

 (19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2014-0124181 (43) 공개일자 2014년10월24일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>G01N 21/64</i> (2006.01) <i>G01N 33/52</i> (2006.01) (21) 출원번호 10-2013-0041597 (22) 출원일자 2013년04월16일 심사청구일자 2013년04월16일	(71) 출원인 고려대학교 산학협력단 서울특별시 성북구 안암로 145, 고려대학교 (안암동5가) (72) 발명자 김중승 경기 성남시 분당구 내정로 152, 130동 2402호 (수내동, 파크타운롯데아파트) (74) 대리인 특허법인충현

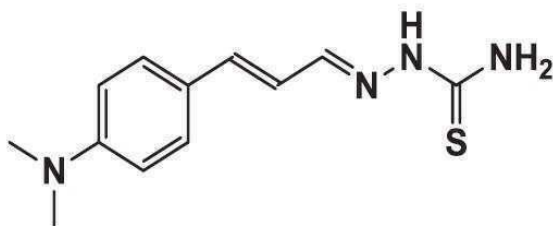
전체 청구항 수 : 총 2 항

(54) 발명의 명칭 수은 2가 이온 검출용 화학센서 및 그 제조방법

(57) 요약

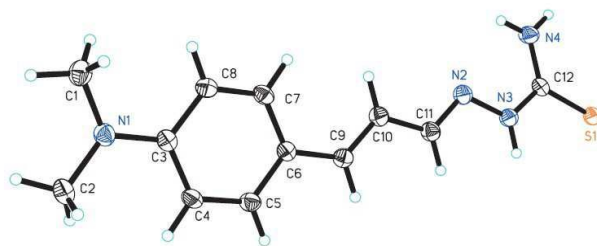
본 발명은 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서 및 그 제조방법에 관한 것으로서, 더욱 구체적으로는, 하기 화학식 1을 갖는 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서 및 그 제조방법에 관한 것이다:

<화학식 1>



본 발명에 따른 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서는 생체 내에서 넓은 pH 범위에 걸친 검출이 가능하며, 우수한 수용성을 나타내고, 다른 경쟁이온들에 비해서 Hg^{2+} 이온에 대해서 높은 선택성을 갖고 신속한 화학반응에 의해서 Hg^{2+} 이온을 검출할 수 있다.

대표도 - 도1



이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 20120000243

부처명 한국연구재단

연구관리전문기관 연구지원부

연구사업명 (이공)리더연구자지원_창의연구

연구과제명 발광센서 재료 연구단

기 여 율 1/1

주관기관 고려대학교 산학협력단

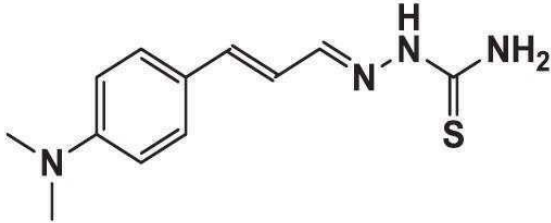
연구기간 2012.03.01 ~ 2013.02.28

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1을 갖는 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서:

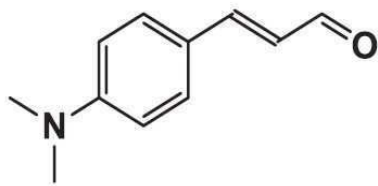
<화학식 1>



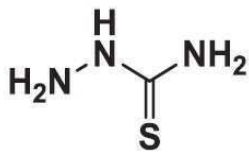
청구항 2

하기 화학식 2를 갖는 화합물 및 하기 화학식 3을 갖는 화합물을 반응시킴으로써 하기 화학식 1을 갖는 화합물을 제조하는 단계를 포함하는 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서의 제조방법:

