr^{2+} , Fe^{3+} и Sn^{2+}) оказват върху интензитета на флуоресценция на двете съединения. Показано е, че в присъствието на Ag^+ , Pb^{2+} , Sn^{2+} , Co^{2+} и Fe^{3+} интензитетът на флуоресценция се повишава, като при съединение M2 този ефект е по-добре изразен. И двете съединения показват зависимост на рН от интензитета на флуоресценция, който е нисък в алкална среда и се повишава в кисела среда. (Статия 7)

Нов водоразтворим катионен дендример на базата на полипропиленимин дендримера от първо поколение, модифициран с 1,8-нафталимид е синтезиран чрез триетапен синтез (D3). Фотофизичните характеристики са изследвани в органични разтворители с различна полярност и във воден разтвор. Новият дендример абсорбира в UV областта и излъчва синя флуоресценция. Във воден разтвор рН значително повлиява интензитета на флуоресценцията. В кисела среда емисионните максимуми са високи. Тези резултати

показват, че D3 може да се използва като рН сензор във водни разтвори. В сух диметилформамаид, цветът на D3 се променя от безцветен в жълт в присъствието на разтвор на натриев хидроксид. Извършено бе отлагане на дендримера върху памук и беше изследвана тъканта, а също така беше тествано освобождаването ѝ във воден разтвор. Антимикробната активност на D3 е изследвана спрямо Грам-положителна и грам-отрицателни бактерии и щам дрожди *Candida*. Резултатите показаха добра антимикробна активност на D3 срещу *B. cereus* и умерена активност срещу *P. aeruginosa* и *C. lipolytica*. След отлагането на дендримера върху памучен плат, неговата активност се запазва като най-добър ефект е получен отново срещу *B. cereus*. Този резултат показва потенциала на новия дендример D3 за приложение при проектирането и получаването на антибактериален текстил със забавено освобождаване на биоактивни вещества от памучна матрица. (Статия 8)

Фотофизичните характеристики на нов еозин Y функционализиран с кватернерна амониева група са били изследвани в различни разтворители. Модифицираният еозин Y показва интензивна флуоресценция в разтворите, която се запазва и след отлагането му върху повърхността на памучен плат. Резултатите показват добра инхибиторна активност на новия продукт еозиново съединение E към тестваните микробни култури. Антимикробна активност на памучния плат, обработен с новото еозиново производно E е изследвано срещу щамове *A. johnsonii*, *B. cereus* и *C. lipolytica*. Резултатите показаха че съединението E се освобождава бавно във водния разтвор и проявява продължителна антимикробна активност. Модифицираната памучна тъкан показва по-висока биоактивност срещу *B. cereus* и *C. lipolytica*, което предполага възможността за приложението му като нова добавка в процеса на подготовка от антибактериална текстилна тъкан. Новото съединение E може да бъде използвано за фотодинамично бактериално инактивиране. (Статия 9)

Четири стирилни багрила, съдържащи бензотиазолиеви краун етери са синтезирани чрез оптимизирана синтетична процедура. Фотофизичните свойства на новите багрила са изследвани в отсъствие и присъствие на Ba^{2+} катиони и са сравнени с тези на известните багрила. Изчислените термодинамични параметри, свързани с метално-йонното комплексообразуване в газовата фаза съответства на тенденциите в експерименталните константи на стабилност. (Статия 10)

Нов водоразтворим антрахинон S3 с кватернерна аминок група е синтезиран и характеризирани са неговите спектрални свойства във вода и разтвор на диметилформамаид. Новото съединение проявява много добра антибактериална и противогъбична активност срещу различни грам-положителни и грам-отрицателни бактерии и дрожди. Съединението е отложено върху памучен плат и в матрица от полилактид. С оглед използването на тези материали като антибактериални продукти е изследвано освобождаването на активното вещество във воден разтвор. Беше установено, че антрахинонът, отложен върху памучната тъкан, се освобождава значително по-бързо, отколкото от полилактидната матрицата. Антибактериалните свойства на памучен плат и

полилактид обработени с новият антрахинон са изследвани срещу бактериалните щамове *A. johnsonii*, *B. subtilis* и *E. coli*. Модифицираната памучна тъкан показва по-добра активност срещу тестваните култури от полимерния филм, което предполага възможност за приложение като нова добавка в превръзки за рани. (Статия 11)

