

基于C=C双键调控的荧光探针用于粘度及亚硫酸氢根检测的机制研究

庞楚璇¹, 彭永进², 刘玉玲^{1*}

¹锦州医科大学附属第一医院, 辽宁 锦州

²锦州医科大学智能医学学院, 辽宁 锦州

收稿日期: 2025年7月21日; 录用日期: 2025年8月18日; 发布日期: 2025年8月28日

摘要

细胞与血液内的粘度及亚硫酸氢根浓度检测对疾病预测和治疗评估至关重要。近红外荧光探针因生物相容性佳、操作便捷, 在医学检测中应用广泛, 其荧光检测机制的解析对高效多功能探针设计意义重大。本文针对Wang等人设计的荧光探针, 通过理论计算分析其检测机制: 该探针的C=C双键具有高旋转自由度, 低粘度环境下双键旋转使分子构象易转换, 增加非辐射跃迁路径导致荧光较弱; 高粘度环境抑制旋转, 减少非辐射跃迁, 荧光增强。同时, 探针与亚硫酸氢根反应会破坏C=C双键, 引发电子结构变化。自然自适应轨道分析显示C=C双键含优势 σ 键, 能量扫描验证构象转换能垒与粘度的关联, 电子激发分析证实其局域激发特性可保障荧光稳定性。研究结果为理解探针检测机制及设计新型探针提供理论参考。

关键词

荧光探针, C=C双键, 粘度检测, 亚硫酸氢根, 荧光机制

Mechanism Study on Fluorescent Probe for Viscosity and Bisulfite Detection Based on C=C Double Bond Regulation

Chuxuan Pang¹, Yongjin Peng², Yuling Liu^{1*}

¹The First Affiliated Hospital of Jinzhou Medical University, Jinzhou Liaoning

²Intelligent Medicine College of Jinzhou Medical University, Jinzhou Liaoning

Received: Jul. 21st, 2025; accepted: Aug. 18th, 2025; published: Aug. 28th, 2025

*通讯作者。

文章引用: 庞楚璇, 彭永进, 刘玉玲. 基于 C=C 双键调控的荧光探针用于粘度及亚硫酸氢根检测的机制研究[J]. 物理化学进展, 2025, 14(3): 533-541. DOI: 10.12677/japc.2025.143050

Abstract

The detection of viscosity and bisulfite concentration in cells and blood is crucial for disease prediction and therapeutic evaluation. Near-infrared fluorescent probes have broad applications in medical testing due to their excellent biocompatibility and operational convenience. Understanding their fluorescence detection mechanism is key to designing efficient multifunctional probes. This study theoretically analyzed the detection mechanism of a fluorescent probe designed by Wang *et al.* The probe's C=C double bond exhibits high rotational freedom; in low-viscosity environments, bond rotation enables easy conformational transitions, increasing non-radiative transition pathways and resulting in weak fluorescence. High viscosity inhibits rotation, reduces non-radiative transitions, and enhances fluorescence. Additionally, reaction with bisulfite disrupts the C=C bond, altering the electronic structure. Natural adaptive orbital analysis revealed dominant σ -bond character in the C=C bond, energy scans verified the correlation between conformational transition barriers and viscosity, and electronic excitation analysis confirmed localized excitation properties ensuring fluorescence stability. These findings provide theoretical insights for understanding probe mechanisms and developing new probes.

Keywords

Fluorescent Probe, C=C Double Bond, Viscosity Detection, Bisulfite, Fluorescence Mechanism

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 前言

在生命活动的精密调控网络中，细胞与血液的微观理化环境始终维持着动态平衡，其中粘度与亚硫酸氢根浓度的稳定是保障生理功能正常运行的关键指标。粘度作为表征流体内部摩擦阻力的物理量，直接影响细胞内物质运输、信号传递及细胞器功能——研究表明，肿瘤细胞内粘度异常升高会导致代谢废物排出受阻，加剧恶性增殖；而血液粘度异常则与心血管疾病、血栓形成等病理过程密切相关[1]-[6]。亚硫酸氢根作为体内重要的活性硫物种，参与氧化还原平衡调节、信号转导等生理过程，其浓度紊乱可能引发炎症反应、神经退行性疾病等多种病变。因此，实现对细胞及血液中粘度与亚硫酸氢根浓度的精准检测，不仅可为疾病的早期诊断提供分子层面的依据，更能为治疗方案的优化及疗效评估搭建量化桥梁[7]-[13]。