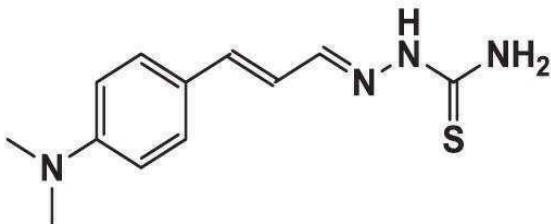
<화학식 2>



<화학식 3>



<화학식 1>



명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서 및 그 제조방법에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 중금속은 과학계, 특히 화학자들, 생물학자들 및 환경학자들 뿐만 아니라, 점차 중금속들과 연관된 유해성을 인식하고 있는 일반인들 사이에서도 많은 우려를 낳고 있는 물질이다. 이러한 중금속들 중에서도, 수은은 자연 현상 또는 인간 활동들을 통해서 방출되는 가장 유독성 있으면서도 흔한 오염물질이다. 일부 미생물들은 다른 형태의 수은으로부터 신경독소 물질인 메틸수은을 생산하는데, 이는 중추 신경 및 내분비계를 손상시킴으로써 많은 인지 및 행동 장애를 초래한다 (Clarkson TW, Magos L, Myers GJ. The toxicology of mercury-current exposures and clinical manifestations. N Engl J Med 2003;349:1731-7). 이는 메틸수은이 인체의 피부, 호흡기 및 소화기 계통을 통하여 매우 잘 투과될 수 있기 때문이다. 수은이 공기, 음식, 물 등을 통하여 다양하게 전파될 수 있다는 점은 매우 염려스러운 부분인데, 이는 이렇게 전파된 수은이 환경계에 잔존하여 먹이 사슬을 통하여 생축적가능하기 때문이다.

[0003] 따라서, 이러한 수은 노출에 따른 독성으로 인해서 생물 및 환경 시료들로부터 Hg^{2+} 이온을 모니터링하기 위한 새로운 방법들이 개발되고 있다. 원자 흡수 스펙트로스코피 (atomic absorption spectroscopy), 유도 커플링된 플라즈마 원자 발광 스펙트로메트리 (inductively coupled plasma atomic emission spectrometry), 전기화학적 검출 (electrochemical sensing), 및 압전 석영 결정 (piezoelectric quartz crystals)의 이용 등과 같은 몇몇 방법들에 의해서 낮은 수준의 Hg^{2+} 이온을 검출하는 하는 것이 가능하다 (Butler OT, Cook JM, Harrington CF, Hill SJ, Rieuwerts J, Miles DL. Atomic spectrometry updates. Environmental analysis. J Anal At Spectrom 2006;21:217-43; Li Y, Chen C, Li B, Sun J, Wang J, Gao Y, Zhao Y, Chai Z. Elimination efficiency of different reagents for the memory effect of mercury using ICP-MS. J Anal At Spectrom 2006;21:94-6; Leermakers M, Baeyens W, Quevauviller P, Horvat M. Mercury in environmental samples: Speciation, artifacts and validation. Trends Anal Chem 2005;24:383-93; Valeur B. Molecular Fluorescence: Principles and Applications; Wiley-VCH: Weinheim Germany 2002). 그러나, 이러한 방법들은 고가의 장비를 필요로 하고, 숙련된 인력에 의해서 장시간 및 많은 노동력이 소요된다는 단점이 있다.

[0004] 한편, 형광 검출에 기반한 분석 기법은 매우 대중적인데, 이는 형광 측정법이 일반적으로 매우 감도가 높고 (10⁶~10⁹ 배/1조 당 1부), 수행하기가 용이하며, 저렴하기 때문이다. 더욱이, 형광체의 광물리적 특성들은 다양한 경로를 사용하여 용이하게 조절될 수 있다: 전하-전달, 전자-전달, 에너지-전달, 중금속 이온들의 영향, 비발광성 $n-\pi^*$ 여기 상태 등 (Kim JS, Quang DT. Calixarene-derived fluorescent probes. Chem Rev 2007; 107:3780-99).

