

# Az 5-izociano-1-naftol fluorimetriás karakterizálása

## Fluorimetric characterization of 5-isocyano-1-naphthol

Anita ADAMOCZKY<sup>1,2</sup>, Veronika PARDI-TÓTH<sup>1,2</sup>, Tibor NAGY<sup>1</sup>, Péter Pál FEHÉR<sup>3</sup>, Ákos KUKI<sup>1</sup>, Lajos NAGY<sup>1</sup>, Miklós ZSUGA<sup>1</sup>, Sándor KÉKI<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Alkalmazott Kémiai Tanszék, Természettudományi és Technológiai kar,  
Debreceni Egyetem, Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország

<sup>2</sup> Kémiai Tudományok Doktori Iskola,

Debreceni Egyetem, Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország

<sup>3</sup> Természettudományi Kutatóközpont, Magyar Tudósok Körútja,  
H-1117 Budapest, Magyarország

### ABSTRACT

Solvatochrome dyes are of particular importance, in which case the wavelength and intensity of the emitted fluorescence depend on the polarity of the immediate environment of the molecule. A novel fluorophore, 5-isocyano-1-naphthol (ICOL) was synthesized and its solvatochromic properties were explored. Various methods, such as Lippert–Mataga, Bilot–Kawski, McRea, and Reichardt were applied for evaluation. The Stokes shift was determined to span from 5208 cm<sup>-1</sup> to 7407 cm<sup>-1</sup>. Furthermore, we also calculated the quantum efficiencies. On the emission spectrum of ICOL recorded in dimethyl sulfoxide (DMSO), two peaks were obtained, which is the result of the presence of neutral and deprotonated forms of ICOL in a polar protic solvent. In order to support our results, TD-DFT calculations were carried out. The applicability of ICOL fluorescent dye was proven by the determination of CMC-values of sodium lauryl sulfate (SLS) and Tween 80 (TW80), and by the mapping of the microenvironments in the cavities of bovine serum albumin (BSA).

**Keywords:** 5-isocyanonaphthalene-1-ol, fluorescence, dual emission

### KIVONAT

Különleges jelentőséggel bírnak a szolvatokróm festékanyagok, melyek esetében a kibocsátott fluoreszcens fény hullámhossza és intenzitása függ a molekula közvetlen környezetének polaritásától. Egy új flouorofórt, az 5-izociano -1-naftolt (ICOL) szintetizáltuk és a szolvatokróm tulajdonságait vizsgáltuk. Az értékeléshez különféle módszereket alkalmaztunk, mint például Lippert- Mataga Bilot–Kawski, McRea, és Reichardt. A Stokes-eltolódás értékek 5208 cm<sup>-1</sup>-től 7407 cm<sup>-1</sup>-ig terjedtek. Ezenkívül kiszámítottuk a kvantumhatásfokokat is. Az ICOL dimetil-szulfoxidban (DMSO) felvett emissziós spektrumán két csúcsot kaptunk, ami az ICOL semleges és deprotonált formáinak poláris protikus oldószerben való jelenlétének az eredménye. Eredményeink alátámasztására TD-DFT számításokat végeztünk. Az ICOL fluoreszcens festék alkalmazhatóságát a nátrium-lauril-szulfát (SLS) és a Tween 80 (TW80) CMC-értékeinek meghatározásával, valamint a szarvasmarha szérumban (BSA) üregeiben lévő mikrokörnyezetek feltérképezésével igazoltuk.

**Kulcsszavak:** 5-izociano-1-naftol, fluoreszcencia, kettős emisszió

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönjük az alábbi pályázatok munkánkban nyújtott anyagi támogatását: NKFI K-132685, K-132236, TKP-2021NKTA-34.