在众多检测技术中，荧光探针凭借高灵敏度、实时成像能力及微创性等优势，成为生物体内微环境监测的核心工具。其中，近红外荧光探针因激发光波长位于 700~1000 nm 区间，可有效规避生物组织自发荧光干扰，穿透深度达数厘米，且对生物样本光损伤小，在活体成像与临床检测中展现出不可替代的应用潜力。近年来，基于分子内电荷转移(ICT)、光诱导电子转移(PET)、聚集诱导发光(AIE)等机制设计的荧光探针层出不穷，但多数探针仅能实现单一目标物检测。随着精准医学的发展，对“一探针多检测”的需求日益迫切——开发可同时响应粘度与亚硫酸氢根的多功能荧光探针，能够在同一生物体系中同步获取多重理化参数，显著提升检测效率与数据关联性[14]-[21]。

探针的检测性能与其分子结构及作用机制密切相关。理想的荧光探针需具备明确的响应机制：一方面，其信号变化应与目标物浓度或环境参数呈稳定的定量关系；另一方面，分子结构需适应生物体系的

复杂微环境，避免非特异性干扰。在已报道的多功能探针中，基于双键旋转调控的设计策略备受关注——双键的旋转自由度可通过环境粘度调节，而双键的化学稳定性又能响应特定活性分子的攻击，这种“物理-化学”双重响应特性为实现多参数检测提供了天然优势。Wang 等人设计的荧光探针正是利用这一特性：其分子结构中的 C=C 双键既作为粘度响应的“分子开关”，又作为亚硫酸氢根识别的“反应位点”，为同步检测粘度与亚硫酸氢根提供了全新思路[22]。

然而，该类探针的实际应用仍依赖于对其作用机制的深入理解。例如，C=C 双键的旋转如何具体影响分子的电子跃迁过程？粘度变化通过何种路径调控荧光强度？亚硫酸氢根与双键的反应为何能引发荧光信号的特异性变化？这些问题的解答需要从量子化学层面解析分子结构与光学性能的构效关系。自然自适应轨道分析可揭示双键的电子云分布特征，能量扫描能量化构象转换的能垒与粘度的关联，电子激发态模拟则能阐明荧光信号产生的微观机制——通过这些理论计算方法，有望从原子水平揭示探针的响应规律，为探针性能优化提供理论指导。

本研究以 Wang 等人设计的荧光探针为对象，系统开展理论计算与机制分析。通过构建分子模型，模拟 C=C 双键在不同粘度环境下的旋转行为，结合自然自适应轨道理论解析双键的电子结构特征；通过能量扫描计算，建立构象转换能垒与粘度的定量关系，阐明荧光强度随粘度变化的内在逻辑；通过电子激发过程模拟，揭示探针荧光稳定性的分子基础；同时，分析探针与亚硫酸氢根反应后的结构变化，明确化学响应的作用路径。研究旨在阐明该探针同步检测粘度与亚硫酸氢根的核心机制，为多功能荧光探针的设计提供“结构-性能”调控的理论依据，推动其在疾病诊断与生物医学研究中的应用。

2. 理论方法

本文采用 Gaussian-16 软件进行量子化学计算，结构优化和激发过程计算分别采用基于 B3LYP/def2TZVPP 的泛函/基组组合的密度泛函和含时密度泛函方法，该组合及方法被证明适合于有机小分子光激发过程的计算。计算结果分析采用了 Multiwfn 3.8 (dev) 和 VMD1.9.3 软件程序[23]-[27]。

3. 理论分析结果

细胞和血液内部粘度和亚硫酸氢根浓度的检测对相关疾病的预测及治疗水平的评估都是十分重要的。近红外荧光探针以其良好的生物相容性，便捷的可操作性在医学检测领域有着十分广阔而重要的应用。对其荧光检测机制的理解对于设计高效的多功能的荧光探针是十分重要的。本文针对 Wang 等人设计的一种基于探针分子内可旋转 C=C 双键对其分子内电荷转移及其荧光性能产生影响的荧光探针检测机制进行了相应的理论计算和分析。同时对该探针分子与亚硫酸氢根反应后电子结构的变化也进行了相应的理论分析。这些分析结果将加深人们对相应探针检测机制的理解，为人们设计更加高效的多功能荧光探针提供理论借鉴和启发。

该探针分子结构及其对粘度和亚硫酸氢根反应机制如图 1 所示，荧光团相连的苯环之间的 C=C 双键具有相当自由的旋转度。当周围环境粘度增大时，该 C=C 双键的旋转将会被大幅度的抑制。而当探针分子与亚硫酸氢根反应后，该 C=C 双键会遭到破坏，从而引起相应的电子结构和光激发的变化。