[0005] 결과적으로, 형광 화학센서에 관한 다수의 문헌들이 공지된 바 있다 (Kim JS, Quang DT. Calixarene-derived fluorescent probes. Chem Rev 2007; 107:3780-99; Quang DT, Kim JS. Fluoro- and chromogenic chemodosimeters for heavy metal ion detection in solution and biospecimens. Chem Rev 2010;110:6280-301; de Silva AP, Gunaratne HQN, Gunnlaugsson T, Huxley AJM, McCoy CP, Rademacher JT, Rice TE. Cyclams bearing diametrically disubstituted pyrenes as Cu^{2+} - and Hg^{2+} -selective fluoroionophores. Chem Rev 1997; 97:1515-66; So YM, Na RC, Young HK, Chang SK. New Hg^{2+} -selective chromo- and fluoroionophore based upon 8-hydroxyquinoline. J Org Chem 2004;69:181-3; Descalzo AB, Martinez-Manez R, Radealia R, Rurack K, Soto J. Coupling selectivity with sensitivity in an integrated chemosensor framework: Design of a Hg^{2+} -responsive probe, operating above 500 nm. J Am Chem Soc 2003;125:3418-9; Rurack K, Resch-Genger U, Bricks JL, Spieles M. Cation-triggered 'switching on' of the red/near infra-red (NIR) fluorescence of rigid fluorophore-spacer-receptor ionophores Chem Commun 2000; 2:2103-4; Hennrich G, Walther W, Resch-Genger U, Sonnenschein H. $Cu(II)$ - and $Hg(II)$ -induced modulation of the fluorescence behavior of a redox-active sensor molecule. Inorg Chem 2001;40:641-4; Kim HN, Nam SW, Swamy KMK, Jin Y, Chen X, Kim Y, Kim SJ, Park S and Yoon J. Rhodamine hydrazone derivatives as Hg^{2+} selective fluorescent and colorimetric chemosensors and their applications to bioimaging and microfluidic system. Analyst 2011; 136:1339-43; Chen X, Baek KH, Kim Y, Kim SJ, Shin I, Yoon J. A selenolactone-

based fluorescent chemodosimeter to monitor mercury/methylmercury species in vitro and in vivo. Tetrahedron 2010; 66:4016-21). 그러나, 이러한 공지기술들 대부분은 실제 응용에 있어서는 많은 단점들을 나타내는 바, 수용성의 부족, 다른 금속 이온들에 대한 반응성, 짧은 발광 파장, 좁은 pH 범위, 및 지연된 반응시간 등이 그것들이다. 따라서, Hg^{2+} 이온에 대한 실질적 검출 시스템에 대한 개발이 시급한 실정이다.

발명의 내용

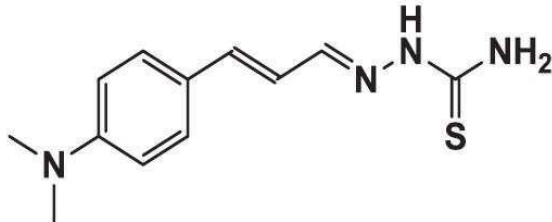
해결하려는 과제

[0006] 따라서, 본 발명에서는 상기 종래기술의 문제점을 해결하고자, 생체 내에서 넓은 pH 범위에 걸친 검출이 가능하며, 우수한 수용성을 나타내고, 다른 경쟁이온들에 비해서 Hg^{2+} 이온에 대해서 높은 선택성을 갖고 신속한 화학반응에 의해서 Hg^{2+} 이온을 검출할 수 있는 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서 및 그 제조방법을 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

[0007] 본 발명은 상기 첫 번째 과제를 달성하기 위해서, 하기 화학식 1을 갖는 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서를 제공한다:

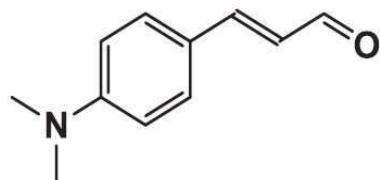
화학식 1



[0008]

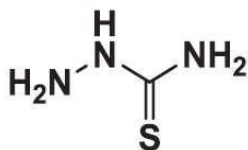
[0009] 본 발명은 상기 두 번째 과제를 달성하기 위해서, 하기 화학식 2를 갖는 화합물 및 하기 화학식 3을 갖는 화합물을 반응시킴으로써 하기 화학식 1을 갖는 화합물을 제조하는 단계를 포함하는 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서의 제조방법을 제공한다:

화학식 2



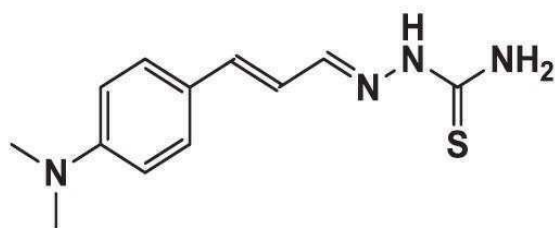
[0010]

화학식 3



[0011]

[0012] <화학식 1>



[0013]

발명의 효과

[0014] 본 발명에 따른 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서는 생체 내에서 넓은 pH 범위에 걸친 검출이 가능하며, 우수한 수용성을 나타내고, 다른 경쟁이온들에 비해서 Hg^{2+} 이온에 대해서 높은 선택성을 갖고 신속한 화학반응에 의해서 Hg^{2+} 이온을 검출할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0015] 도 1은 변위 원자 타원체 (displacement atomic ellipsoids)를 30% 확률 수준으로 도시한 본 발명에 따른 화학센서 DA의 ORTEP (Oak Ridge Thermal Ellipsoid Plot) 다이어그램이다.