Две нови катионни съединения 4b и 4c и четири асиметрични мономерни монометинцианинови багрила, съдържащи халогенни заместители (5a-d), са синтезирани по екологично подобрена методика. Свойствата на багрилата като флуоресцентни маркери за откриване на dsDNA бяха изследвани и сравнени с тези на търговското багрило тиазол оранж (TO). В буферен разтвор багрила имат незначителна флуоресценция, но те образуват силно флуоресцентни комплекси багрило-dsDNA. Освен багрила 5b и 5d, всички останали багрила показват добри фотофизични характеристики, подобни на тези на TO. Един от новите аналози (5a) показва по-висока флуоресценция в присъствието на dsDNA в сравнение с TO и това свойство може да се използва за увеличаване чувствителността и прецизността в подходящия биоаналитичен метод. По-висока фотохимична стабилност беше намерена при багрило 5c, което има много ниска флуоресценция в свободно състояние. Бяха използвани изчислителни инструменти, за да се обяснят оптичните свойства на изследваните хромофори. (Статия 12)

Хиброфобните силициеви аерогелове са подходяща матрица за приготвяне на ефикасни излъчващи хибридни композити. Демонстрирана е ефективна, проста процедура при ниска температура за функционализиране на силициев диоксид аерогел гранули с $[\text{Eu}(\text{phen})_2](\text{NO}_3)_3$. Функционализираните аерогелни композити показват яркочервен Eu^{3+} f-f луминесценция, подходяща за UV – сензорни приложения или за производство на светлина. Йонът Eu^{3+} има симетрия на място C_{2v} в хибрида композити, спектрите на възбуждане доказват наличието на ефективен трансфер на енергия 1,10 – фенантролин - Eu^{3+} . Проби, функциониращи само с 1,10-фенантролин излъчват в синята спектрална област, дължаща се на повърхностно образуване на $\text{Si}(\text{IV})$ - 1,10-фенантролин комплекси. Анализ на оптични спектри и цветови координати на функционализираните композити показват образуването на различни оптични центрове по време на функционализацията. (Статия 13)

Синтеза и спектралните характеристики на 1,8-нафталимидни производни (N11 и N12) и металните комплекси - $\text{Cu}(\text{II})$ и $\text{Zn}(\text{II})$ на съединение N12 са описани. Формирането на $\text{Cu}(\text{II})$ комплекс с N12 лиганд е потвърдено от EPR спектроскопия. Фотофизичните свойства на лигандите и металните комплекси са изследвани в органични разтворители с различна полярност и е бил показва, че фотофизичните те зависят силно от полярността на разтворителя. Използвани са композитни PLA - $\text{M}(\text{N12})_2$ материали подготвени и проучени. За първи път EPR спектроскопията се използва за характеризиране на парамагнитните свойства на композитен PLA е $[\text{Cu}(\text{N12})_2]$. EPR спектърът на PLA е $[\text{Cu}(\text{N12})_2]$ доказва наличието на три форми на $\text{Cu}(\text{II})$ йони: супер парамагнитни видове, изолирани $[\text{Cu}(\text{N12})_2]$ и полиядрени $[\text{Cu}(\text{N12})_2]$. Новите метални комплекси проявяват широко антимикробно

действие, като ефективно инхибира растежа както на Грам-положителните и Грам-отрицателни бактерии, и също показват значителна противогъбична активност. Резултатите също показват, че Cu(II) йони леко повишават антимикробната активност на комплексите в сравнение с Zn(II) йони. Като цяло резултатите предполагат добър потенциал на новите съединения като антимикробни средства. (Статия 14)

3,4-дизаместените 1,8-нафталимиди не са толкова добре изучени, колкото класическите 4-амино производни. Наличието на втори азотен заместител при C3 позиция в нафталимидната структура, което химически променя електронните свойства на донорните групи, а също променя спектралните характеристики на фотоактивното ядро. Изследвани са фотофизичните характеристики на тези съединения в серия разтворители с различна полярност. (Статия 15)

Установено че, че етаноловите екстракти от *O. grandiflora* (L.) Hoffm. и *A. Podagraria* имат висока антиоксидантна активност както при DPPH, така и при ABTS анализи за почистване. Тези инвитро анализи показват че растителните екстракти са важен източник на естествен антиоксидант, който може да бъде полезен за предотвратяване на развитие на различни оксидативни увреждания. (Статия 16)