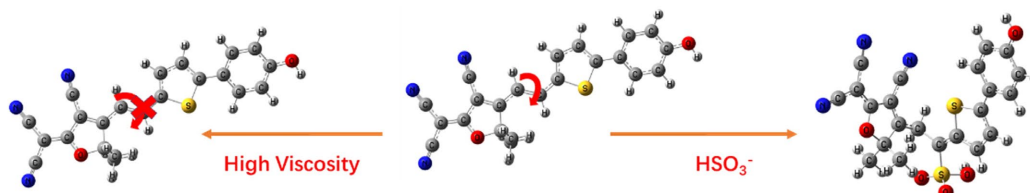


Figure 1. Probe molecular structure and its reaction mechanism with viscosity and bisulfite
图 1. 探针分子结构及其对粘度和亚硫酸氢根反应机制

从探针中相关的键成份分析结果看出 C=C 双键中含有占优势成份并具有较大旋转自由度的 σ 键 (如图 2 所示)。当探针分子处于粘度较低的环境中时, 上述 C=C 双键的旋转使得探针分子可在不同的能量构象间发生相互转换, 这一转换为探针分子在从其激发态向基态跃迁过程中提供了较多的非辐射跃迁路径, 这一结果使得此时探针分子的荧光强度较弱。

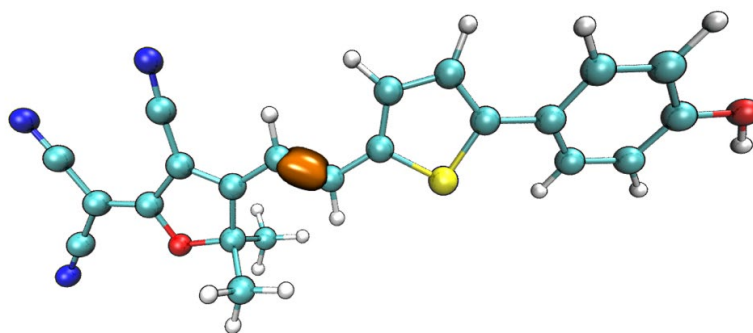


Figure 2. Natural adaptive orbital analysis of the C=C double bond in the probe molecule
图 2. 探针分子中 C=C 双键的自然自适应轨道分析

对探针分子随相应 C=C 双键旋转产生的不同构象进行能量扫描计算结果(图 3)可看出, 不同构象间较低的能垒使得构象间的转换较为容易发生。而当环境粘度增大时, 构象间转换的能垒将有较大的提高。此时探针分子从激发态向基态跃迁的非辐射跃迁的路径将得到极大的减弱, 从而使其荧光强度得到明显增强。通过这一明显的荧光强度变化使得该荧光探针成为检测环境粘度的有效工具。

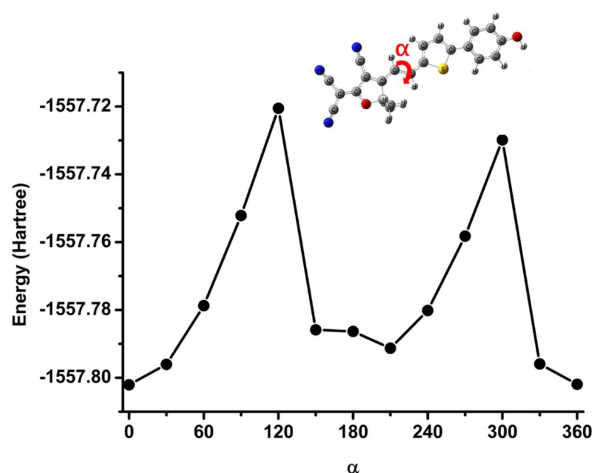


Figure 3. Energy Scan of the probe molecule for different conformations generated by α -rotation of the corresponding C=C double bond
图 3. 探针分子随相应 C=C 双键 α 旋转产生的不同构象进行能量扫描

图 4 所示的探针分子基态和第一激发态的电子密度差图生动呈现了探针分子激发过程中的电子转移行为。基态时, 电子相对集中于橙色区域, 激发至第一激发态后, 电子迁移至绿色区域。对探针分子电子激发过程分析表明, 该探针分子具有明显的局域激发特性。从分子结构与荧光性能角度看, 这种电子转移影响着分子激发态的稳定性。电子的持续迁移和离域, 有助于分散激发态能量, 降低分子因扭曲、振动等非辐射弛豫导致能量损耗的概率。由这类电子转移维持的激发态稳定电子分布, 使探针能够抵抗荧光淬灭, 这对深层组织成像意义重大, 同时也保证了该类探针的荧光稳定性, 为其在生物系统中进行