도 2는 390nm의 여기 파장에서, Hg^{2+} , Pb^{2+} , Cd^{2+} , Cr^{3+} , Zn^{2+} , Fe^{2+} , Co^{3+} , Ni^{2+} , Ca^{2+} , 및 Na^{+} 이온들 (각 50 mM)을 포함하는 다양한 금속 이온들을 첨가해 주었을 경우 관찰되는 EtOH/ H_2O 용액 (1/9, v/v, pH) 중에서 DA (10 mM)의 형광 스펙트럼 변화를 관찰한 그래프이다.

도 3a 및 3b는 0~1 당량의 Hg^{2+} 이온을 첨가해 주었을 경우 (도 3a) 및 연이어 1~2 당량의 Hg^{2+} 이온을 첨가해 주었을 경우 (도 3b)에, 390nm의 여기 파장에서, EtOH/ H_2O 용액 (1/9, v/v, pH) 중에서 DA (10 mM)의 형광 적정 스펙트럼을 도시한 그래프이다.

도 4는 다양한 pH 조건들로, EtOH/ H_2O 용액 (1/9, v/v, pH) 중에 5 당량의 Hg^{2+} 이온이 존재하는 경우와 그렇지 않은 경우에 DA (10 mM)의 형광 강도 (510 nm)를 관찰한 그래프이다.

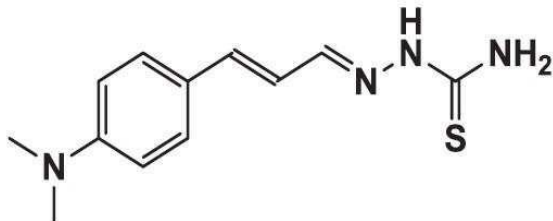
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0016] 이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명하기로 한다.

[0017] 본 발명에서는 종래 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서들이 보유하고 있던 문제점들, 즉 종래 통상의 화학센서들이 물에 대한 용해도가 낮다는 점, 수은만을 특이적으로 검출하지 못하고 수은을 제외한 다른 금속이온들에도 반응성을 나타낸다는 점, 형광 화학센서의 경우 발광 파장이 짧다는 점, 검출가능한 pH의 범위가 매우 작다는 점, 및 검출에 따른 시그널을 나타내기까지 오랜 시간이 소요된다는 점 등의 문제점을 해결한 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서를 제공하고자 하였다.

[0018] 본 발명에 따른 화학센서는 Hg^{2+} 이온 존재시 시그널을 보내는 형광체 단위로서, 공여체-수용체 구조를 갖는 디메틸아미노신남알데히드를 선택하였으며, Hg^{2+} 이온과 특이적으로 결합하는 결합 수용체로서 아미노티오우레아를 선택하였다. 구체적으로, 본 발명에 따른 화학센서는 하기 화학식 1로 표시될 수 있다:

[0019] <화학식 1>



[0020]

[0021] 하기 실시예로부터 알 수 있는 바와 같이, 상기 화학식 1의 화합물은 비교적 장파장인 510 nm에서 강한 녹색 발광 현상을 나타내며, 5 내지 9에 걸친 넓은 pH 범위에서 우수한 안정성을 나타낸다. 또한, 이러한 발광 정도는 과량의 Hg^{2+} 이온이 존재하는 경우에는 소광 (quenching)되지만, 다른 경쟁 금속 이온들이 존재하는 경우에는 이러한 소광 현상이 전혀 관찰되지 않는 바, 본 발명에 따른 화학센서는 Hg^{2+} 를 선택적으로 검출하기 위한 형광 화학센서로서 매우 유용하다.

