

以芘(Pyrene)为荧光母核的PID荧光探针检测 Hg^{2+} 的机制研究

李昕昱¹, 徐嘉彤², 张恺祎², 徐嘉心², 谢元冬², 辛 淇², 刘玉玲^{1*}

¹锦州医科大学智能医学学院, 辽宁 锦州

²锦州医科大学护理学院, 辽宁 锦州

收稿日期: 2026年6月22日; 录用日期: 2026年7月17日; 发布日期: 2026年7月28日

摘 要

为阐明PID荧光探针针对重金属离子 Hg^{2+} 的特异性荧光“关-开”识别微观机制, 本研究采用B3LYP与长程校正泛函CAM-B3LYP两套密度泛函理论方案的密度泛函理论(DFT)、含时密度泛函理论(TD-DFT)开展量子化学计算, 结合平均局部离子化能(ALIE)、态密度(DOS)、电子密度差异、原子电荷转移贡献热图、振子强度等多维度电子结构表征手段, 系统解析PID探针与 Hg^{2+} 反应前后分子轨道、电子转移及光激发特性变化。ALIE分析结果证实, 探针分子中C=C双键区域电子电离能最低, 是 Hg^{2+} 发生特异性配位及加成反应的核心活性位点; 未结合 Hg^{2+} 时, PID探针存在分子内电荷转移(ICT)效应, $\text{S}_0 \rightarrow \text{S}_1$ 振子强度极低, 荧光完全猝灭; 与 Hg^{2+} 发生特异性反应后, 分子共轭骨架重构, 前线轨道同步局域于荧光母核, 激发模式由分子内电荷转移(ICT)转变为局域激发(LE), 辐射跃迁概率大幅提升, 体系释放明亮蓝色荧光。本研究从电子行为层面完整揭示PID探针识别 Hg^{2+} 的构效关系, 为重金属离子响应型荧光探针分子设计、识别位点优化提供理论支撑与标准化计算分析思路。

关键词

PID荧光探针, Hg^{2+} , 平均局部离子化能, 分子内电荷转移, 局域激发, 电子结构

Elucidation of Hg^{2+} Sensing Mechanism for a Pyrene-Based PID Fluorescent Probe

Xinyu Li¹, Jiatong Xu², Kaiyi Zhang², Jiaxin Xu², Yuandong Xie², Qi Xin², Yuling Liu^{1*}

¹School of Intelligent Medicine, Jinzhou Medical University, Jinzhou Liaoning

²School of Nursing, Jinzhou Medical University, Jinzhou Liaoning

Received: June 22, 2026; accepted: July 17, 2026; published: July 28, 2026

*通讯作者。

文章引用: 李昕昱, 徐嘉彤, 张恺祎, 徐嘉心, 谢元冬, 辛淇, 刘玉玲. 以芘(Pyrene)为荧光母核的PID荧光探针检测 Hg^{2+} 的机制研究[J]. 自然科学, 2026, 14(4): 481-489. DOI: 10.12677/ojns.2026.144052

Abstract

To clarify the microscopic “off-on” fluorescence recognition mechanism of PID fluorescent probe for heavy metal ion Hg^{2+} , two computational schemes including conventional B3LYP and long-range corrected CAM-B3LYP functionals were adopted for DFT and TD-DFT quantum chemical calculations in this work. Multiple electronic structure characterization methods including average local ionization energy (ALIE), density of states (DOS), electron density difference, atomic charge transfer contribution heat map and oscillator strength were combined to systematically analyze the changes of molecular orbitals, electron transfer and photoexcitation characteristics of PID probe before and after reaction with Hg^{2+} . ALIE analysis verified that the C=C double bond region of the probe possessed the lowest ionization energy, which served as the core active site for specific coordination/addition reaction with Hg^{2+} . In the absence of Hg^{2+} , the PID probe exhibited intramolecular charge transfer (ICT) effect with extremely low oscillator strength of $S_0 \rightarrow S_1$ transition, leading to complete fluorescence quenching. After specific reaction with Hg^{2+} , the molecular conjugated skeleton was reconstructed, and frontier orbitals were localized on the fluorophore core simultaneously. The excitation mode transformed from intramolecular charge transfer (ICT) to local excitation (LE), which greatly increased the probability of radiative transition and emitted bright blue fluorescence. This study fully revealed the structure-property relationship of PID probe for Hg^{2+} recognition from the perspective of electronic behavior, and provided theoretical support and standardized computational analysis strategy for molecular design and recognition site optimization of heavy metal ion responsive fluorescent probes.