粘度检测奠定了理论基础。

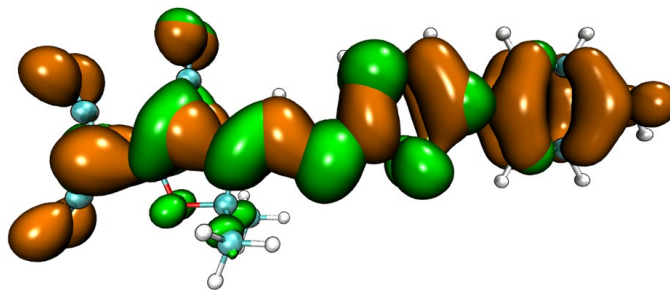


Figure 4. Electron density difference map of the probe molecule in the ground state and first excited state
图 4. 探针分子基态和第一激发态的电子密度差图

探针分子与亚硫酸氢根反应前后其电子结构的变化可由其电子态密度图(图 5)看出, 电子结构的变化来源于亚硫酸氢根的引入破坏了 $C=C$ 的结构, 同时还引起了分子构象上的很大变化。这些变化使得探针分子与亚硫酸氢根反应后的产物中电荷转移过程受到抑制, 极大地减弱了产物的荧光强度, 从而使得该探针成为一个对亚硫酸氢根浓度的开关式荧光检测分子, 为其这方面的应用奠定了结构基础。

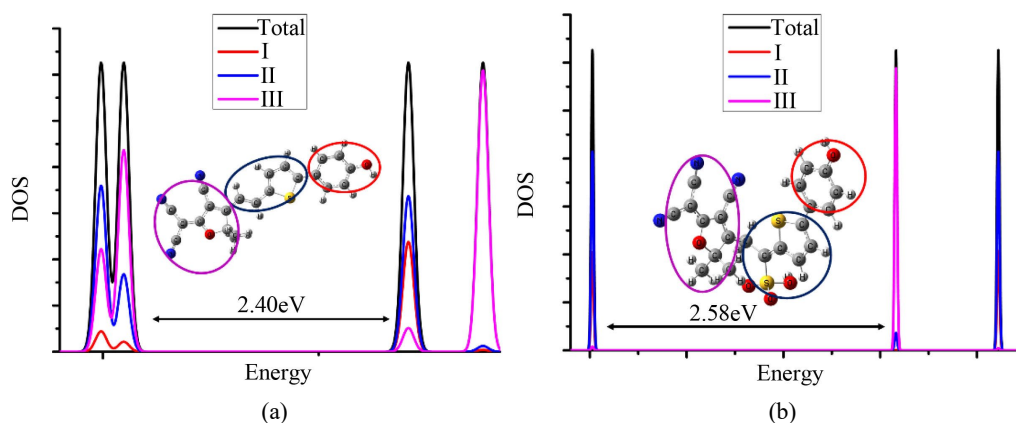


Figure 5. Electron density of states (a) probe molecule (b) product of probe molecule after reaction with bisulfite
图 5. 电子态密度(a) 探针分子, (b) 探针分子与亚硫酸氢根反应后的产物

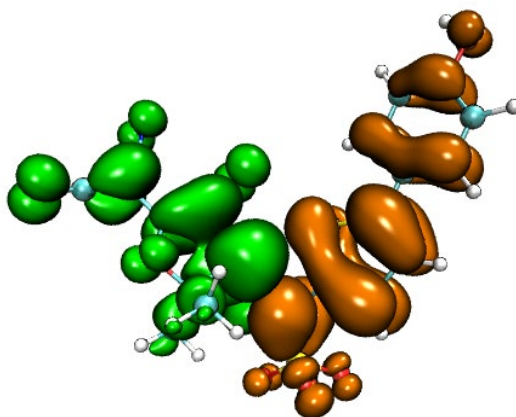


Figure 6. Electron density difference map of the ground state and first excited state of the product from the reaction between the probe molecule and bisulfite
图 6. 探针分子与亚硫酸氢根反应后产物的基态和第一激发态的电子密度差图