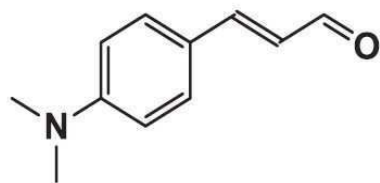
[0022]

더 나아가, 본 발명에 따른 화학센서는 상기 화학식 1에서 볼 수 있는 바와 같이, 아미노티오우레아 잔기를 포함하는 바, 이로 인해서 수용성 및 생체적합성이 우수하며, Hg^{2+} 이온과의 복합체 형성 반응이 30초 이내의 단시간 내에 완료될 수 있는 바, Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서로 적용되기에 매우 우수한 특성을 갖는다.

[0023]

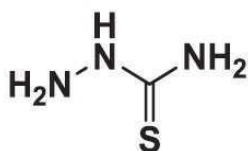
한편, 본 발명은 또한 상기 화학식 1로 표시되는 화합물인 Hg^{2+} 이온 검출용 화학센서의 제조방법을 제공하며, 본 발명에 따른 방법은, 하기 화학식 2를 갖는 화합물 및 하기 화학식 3을 갖는 화합물을 반응시킴으로써 하기 화학식 1을 갖는 화합물을 제조하는 단계를 포함한다:

[0024] <화학식 2>



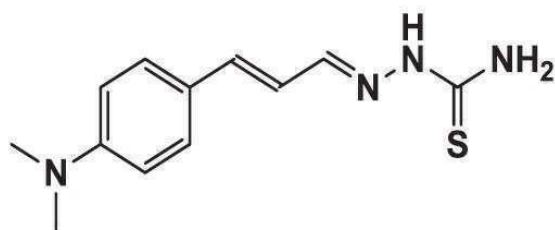
[0025]

[0026] <화학식 3>



[0027]

[0028] <화학식 1>



[0029]

[0030] 상기 반응은 에탄올 용매 중에서, 반응 용액을 N_2 분위기 하에서 환류 및 교반시키며 수행될 수 있고, 반응에 따라서 고체 형태의 조생성물이 얻어지며, 이를 재결정 및 정제시킴으로써 화학식 1의 화합물을 제조할 수 있게 된다.

[0031] 이하, 실시예를 통하여 본 발명을 더욱 상세하게 설명하기로 하되, 하기 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 것일 뿐, 본 발명의 범위를 제한하는 것은 아니다.

[0032] 기구 및 장치

[0033] UV-Vis 스펙트럼 및 형광 스펙트럼은 각각 S-3100 스펙트로미터 및 Hitachi F-4500 형광 스펙트로미터를 사용하여 기록하였다. 1H NMR 스펙트럼은 Bruker-400 장치를 사용하여 400 MHz에서 기록하였다. 질량 스펙트럼은 Finnigan 4021C MS-스펙트로미터를 사용하여 기록하였다. X-선 분석은 Rigaku R-Axis Rapid IP 회절분석기를 사용하여 기록하였다.

[0034] 시약

[0035] 4-*N,N'*-디메틸아미노신남알데히드 및 아미노티오우레아는 Aldrich로부터 구입하였으며, 더 이상의 정제 없이 사용하였다. $Pb(ClO_4)_2$, $Cd(ClO_4)_2$, $HgCl_2$, $CrCl_3$, $Zn(ClO_4)_2$, $FeCl_2$, $CoCl_3$, $NiCl_2$, $Ca(ClO_4)_2$, $Mg(ClO_4)_2$, KCl 및 $NaCl$ 는 Aldrich로부터 구입하여 구입한 상태로 사용하였다. 스펙트럼 검출을 위한 에탄올은 형광 불순물이 존재하지 않는 HPLC 시약이었으며, H_2O 는 탈이온수를 사용하였다. 모든 용매들은 분석급 시약을 사용하였다.

[0036] 디메틸아미노신남알데히드-아미노티오우레아 (DA)의 합성

[0037] 4-*N,N'*-디메틸아미노신남알데히드 (175 mg, 1.0 mmol) 및 아미노티오우레아 (100 mg, 1.1 mmol)를 순수 에탄올 (40 mL) 중에서 반응시켰다. 반응 용액을 N_2 분위기 하에서 6시간 동안 환류시키고, 고체가 침전될 때까지 실온에서 2시간 동안 더 교반하였다. 고체를 여과시키고, 에탄올로 3회 세척한 다음, 조생성물을 순수 에탄올로부터 재결정화시킴으로써 정제함으로써 207 mg의 디메틸아미노신남알데히드-아미노티오우레아 (DA)를 83.0%의 수율로 수득하였다. 1H NMR ($DMSO-d_6$): δ 11.23 (s, 1H), 8.03 (s, 1H), 7.86 (d, 1H), 7.47 (s, 1H), 7.38 (d, 2H), 6.70 (d, 1H), 6.63 (d, 2H), 6.59 (s, 1H), 2.96 (s, 6H). FAB-MS ($M+H^+$): $m/z=250.1$.

