

## RAUDONAI FLUORESCUOJANTYS, APLINKAI JAUTRŪS BODIPY FLUOROFORAI

Karolina Maleckaitė<sup>1</sup>, Jelena Dodonova<sup>2</sup>, Stepas Toliautas<sup>3</sup>, Rugilė Žilėnaitė<sup>1</sup>, Domantas Narkevičius<sup>1</sup>,  
Džiugas Jurgutis<sup>4</sup>, Vitalijus Karabanovas<sup>4,5</sup>, Sigitas Tumkevičius<sup>2</sup>, Aurimas Vyšniauskas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Fizinių ir technologijos mokslų centras, Molekulinių darinių fizikos skyrius  
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius, el. p.: karolina.maleckaite@ftmc.lt

<sup>2</sup> Chemijos institutas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Vilniaus universitetas,  
Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

<sup>3</sup> Cheminės fizikos institutas, Fizikos fakultetas, Vilniaus universitetas,  
Saulėtekio al. 9-III, LT-10222, Vilnius

<sup>4</sup> Biomedicininės fizikos laboratorija, Nacionalinis vėžio institutas,  
P. Baublio g. 3b, LT-08406 Vilnius, Lietuva

<sup>5</sup> Chemijos ir bioinžinerijos katedra, Vilniaus Gedimino technikos universitetas,  
Saulėtekio al. 11, LT-10223, Vilnius, Lietuva

Mikroklampos, temperatūros ir poliškumo vaizdinimas biosistemose gali suteikti aktualios informacijos apie pokyčius ląstelėse ar net ligų vystymąsi. Vienas paprasčiausių būdų vaizdinti terpės pokyčius yra aplinkos savybėms jautrių fluoroforų panaudojimas[1]. Molekulinių rotorių - mikroklampai jautrių fluoroforų - veikimas pagrįstas vidujmolekulinės rotacijos nulemtos fluorescencijos (FL) ir nespindulinės relaksacijos konkurencija. Klampioje terpėje stebima ilgesnė FL gyvavimo trukmė, kurią lemia molekulės rotacijos pakeista elektroniškai sužadinta būsena ir greitesnė nespindulinė relaksacija[2]. Ypač populiarus boro dipirometenu paremtas mikroklampos jutiklis BODIPY-C<sub>10</sub> (Pav. 1) išsiskiria monoeksponentine FL gesimo kinetika, kuri leidžia supaprastinti rezultatų analizę[3]. Tačiau žalia FL yra didžiausias šio fluoroforo trūkumas, nes išsamesniam biosistemų vaizdinimui reikalingi raudonai šviečiantys jutikliai[4].

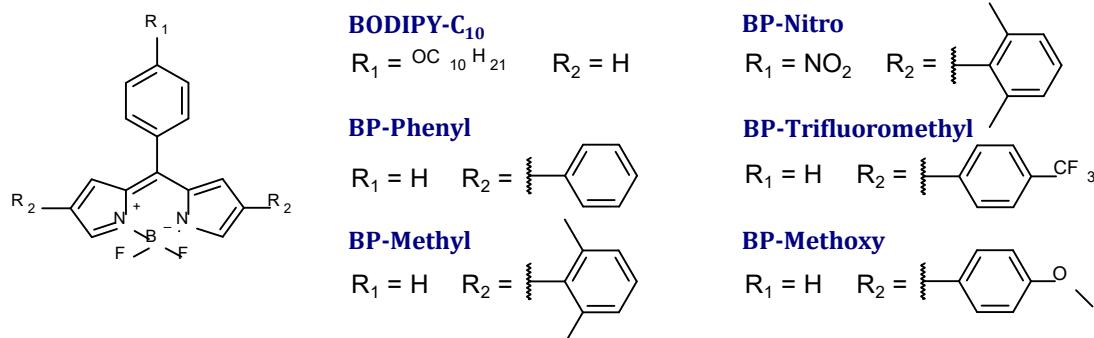
Šiame darbe nagrinėjami BODIPY grupės junginiai su β-fenilpakaitais, kurie leidžia praplėsti molekulės konjugaciją ir pastumti FL spektrą į ilgųjų bangų pusę. Tyrimas sudarytas iš trijų dalių: pirmoji atskleidžia, kaip tankio funkcionalo teorijos skaičiavimai (angl. *density functional theory*, DFT) gali padėti nuspėti molekulės jautrumą klampai prieš sintezę bei pristatomas

naujas, raudonai fluorescuojantis mikroklampos jutiklis BP-Nitro (Pav. 1). Antrojeje dalyje pristatome, kokią įtaką molekulės fotofizikinėms ir sensorinėms savybėms turi elektronų akceptorinės arba donorinės grupės prijungimas, taip pat pademonstruojame poliškumui jautrų raudonąjį fluoroforą BP-Methoxy (Pav. 1). Paskutinė tyrimo dalis parodo, kokią įtaką turi aktyvacijos energinis barjeras  $E_a$  fluoroforo klampos ir temperatūros jautrumui, bei įvertiname  $E_a$  vertes, kurių reikėtų siekti norint sukurti atitinkamus jutiklius.

Darbas sudarytas iš DFT skaičiavimų, sugerties ir FL spektrų, FL gyvavimo trukmių analizės, gyvų ląstelių vaizdinimo metodikos ir teorinių matematinių modeliavimų, kurie leidžia įvertinti FL gyvavimo trukmių,  $E_a$  ir jautrumo aplinkos savybėms sąryšius.

### Literatūra

1. Y. Fu and N. S. Finney, RSC Adv. **8**, 29051–29061 (2018).
2. M. A. Haidekker and E. A. Theodorakis, Org. Biomol. Chem. **5**, 1669–1678 (2007).
3. J. A. Levitt, P. Chung, M. K. Kuimova, G. Yahioğlu, Y. Wang, J. Qu and K. Suhling, ChemPhysChem **12**, 662–672 (2011).
4. R. Weissleder, Nat Biotechnol. **19**, 316–317 (2001).



1 pav. Tyrime naudojami junginiai. Populiariausias molekulinis rotorius BODIPY-C<sub>10</sub> bei nauji junginiai su padidinta konjugacijos sistema: be papildomų pakaitų (BP-Phenyl), su dviem metilgrupėmis ant β-fenilo (BP-Methyl) ir papildomai nitrogrupe ant meso-fenilo (BP-Nitro), su elektronų akceptorine (BP-Trifluoromethyl) ir donorine (BP-Methoxy) grupėmis.