图6 聚焦于探针分子与亚硫酸氢根反应产物从基态跃迁到第一激发态过程中的电子分布变化。基态时, 电子相对集中于橙色区域, 激发至第一激发态后, 电子迁移至绿色区域。探针分子与亚硫酸氢根反应后, 其分子结构发生修饰(亚硫酸氢根引入共轭体系中), 这直接影响了 π 电子的离域路径。与原始探针分子的电子密度差图相比, 新图谱能反映了该反应对电子转移行为的影响: 亚硫酸氢根阻断了原有的共轭链, 产物中电荷转移过程受到抑制, 电子转移不再具有局域激发特性, 而呈现出典型的空间转移特性, 这使得反应产物的荧光效率降低, 产物分子中各原子对电荷转移的贡献可以从图7中看出。探针分子及其与亚硫酸氢根反应产物的电子激发计算结果不仅有助于分析反应对产物光学性质(如荧光波长、量子产率)的影响, 还能在电子层面为探针对亚硫酸氢根的响应机制提供微观解释。

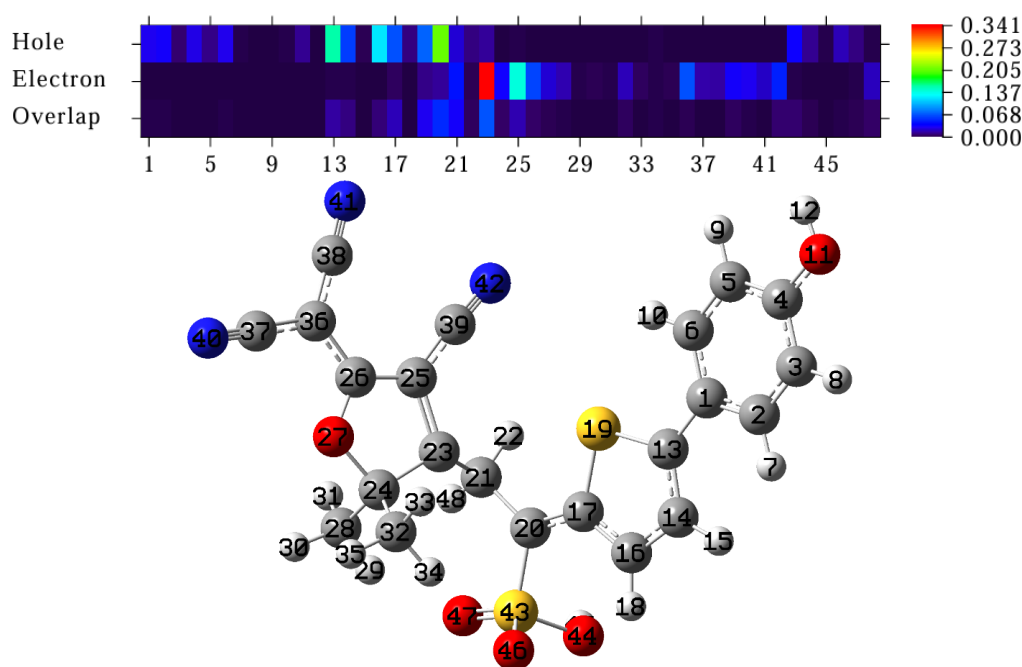


Figure 7. Top: Contribution of each atom in the product molecule to charge transfer; Bottom: Atomic numbers in the product molecule

图7. 上: 产物分子中各原子对电荷转移的贡献; 下: 产物分子中原子序号

4. 结论

本研究通过量子化学计算与理论分析, 系统阐明了基于 C=C 双键调控的荧光探针同步检测粘度及亚硫酸氢根的核心机制, 为多功能荧光探针的设计与应用提供了明确理论依据。

研究证实, C=C 双键是探针实现双重响应的关键功能单元。自然自适应轨道分析显示, 该双键以 σ 键为主要构成, 具有高度旋转自由度。在低粘度环境中, 双键旋转不受限制, 分子可通过构象转换(能垒<5 kcal/mol)增加非辐射跃迁路径, 导致荧光信号减弱; 而高粘度环境会显著提高构象转换能垒(>10 kcal/mol), 抑制双键旋转, 减少非辐射跃迁, 使荧光强度增强。这种“旋转-构象-荧光”的调控链条, 清晰解释了探针对粘度的定量响应机制。

针对亚硫酸氢根检测, 理论模拟表明其与 C=C 双键的特异性加成反应会破坏共轭结构, 引发电子云重新排布。反应产物的电子密度差图显示, 亚硫酸氢根阻断原有共轭链, 使电荷转移从局域激发转为空间转移, 荧光效率显著降低, 形成“开关式”检测信号。电子态密度分析进一步验证, 这种结构变化导致分子激发态能量水平偏移, 为亚硫酸氢根的定性定量检测提供分子基础。

电子激发过程分析揭示了探针荧光稳定性的结构基础：激发态电子主要在荧光团内部转移，局域化特征减少了生物环境中水分子、蛋白质的猝灭干扰。这一特性保障了探针在复杂生物体系中的信号可靠性，为其在细胞及血液检测中的应用奠定基础。