Нов бис-1,8-нафталимиден комплекс $[Cu_2(NI)(NO_3)_4]$ е синтезиран и характеризиран. Структурата му е изследвана чрез елементен анализ, FT-IR, Raman, абсорбция и флуоресцентна спектроскопия, 1H NMR и ^{13}C NMR и EMS анализ. Основните вибрационни характеристики на лиганда и Cu(II) комплекс са определени. Новият Cu(II) комплекс абсорбира в ултравиолетовата спектрална област и излъчва синя флуоресценция, която е по-интензивна от тази на свободния лиганд NI. Антимикробните тестове показват, че синтезият комплекс проявява антибактериална активност и срещу двете Грам-положителни и грам-отрицателни бактерии и противогъбична активност срещу някои дрожди. Новият комплекс показва много добра антибактериална и противогъбична активност срещу *S. lutea*, *E. Coli*, *A. Johnsonii*, *S. cerevisiae* и *C. lipolytica*. Получените резултати предполагат, че новият $[Cu_2(NI)(NO_3)_4]$ комплекс може да намери приложение в биомедицината за разработване на нови ефективни антимикробни препарати. (Статия 17)

Солватохромните свойства на хомодимерните стирил пиридиниеви соли са анализирани чрез прилагането на различни методи за линейна връзка на свободната енергия. Установено е, че уравненията на McRae-Bayliss, Lippert-Mataga и Reichardt не са приложими за количествено описание на енергиите на абсорбция и излъчване като функция на съответните параметри на разтворителя. Камлет-Тафт моделът, описващ образуването на водородна връзка, даде отлични резултати по отношение на статистиката - корелационните коефициенти бяха установени, че са по-високи от 0,9 за всички изследвани съединения. (Статия 18)

Функционални свойства на две нови синьо флуоресциращи полимеризиращи 1,8-нафталимиди и техни съполимери със стирен са изследвани. Също така основните

фотофизични характеристики на мономерните и полимерни флуорофори са изследвани. Влиянието на различни метални катиони (Ag^+ , Mg^{2+} , Cu^{2+} , Sr^{2+} , Co^{2+} , Pb^{2+} и Fe^{3+}) върху интензитета на флуоресценция на новите 1,8-нафталимид са изследвани по отношение на техните потенциално приложение като флуоресцентни сензори за метални йони и протони. Доказано е, че интензитетът на флуоресценцията силно зависи от природата на металните катиони. Новите мономерни съединения могат да откриват Pb^{2+} и Fe^{3+} . Показано е че сините флуоресцентни полимерни филми притежават свойства което позволява използването им като селективни сензори за откриване на Fe^{3+} катиони във водни среди. (Статия 19)

1. Изследване на фотофизични характеристики на новосинтезирани съединения в разтворители с различна полярност - Основните ми приноси в това направление са приготвяне на разтворите на изследваните съединения в подходящ разтворител с точна концентрация за всички използвани разтворители, заснемане на спектрите на абсорбция и флуоресценция, обработка на данните – определяне на основните фотофизични характеристики за всяко едно съединение. Интерпретиране на получените резултати и участие в подготовката и оформянето на съответните материали за публикациите.
2. Изследване на сензорните свойства на новосинтезираните съединения към различни метални йони – Тук основното ми участие е в подготовката на пробите на всички метални йони от подходящи неорганични соли с точна концентрация в подходящ разтворител, подготовка на лигандите, отново в разтвор, заснемане на спектралните характеристики, обработка и интерпретиране на получените резултати. Подготовка на таблици и диаграми, необходими за публикуване.
3. Изследване влиянието на рН на средата върху абсорбционния и флуоресцентния интензитет – Активно съм участвала в подготовката на пробите, заснемане на спектрите и интерпретиране на резултатите. Вземала съм участие при обсъждане на получените резултати.
4. Изследване на микробиологични, антимикуробни и антибактериални свойства на новосинтезираните комплекси, както и на техните медни и цинкови комплекси – участвала съм при интерпретиране на получените резултати, изследванията са направени съвместно с колеги от БАН и ХТМУ.