[0038] 분석용액의 제조

[0039] 1.0×10^{-3} M의 DA 스톡 용액을 에탄올 중에서 제조하였으며, 1:9 EtOH/ H_2O 용액 (v/v) 중에서 1.0×10^{-5} M의 농도로 희석하였다. 스펙트럼 분석을 위해서, 금속 이온의 스톡 용액을 탈이온수 중에 용해시켜서 1.0×10^{-3} M의 농도로 제조하였다. 매 분석마다 2 mL의 DA 용액을 1 cm의 광경로 길이를 갖는 석영 셀에 채웠으며, 다양한 금속 이온들의 스톡 용액들을 상기 석영 셀에 마이크로-피펫을 사용하여 서서히 가하였다. 가해진 이온성 스톡 용액의 부피는 100 μ L 미만으로 유지하였는데, 이는 시험 용액의 총 부피를 큰 변화 없이 유지하기 위함이었다. 여기 파장은 390 nm였으며, 온도는 약 25°C였다.

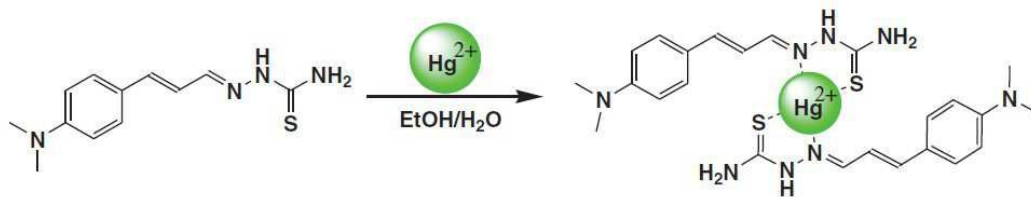
[0040] 분석 결과

[0041] 본 발명에서는 공여체-수용체 구조를 갖는 디메틸아미노신남알데히드가 형광체로 선택되었으며, 중금속 및 전이 금속 이온들에 대한 결합 수용체로서 아미노티오우레아가 사용되었다. 상기 아미노티오우레아 단위는 또한 수

용성 및 생체적합성을 향상시킬 수도 있다.