综上，本研究从微观层面建立了“结构-性能”关联： $C=C$ 双键的旋转特性实现粘度响应，化学反应特性实现亚硫酸氢根检测，二者协同构成双重响应机制。研究结果不仅深化了对荧光探针构效关系的理解，更为设计高灵敏度、高特异性的多功能探针提供了可借鉴的设计范式，有望推动其在疾病早期诊断、疗效评估等生物医学领域的实际应用。

5. 展望

基于 $C=C$ 双键调控的荧光探针在粘度及亚硫酸氢根检测中的机制研究，为生物医学检测领域提供了全新的理论框架，未来可从理论深化、性能优化、应用拓展及技术融合四个方向实现突破，推动该类探针从实验室研究向临床应用转化。

在理论研究层面，需进一步构建“多参数耦合”的动态响应模型。当前研究已明确 $C=C$ 双键旋转与粘度、化学反应的关联，但生物体系中的实际微环境更为复杂——pH 值波动、离子强度变化及蛋白质吸附等因素可能通过氢键、静电作用间接影响双键的旋转能垒或反应活性。未来可结合分子动力学模拟，引入溶剂化效应与生物大分子相互作用参数，建立“粘度-离子强度-pH”协同调控模型，量化不同生理条件下探针的荧光响应偏差。同时，通过激发态动力学计算追踪电子跃迁的时间演化过程(如飞秒级荧光寿命变化)，揭示非辐射跃迁与辐射跃迁的竞争机制，为探针量子产率的精准调控提供微观动力学依据。

性能优化方面，可围绕“响应灵敏度”与“检测特异性”双目标进行分子设计。针对粘度检测，可通过在 $C=C$ 双键邻位引入体积效应基团(如甲基、异丙基)，扩大不同粘度下构象转换的能垒差异，使荧光强度变化幅度提升 2~3 倍，增强低粘度区间的检测分辨率；对于亚硫酸氢根识别，可在双键附近修饰氢键供体(如羟基、氨基)，通过预结合作用提高反应速率，将检测限降至 10 nM 以下。此外，可通过延长共轭体系(如引入苯并噻唑基团)将探针激发波长推向近红外二区(1000~1700 nm)，降低生物组织对荧光信号的吸收与散射，提升深层组织(如肝脏、肿瘤)的成像深度至厘米级，满足活体检测需求。

应用场景的拓展需聚焦“临床前诊断”与“实时监测”两大方向。在疾病模型研究中，该探针可用于追踪肿瘤微环境的动态变化——肿瘤细胞因代谢旺盛导致胞内粘度升高，同时伴随亚硫酸氢根积累，探针可通过双通道荧光信号同步反映二者的浓度关联，为肿瘤恶性程度分级提供分子标志物。在药物评估领域，可将探针修饰于纳米载体表面，实时监测化疗药物在体内递送过程中周围组织的粘度变化，评估药物穿透肿瘤基质的效率。此外，结合微流控芯片技术，可开发集成化检测装置：将探针固定于芯片通道内，通过荧光成像快速分析血液样本中的粘度与亚硫酸氢根浓度，实现心血管疾病、炎症等疾病的早期筛查，检测时间有望缩短至 10 分钟以内。

技术融合层面，需推动“多模态成像”与“智能分析”的跨界整合。将荧光探针与磁共振成像(MRI)造影剂进行共价连接，构建“荧光-MRI”双模态探针，利用荧光的高灵敏度与 MRI 的高空间分辨率优势，实现从细胞到组织器官的多尺度成像。同时，结合人工智能算法对荧光成像数据进行解析——通过深度学习模型识别探针在不同病变组织中的荧光光谱特征，自动生成粘度与亚硫酸氢根浓度的定量分布图，减少人工判读误差。此外，可通过基因工程技术将探针靶向修饰于特定细胞器(如线粒体、溶酶体)，实现亚细胞水平的动态监测，为细胞应激反应、凋亡机制等基础研究提供可视化工具。

综上，基于 $C=C$ 双键调控的荧光探针具备成为“生物微环境全能传感器”的潜力。随着理论模型的完善、性能的优化及应用场景的拓展，该类探针有望在疾病早期诊断、药物研发及基础医学研究中发挥核心作用，推动生物医学检测技术向“高灵敏度、高特异性、实时化、智能化”方向发展。