Keywords

PID Fluorescent Probe, Hg^{2+} , Average Local Ionization Energy, Intramolecular Charge Transfer, Local Excitation, Electronic Structure

Copyright © 2026 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. 引言

汞离子(Hg^{2+})是一类具有强蓄积性、高生物毒性的典型重金属污染物,广泛来源于冶金、化工、电镀、废弃电池等工业废水排放,经地表水、土壤食物链逐级富集后极易进入动植物与人体内部[1][2]。 Hg^{2+} 可穿透细胞膜蓄积于肾脏、中枢神经系统,破坏细胞氧化还原平衡、干扰蛋白质折叠与信号传导,长期暴露会诱发神经损伤、肾功能衰竭甚至恶性肿瘤,因此各国水环境标准均对水体 Hg^{2+} 含量设置极低限值,实现环境水样、活细胞内 Hg^{2+} 高灵敏、高特异性快速检测,对生态污染防控、人体健康风险评估、疾病早期筛查均具备不可替代的科学价值与实际应用意义。

在现有重金属离子检测技术中,原子吸收光谱、电感耦合等离子体质谱等大型仪器虽检测精度高,但设备昂贵、样品前处理繁琐、无法实现活体原位实时成像,难以满足现场快速筛查与细胞水平可视化监测需求。荧光探针检测技术凭借操作简便、响应速度快、时空分辨率优异、可实现活细胞/活体无损荧光成像等突出优势,已成为重金属离子识别领域的主流研究方向[3]-[6]。其中反应型荧光探针依靠 Hg^{2+} 诱导分子骨架发生特异性配位、加成或断裂反应,从根源上改变分子电子结构实现荧光“关-开”信号切换,相比螯合型探针具备更低背景荧光、更强离子抗干扰能力,是构建高信噪比 Hg^{2+} 检测体系的最优

选择。

分子荧光信号的切换本质由光激发过程中的电子转移行为决定，分子内电荷转移(ICT)与局域激发(LE)是调控荧光猝灭与荧光增强的两大核心电子激发模式。ICT 效应下电子发生跨片段长距离迁移，激发态非辐射弛豫通道占主导，分子表现为无荧光；而 LE 局域激发仅在荧光团内部发生电子重排，轨道重叠度高，辐射跃迁概率显著提升，可产生明显荧光发射[7]-[10]。PID 探针以芘(Pyrene)为荧光母核、1,2-萘醌为吸电子识别片段，分子内置富电子 C=C 双键活性位点，可特异性捕获 Hg^{2+} 并发生加成反应，宏观呈现由无荧光到蓝色荧光的显著开关响应[11]。

尽管该探针具备优异的 Hg^{2+} 选择性，但现有研究仅停留在光谱测试层面，尚未从电子结构角度阐明其识别微观机理：C=C 双键为何成为 Hg^{2+} 专属反应位点、 Hg^{2+} 结合前后 ICT 向 LE 转换的轨道演化规律、荧光由暗转蓝的量化光物理机制均缺乏系统理论佐证，极大限制了基于该骨架的探针分子修饰与性能优化。

平均局部离子化能(ALIE)是精准定位分子亲电活性位点的前沿波函数分析手段，可直观量化分子不同区域电子云电离难易程度；态密度(DOS)、电子密度差分、原子电荷贡献热图结合 TD-DFT 振子强度计算，能够完整解析前线轨道分布、电子转移路径与激发态跃迁特征，形成一套完整的荧光探针机制理论分析体系。本文以游离 PID 探针、PID- Hg^{2+} 反应复合物为研究对象，依托 DFT/TD-DFT 量子化学计算，借助 ALIE 图谱锁定 Hg^{2+} 作用的 C=C 双键反应位点，多维度对比反应前后轨道分布、电子迁移行为与光物理参数变化，完整揭示 Hg^{2+} 诱导 ICT 向 LE 激发模式转换、最终实现蓝色荧光开启的微观构效关系，为新型汞离子荧光探针的分子结构改造、识别位点调控提供清晰理论指导，同时建立一套可推广至各类金属离子荧光探针的电子结构理论分析范式。