- [0042] 예상한 바대로, DA는 수성 용액 중 510 nm에서 강한 녹색 발광 현상을 나타내었으며 (양자 수율은 0.25), 5 내지 9에 걸친 넓은 pH 범위에서 우수한 안정성을 나타내었는 바, 이는 생리적 조건을 커버하는 범위이다. 발광 정도는 수성 조건에서 1.0 당량의 Hg^{2+} 를 첨가해줌으로써 약 30%까지 증가될 수 있었으며, 더욱 많은 양의 Hg^{2+} 를 더 첨가해줌으로써 점차 소광되었다. 그러나, 다른 경쟁 이온들은 어떠한 뚜렷한 소광 현상도 나타내지 않았는 바, 이는 DA가 수성 용액 중에서 Hg^{2+} 를 선택적으로 검출하기 위한 형광 화학센서로서 사용될 수 있다는 것을 의미한다.
- [0043] X-선 회절 분석에 적합한 DA의 블록 결정은 *n*-헥산을 DA의 에탄올 내로 2일 동안 증기 확산시킴으로써 성장시켰다 (도 1 참조). 리간드 DA에 대한 회절 데이터는 MoKa 라디에이션 $\lambda=0.71073\text{\AA}$ (그래파이트 단색화장치)을 사용하여 APEX CCD 검출기를 구비한 Bruker SMART D8 고니오미터 상에서 수집하였다. 구조는 직접 방법 (SHELXTL)에 의해서 해석하였으며, 풀 매트릭스 최소자승법 (full matrix least-squares techniques)에 의해서 F^2 상에서 조정하였다. 수소 원자들 또한 라이딩 모델 (riding model)을 사용하여 포함시켰다. 결정학적 분석으로부터 DA의 분자구조를 해석할 수 있었다 (CCDC 번호: 857562).
- [0044] DA는 380 nm에서 특징적인 흡수 파장을 나타내었다. 5 당량의 다양한 경쟁 금속 이온들 (예를 들어, Hg^{2+} , Pb^{2+} , Cd^{2+} , Cr^{3+} , Zn^{2+} , Fe^{2+} , Co^{3+} , Ni^{2+} , Ca^{2+} 및 Na^+ 이온들)을 DA의 수용액에 첨가해주는 경우, 관찰되는 흡수 스펙트럼에 뚜렷한 변화가 나타나지는 않았다. 그러나, 동일한 실험 조건에서, 그들의 형광 스펙트럼에는 이러한 양이온들을 첨가해줌으로써 다른 변화들이 관찰되었다.
- [0045] 도 2에 도시된 바와 같이, DA는 510 nm에서 강한 발광성을 나타내며, 그 형광 양자 수율은 EtOH/ H_2O 용액 (1/9, v/v) 중에서 약 0.25였다. 또한, 5 당량의 Hg^{2+} 이온들이 존재하는 경우에는 510 nm에서 뚜렷한 형광 소광 현상 (약 95%)을 관찰할 수 있었다. 이러한 소광 현상은 DA로부터 상자성 중금속 이온으로 전자가 전달되기 때문인 것으로 추측된다. 이와는 대조적으로, Pb^{2+} , Cd^{2+} , Cr^{3+} , Zn^{2+} , Fe^{2+} , Co^{3+} , Ni^{2+} , Ca^{2+} , 및 Na^+ 이온들을 포함하는 다른 금속 이온들에서는 형광에서 어떠한 뚜렷한 변화도 관찰되지 않았다. 결과적으로, 형광 화학센서로서의 DA는 수용액 중에서 Hg^{2+} 이온을 선택적으로 검출할 수 있다.
- [0046] DA와 Hg^{2+} 이온들과의 상호작용을 더욱 조사하기 위해서 형광 적정 스펙트럼 실험을 수행하였다 (도 3). 도 3a에 도시된 바와 같이, DA의 형광 강도는 1.0 당량의 Hg^{2+} 이온을 첨가해줌으로써 약 30% 증가하였는데, 이는 아마도 Hg^{2+} 가 DA의 아미노티오우레아와 결합하는 경우에 ICT 효과가 증가하기 때문일 것으로 추측된다. Hg^{2+} 이온들 (1-2 당량)을 DA 용액에 더욱 첨가해주게 되면 형광 소광이 뚜렷하게 나타나는데, 이는 공지된 중금속 이온 효과 (도 3b)때문이다. 따라서, 화학센서인 DA는 Hg^{2+} 를 간편하고 효과적인 방식으로 검출할 수 있는 도구가 될 수 있다.
- [0047] 결합 메커니즘을 더욱 자세히 이해하기 위해서, Hg^{2+} 의 존재 하에서 DA의 MALDI-TOF 질량 스펙트럼을, EtOH/ H_2O (9/1, v/v) 용액 중에서 수행하였다. Hg^{2+} 가 존재하는 경우에, 부가체 $(2\text{DA} + \text{Hg})^+$ 에 해당되는 m/z 696.783에서의 피크가 관찰되었으며, 이로부터 화학센서 DA와 Hg^{2+} 사이에 2:1 복합체가 형성되었음을 알 수 있다. 하나의 금속 양이온이 2개의 화학센서 분자들과 결합할 수 있기 때문에, Hg^{2+} 는 2개의 DA 분자들의 유사공동 (pseudocavity)의 중심에 위치하여, 이민기의 2개의 질소 원자들 및 아미노티오우레아기의 2개의 황 원자들과 배위결합을 형성할 것으로 추측된다. 하기 반응식 1에는 DA와 Hg^{2+} 사이의 추정되는 상호작용 메커니즘이 도시되어 있다:

[0048] <반응식 1>



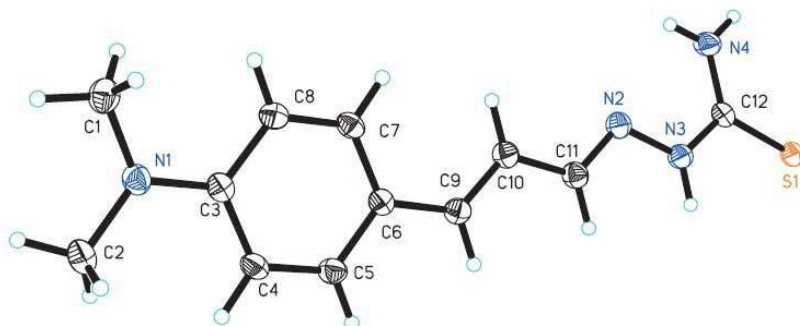
[0049]

[0050]

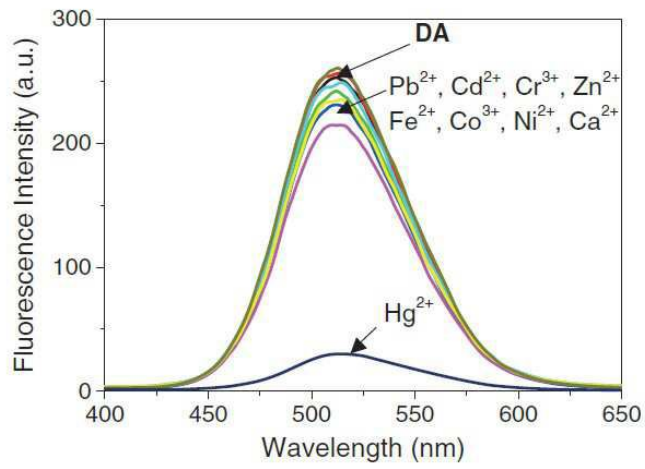
또한, 실제 응용을 위해서, Hg^{2+} 의 선택적 검출을 위한 DA의 적절한 pH 환경을 조사하였다. 도 4는 다른 pH 조건들에서 유리 DA의 형광 변화 (흑색) 및 $\text{DA} + \text{Hg}^{2+}$ 의 형광 변화 (녹색)를 도시한 도면이다. 도 4로부터, DA를 사용하여 Hg^{2+} 이온들을 검출하기 위한 최적 pH 범위는 5 ~ 9임을 알 수 있는데, 이는 이러한 범위에서 Hg^{2+} 가 없는 DA가 그 형광 강도에 있어서 510 nm에서 플랫폼을 나타내는데 반해서, Hg^{2+} 가 있는 DA는 가장 큰 형광 소광을 나타내기 때문이다. 부가적으로, 검출 과정은 매우 신속하며 DA와 금속 양이온들과의 복합체 형성 상호작용이 30초 이내에 완료될 수 있으므로, 화학센서 DA가 수용액 중에서 Hg^{2+} 에 대해서 높은 감도를 나타낸다는 것을 알 수 있다.

도면

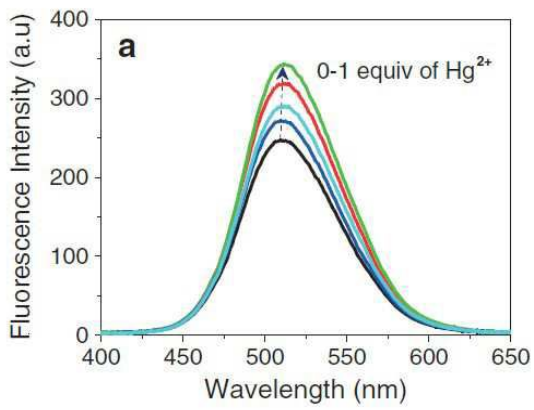
도면1



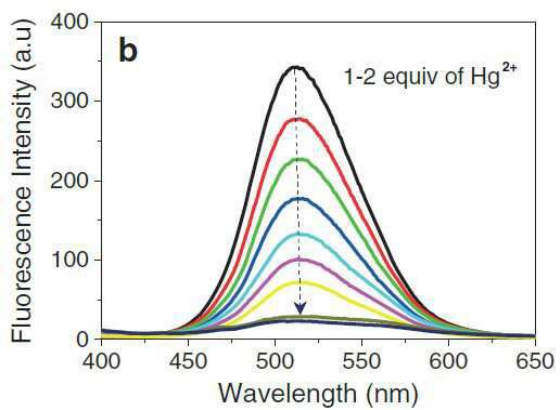
도면2



도면3a



도면3b



도면4