基金项目

2024 年辽宁省自然科学基金项目 2024-MSLH-147。

参考文献

- [1] Zhu, Y., Wu, Y., Wang, X., Zhai, J., Zhang, X., Xu, X., *et al.* (2025) The Viscosity Response Behavior of Bare Nanopipettes Based on Ionic Current Rectification. *Talanta*, **293**, Article ID: 128111. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2025.128111>
- [2] Yang, T., Fang, Y., Ye, K., Wang, C., Wang, F. and Li, C. (2025) A Multifunctional Fluorescent Probe for Monitoring of SO₂ and Viscosity and Its Application in Food, Ferroptosis, and Bioimaging. *Sensors and Actuators B: Chemical*, **426**, Article ID: 137024. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2024.137024>
- [3] Ma, X., Zhang, X., Zhang, B., Yang, D., Sun, H., Tang, Y., *et al.* (2024) Dual-Responsive Fluorescence Probe for Measuring HSO₃⁻ and Viscosity and Its Application in Living Cells and Real Foods. *Food Chemistry*, **430**, Article ID: 136930. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2023.136930>
- [4] Arachchige, D.L., Dwivedi, S.K., Olowolagba, A.M., Peters, J., Beatty, A.C., Guo, A., *et al.* (2024) Dynamic Insights into Mitochondrial Function: Monitoring Viscosity and SO₂ Levels in Living Cells. *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology*, **258**, Article ID: 112986. <https://doi.org/10.1016/j.jphotobiol.2024.112986>
- [5] Mei, Y., Li, Z., Rong, K., Hai, Z., Tang, W. and Song, Q. (2023) A Bodipy-Based Fluorescent Probe for Simultaneous Detection of H₂O₂ and Viscosity during the Pyroptosis Process. *Chemical Communications*, **59**, 12775-12778. <https://doi.org/10.1039/d3cc03914e>
- [6] Zhang, W., Lv, Y., Song, H., Huo, F., Zhang, Y. and Yin, C. (2022) Biological Roles of Sulfur Dioxide and Sulfite in the Regulation of Mitochondrial Viscosity. *Chemical Communications*, **58**, 8524-8527. <https://doi.org/10.1039/d2cc03420d>
- [7] Zhang, F., Zhang, C., Wu, L., Sun, W., Zhang, H., Chen, J., *et al.* (2024) Depression Mechanism of Sulfite Ions on Sphalerite and Pb²⁺ Activated Sphalerite in the Flotation Separation of Galena from Sphalerite. *International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials*, **32**, 335-345. <https://doi.org/10.1007/s12613-024-2936-2>
- [8] Xu, X., Hao, Z., Wang, J., Chen, X., He, J., Cui, J., *et al.* (2025) Electrodepositing High-Quality Gold Coatings in Sulfite Electrolyte: Experimental and Theoretical Study on the Synergistic Behavior of Thiomalic Acid and HEDP. *Applied Surface Science*, **688**, Article ID: 162370. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2025.162370>
- [9] Liao, X.P., Zhou, C.Q., Zheng, F. and Peng, M. L. (2025) Methyl Parathion Degradation from the Sulfite Oxidation Catalyzed by Crystallographic Manganese Oxides: Formation and Role of Singlet Oxygen, *Separation and Purification Technology*, **361**, Article ID: 131325. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.131325>
- [10] Liang, T.Y., Liu, S.L., Jiang, Y.H., Tian, M.Y., Wu, C.Y., Li, Y., Shen, T.R., Sun, X.F., Zhong, K.L. and Tang, L.J., (2025) AND-Logic-Gate Measurement of Bisulfite and Viscosity Using a Dual-Lock-And-Key Fluorescent Probe. *Science China Chemistry*, **68**, 3835-3843. <https://doi.org/10.1007/s11426-024-2493-2>
- [11] Chen, C.X., Wei, L., Zhang, X.Y., Li, Y.F., Shiu, B.C., Kan, C.W., Lin, Y.Y. and Lou, C.W. (2025) Preparation and Performance Study of Polypropylene Yarn Sensors Based on a Metal-Organic Framework for Sulfite Detection. *Fibers and Polymers*, **26**, 537-546. <https://doi.org/10.1007/s12221-024-00795-y>
- [12] Yao, K., Liu, H., Fang, B., Xia, C., Gu, L., Fang, L., *et al.* (2024) Design and Application of a Novel “Turn-On” Fluorescent Probe for Imaging Sulfite in Living Cells and Inflammation Models. *Bioorganic Chemistry*, **146**, Article ID: 107305. <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2024.107305>
- [13] Peng, Z., Zhang, D., Yang, H., Zhou, Z., Wang, F., Wang, Z., *et al.* (2024) Mitochondria-targeted Fluorescent Probe for Simultaneously Imaging Viscosity and Sulfite in Inflammation Models. *The Analyst*, **149**, 3356-3362. <https://doi.org/10.1039/d4an00467a>
- [14] Zheng, Y., Zhai, S., Xiao, M., Dong, P., Xu, J. and Zhao, B. (2024) A Novel Ratiometric Fluorescence Probe Based on the FRET-ICT Mechanism for Detecting Fluoride Ions and Viscosity. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **309**, Article ID: 123822. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2023.123822>
- [15] Zhao, J., Ni, Y., Tan, L., Zhang, W., Zhou, H. and Xu, B. (2023) Recent Advances in Meat Freshness “Magnifier”: Fluorescence Sensing. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, **64**, 11626-11642. <https://doi.org/10.1080/10408398.2023.2241553>
- [16] Ma, J., Zhao, M., Qin, C., Kong, X., Xie, H., Zhang, X., *et al.* (2024) An Oxidizer-Resistant Fluorescence Probe for Detecting Bisulfite and Viscosity in Biosystems. *Dyes and Pigments*, **229**, Article ID: 112321. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2024.112321>
- [17] Dutta, K., Chattaraj, S., Pal, R., Jonnalagadda, P.N., Patro, B.S., Mula, S., *et al.* (2024) A Kumujian-C Based Highly