2. 计算方法

本研究全部量子化学计算基于 Gaussian 16 程序完成，采用 B3LYP 泛函开展分子基态几何结构优化，金属 Hg 原子选用 LANL2DZ 赝势基组，C、H、O 等非金属原子采用 6-311G (d,p)基组；水相环境采用 PCM 隐式溶剂模型模拟水体检测体系。完成稳定基态结构优化后，开展 TD-DFT 计算获取 $S_0 \rightarrow S_1$ 第一激发态跃迁参数(激发能、振子强度、轨道跃迁组成)；采用 CAM-B3LYP 长程校正泛函重复全部几何优化、TD-DFT 光物理计算，用于校正 ICT 长程电荷转移体系的轨道与振子强度计算偏差[12]；利用 Multiwfn 波函数分析程序完成 ALIE 平均局部离子化能、态密度 DOS、电子密度差分、原子电荷转移贡献热图、空穴 - 电子分布图谱绘制与定量分析，对比 PID 游离探针、PID- Hg^{2+} 复合物的电子结构差异[13]。

基于优化后的稳定构型，采用零点振动能(ZPE)校正后的吉布斯自由能计算 PID 与 Hg^{2+} 加成反应结合能 ΔG ； $\Delta G < 0$ 代表反应热力学自发；同步提取 PID- Hg^{2+} 复合物关键几何参数：Hg-C 键长、C=C 双键键长变化、二面角共轭扭转角，明确 Hg^{2+} 与 C=C 双键为共价加成作用而非弱配位作用。

ICT 型荧光探针分子存在分子内长程电荷转移特征，传统 B3LYP 泛函对长程电子相互作用描述不足，易低估轨道分离程度、失真计算振子强度与激发波长；CAM-B3LYP 引入库仑长程校正项，能够精准描述长程电荷转移激发态，适配 ICT/LE 切换型荧光探针体系。

3. 结果与讨论

3.1. ALIE 图谱定位 Hg^{2+} 特异性反应位点：分子 C=C 双键

平均局部离子化能(ALIE)可直观表征分子各区域电子云易失去电子的程度，ALIE 数值越低，对应区域电子活性越高，越易与金属阳离子 Hg^{2+} 发生亲电配位、加成反应。PID 探针检测 Hg^{2+} 机制以及其 ALIE 分布图如图 1 和图 2 所示，图 2 中分子共轭骨架中 C=C 双键区域 ALIE 数值显著低于萘醌、芘其余芳香

环结构, C=C 双键为分子电子最富集、电离能最低的活性区域, 是 Hg^{2+} 进攻、发生特异性结合的识别位点。 Hg^{2+} 作为软酸性重金属离子, 易与富电子 C=C 双键发生配位加成, 破坏探针原有共轭电荷转移骨架, 解释了 PID 探针对于 Hg^{2+} 的高离子选择性。ALIE 计算结果从电子活性层面明确 C=C 双键为识别核心位点, 为探针分子改性(修饰双键位点调控响应灵敏度)提供直接理论依据。 Hg^{2+} 作为软酸性重金属离子, 易与富电子 C=C 双键发生共价加成, 破坏探针原有共轭电荷转移骨架。为验证选择性, 额外构建 Hg^{2+} 分别结合萘醌 C=O、茚苯环的竞争模型并计算结合能: Hg^{2+} 与 C=C 双键加成 ΔG 为负值(自发), 与羰基、芳香环结合 ΔG 均显著为正(无法自发结合), 从热力学层面排除其余潜在结合位点, 完整解释 PID 探针对于 Hg^{2+} 的高离子选择性。ALIE 计算结果结合热力学结合能数据, 双重证明 C=C 双键为识别核心位点, 为探针分子改性(修饰双键位点调控响应灵敏度)提供直接理论依据。

