

# Molekulinis pirimidino metalų jonų jutimas, asistuojamas šiluma aktyvuojama uždelstąja fluorescencija

## Pirimidine based metal ion sensing, assisted by thermally activated delayed fluorescence

Justina Jovaišaitė<sup>1</sup>, Tomas Serevičius<sup>1</sup>, Tadas Bučiūnas<sup>1</sup>, Jelena Dodonova<sup>2</sup>, Jonas Bucevičius<sup>2</sup>, Sigitas Tumkevičius<sup>2</sup>, Saulius Juršėnas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Taikomųjų mokslų institutas, Vilniaus universitetas, Saulėtekio al. 3, LT-10222 Vilnius

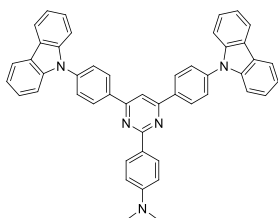
<sup>2</sup>Organinės chemijos katedra, Naugarduko 24, LT-03225 Vilnius, Lietuva

[justina.jovaisaite@tmi.vu.lt](mailto:justina.jovaisaite@tmi.vu.lt)

Naujos kartos organinės fluorescencinės detektavimo sistemos, kuriamos į molekulę arba molekulių sistemą integruojant analitę atpažįstantįjį elementą ir signalinį optinį atsaką rodantį fluoroforą [1], sulaukia daug dėmesio dėl galimybės lengvai, greitai ir patogiai aptikti [2] bei realiu laiku stebėti metalų jonų koncentraciją įvairiose sistemose [3].

Akceptorinės-donorinės pirimidinų sistemos savo savybėmis atitinka jutikliams keliamus selektyvumo ir jautrumo reikalavimus. Apskritai, pirimidinų junginiai yra suderinami su biologinėmis sistemomis ir literatūroje žinomi dėl savo panašumo į DNR bei RNR nukleobazes [4] bei daugelio gydomųjų savybių [5]. Įgalinus tokius darinius selektyviai prijungti metalų jonus dimetilamino pakaitu, atsiveria plačios galimybės kurti fluoroforo-receptoriaus pagrindu veikiančius metalų jonų atpažinimo prietaisus.

Darbe tiriama **P1** molekulė (1 pav.), ne tik geba formuoti kompleksus su gyvsidabrio jonais, kurių optinio atsako skirtumas gali būti efektyviai registruojamas, bet ir demonstruoja šiluma aktyvuojamą uždelstąją fluorescenciją (TADF).



1 pav. Molekulės **P1** struktūrinė formulė.

TADF yra metodas, kuriuo tripletinės būsenos yra paverčiamos švienčiančiomis singuletinėmis būsenomis. Molekulės, kurioms būdinga šiluma aktyvuojama uždelstoji fluorescencija, dažniausiai pasižymi elektronų donorinėmis ir akceptorinėmis savybėmis, tokiose molekulinėse sistemose dominuoja krūvio pernašos būsenų (CT) fluorescencija. TADF koncepcija iki šiol yra sėkmingai taikoma didinant išorinį kvantinį našumą, siekiant gauti našius organinius šviestukus [6].

Šiame darbe pirmą kartą demonstruojame TADF metodo panaudojimą, aiškinant metalų jonų jutimo molekuliniiais dariniais (**P1** molekulė) mechanizmą bedeguonėje terpėje, siejamą su išaugusiu lokaliai sužadintosios (LE) ir mažėjančiu CT būsenų fluorescencijos našumu.

*Reikšminiai žodžiai: azoto heterociklai, pirimidinas, gyvsidabrio jonai, TADF, jutimas*

### Literatūra

- [1] A. P. de Silva *et al.*, "Signaling Recognition Events with Fluorescent Sensors and Switches," *Chem. Rev.*, vol. 97, no. 5, pp. 1515–1566, Aug. 1997.
- [2] B. Valeur, "Design principles of fluorescent molecular sensors for cation recognition," *Coord. Chem. Rev.*, vol. 205, no. 1, pp. 3–40, Aug. 2000.
- [3] G. K. Walkup, S. C. Burdette, S. J. Lippard, and R. Y. Tsien, "A New Cell-Permeable Fluorescent Probe for Zn 2+," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 122, no. 23, pp. 5644–5645, Jun. 2000.
- [4] S. Weerasinghe, P. E. Smith, and B. M. Pettitt, "Structure and stability of a model pyrimidine-purine-purine DNA triple helix with a GC.cntdot.T mismatch by simulation," *Biochemistry*, vol. 34, no. 50, pp. 16269–16278, Dec. 1995.
- [5] I. M. Lagoja, "Pyrimidine as Constituent of Natural Biologically Active Compounds," *Chem. Biodivers.*, vol. vol 2, 2005.
- [6] C. Adachi, "Third-generation organic electroluminescence materials," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 53, no. 6, p. 60101, Jun. 2014.