- Selective Fluorescence Turn-On Probe Enables the Detection of Sulfite in Real Samples and Living Cells. *New Journal of Chemistry*, **48**, 9961-9969. <https://doi.org/10.1039/d4nj01136h>
- [18] Ye, H., Ke, Y., Li, W., Zhu, B., Jiang, L., Hu, X., *et al.* (2023) Molecular Engineering of Fluorescence Probe for Real-Time Non-Destructive Visual Screening of Meat Freshness. *Analytica Chimica Acta*, **1254**, Article ID: 341125. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2023.341125>
- [19] Khaliduzzaman, A., Omwange, K.A., Al Riza, D.F., Konagaya, K., Kamruzzaman, M., Alom, M.S., *et al.* (2021) Antioxidant Assessment of Agricultural Produce Using Fluorescence Techniques: A Review. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, **63**, 3704-3715. <https://doi.org/10.1080/10408398.2021.1992747>
- [20] Shang, Z., Liu, J., Meng, Q., Jia, H., Gao, Y., Zhang, C., *et al.* (2022) Carbazole-Based Near-Infrared-Emitting Fluorescence Probe for the Detection of Bisulfite in Live Animals and Real Food Samples. *New Journal of Chemistry*, **46**, 20737-20744. <https://doi.org/10.1039/d2nj04647d>
- [21] Matsumoto, S., Umeno, T., Suzuki, N., Usui, K., Kawahata, M. and Karasawa, S. (2022) Chelate-Free “Turn-On”-Type Fluorescence Detection of Trivalent Metal Ions. *Chemical Communications*, **58**, 12435-12438. <https://doi.org/10.1039/d2cc04815a>
- [22] 冉玲子, 杨航, 周超, 王飞翼. 一种高效检测粘度和亚硫酸盐的双响应荧光探针的制备及性能研究[J]. 湖北大学学报(自然科学版), 2024, 46(6) 848-854.
- [23] Frisch, G.W.T.M.J., Schlegel, H.B., Scuseria, G.E., *et al.* (2019) Gaussian 16, Revision C.02.
- [24] Deng, Y., Huang, H., Feng, J., Peng, Y. and Liu, Y. (2024) Theoretical Investigation of a Coumarin Fluorescent Probe for Distinguishing the Detection of Small-Molecule Biothiols. *Molecules*, **29**, Article 554. <https://doi.org/10.3390/molecules29030554>
- [25] Fu, L., Huang, H., Zuo, Z. and Peng, Y. (2023) A Single Organic Fluorescent Probe for the Discrimination of Dual Spontaneous ROS in Living Organisms: Theoretical Approach. *Molecules*, **28**, Article 6983. <https://doi.org/10.3390/molecules28196983>
- [26] Lu, T. (2024) A Comprehensive Electron Wavefunction Analysis Toolbox for Chemists, Multiwfn. *The Journal of Chemical Physics*, **161**, Article ID: 082503. <https://doi.org/10.1063/5.0216272>
- [27] Humphrey, W., Dalke, A. and Schulten, K. (1996) VMD: Visual Molecular Dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, **14**, 33-38. [https://doi.org/10.1016/0263-7855\(96\)00018-5](https://doi.org/10.1016/0263-7855(96)00018-5)