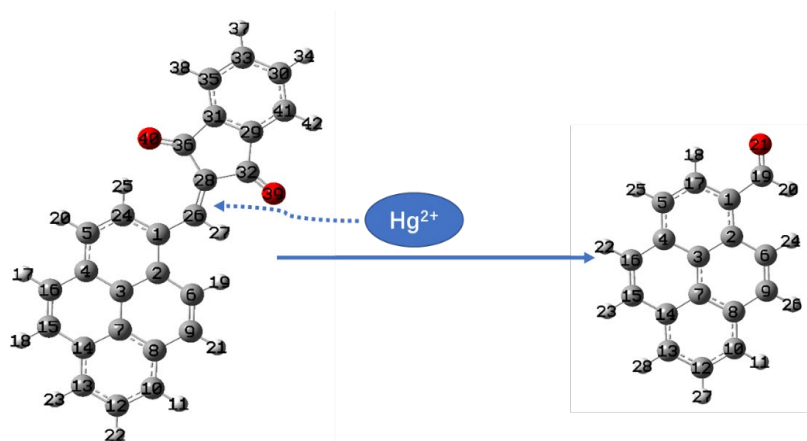


Figure 1. Schematic diagram of Hg^{2+} detection mechanism of fluorescent probe PID
图 1. 荧光探针 PID 检测 Hg^{2+} 机制

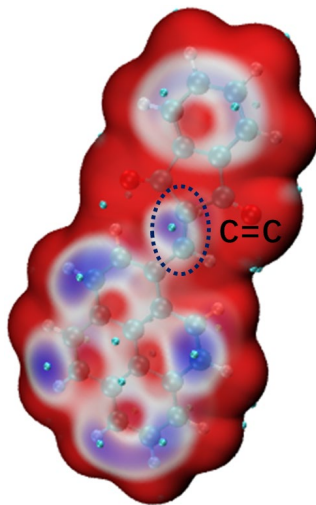


Figure 2. ALIE (average local ionization energy) diagram of fluorescent probe PID
图 2. 荧光探针 PID 的 ALIE (平均局部离子化能)图

3.2. DOS 态密度分析: 反应前后前线轨道分布与 ICT/LE 激发模式转变

态密度(DOS)图谱可直观拆分 HOMO、LUMO 轨道的原子轨道贡献, 区分分子内电荷转移与局域激

发两种电子跃迁模式。1) 游离 PID 探针 DOS 特征(ICT 模式)(如图 3 所示)。其中黑色表示总态密度、红色表示芘片段轨道贡献、蓝色表示 1,2-萘醌片段轨道贡献。游离 PID 探针的态密度, 最高占据轨道 HOMO 主要由芘(Pyrene)荧光母核原子轨道贡献, 最低空轨道 LUMO 集中分布于 1,2-萘醌吸电子片段, HOMO 与 LUMO 轨道完全分属分子两个独立共轭单元, 轨道空间分离显著。该轨道分布特征为分子内电荷转移 (ICT) 提供电子结构基础: 光激发时电子从芘给体单元跨分子骨架向萘醌受体单元远距离转移, 长程电荷转移会大幅提升激发态非辐射弛豫效率, 激发态电子难以通过辐射跃迁释放光子, 宏观表现为探针无荧光。2) PID- Hg^{2+} 产物 DOS 特征(LE 模式)(如图 4 所示) Hg^{2+} 与 $\text{C}=\text{C}$ 双键结合后分子骨架重构, 产物 DOS 图谱发生根本性改变: HOMO 与 LUMO 轨道均高度局域于完整芘共轭荧光母核, 分子不存在跨单元的轨道分离。光激发过程中电子仅在芘荧光团内部重新排布, 发生典型局域激发(LE); 局域激发下分子轨道重叠程度显著提升, 非辐射弛豫通道被抑制, 辐射跃迁占主导, 体系产生特征蓝色荧光。DOS 对比结果直接证明: Hg^{2+} 结合 $\text{C}=\text{C}$ 双键引发前线轨道分布重构, 实现激发模式从 ICT 到 LE 的切换, 是荧光“关-开”转换的轨道根源。

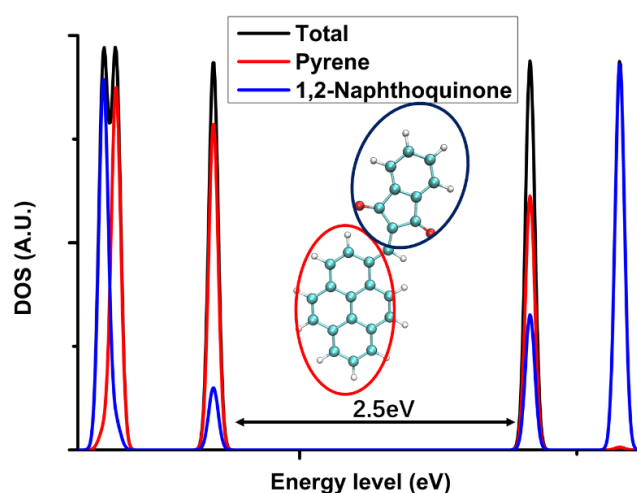


Figure 3. DOS (density of states) diagram of fluorescent probe PID
图 3. 荧光探针 PID 的 DOS (态密度)图

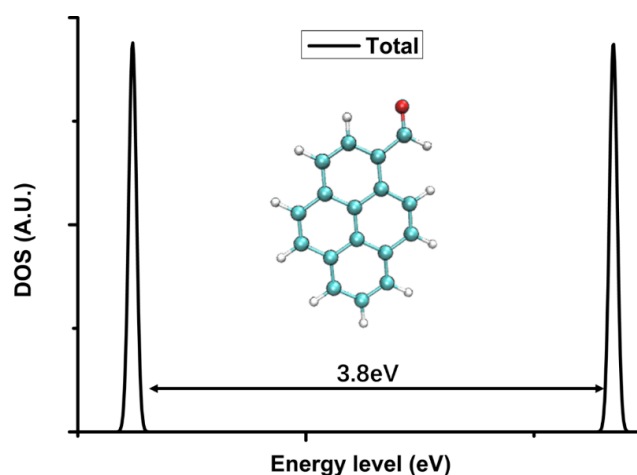
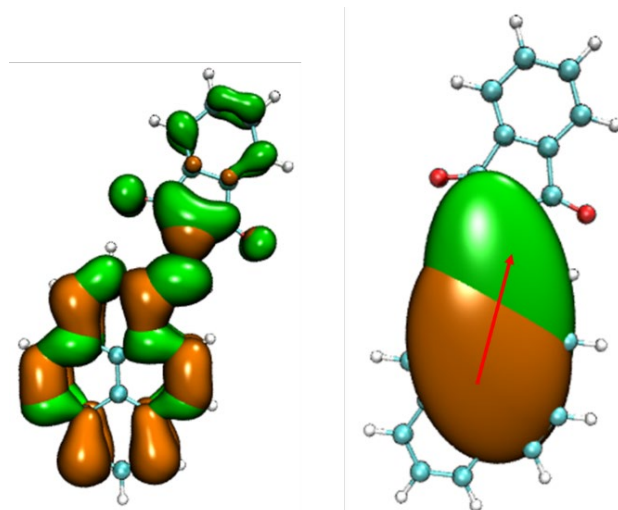


Figure 4. DOS diagram of the reaction product of fluorescent probe PID with Hg^{2+}
图 4. 荧光探针 PID 与 Hg^{2+} 反应产物的 DOS (态密度)图

3.3. 电子密度差分与空穴 - 电子分布：直观呈现电子转移行为

电子密度差分图中橙色区域代表空穴(电子流失区域)、绿色区域代表电子富集区域,可直观可视化 $S_0 \rightarrow S_1$ 激发全过程电子迁移路径。

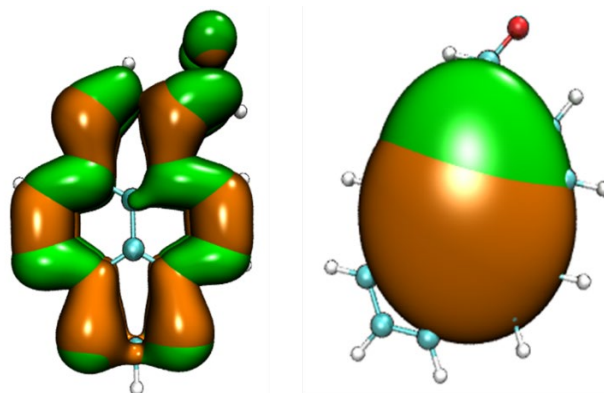
游离 PID 探针(图 5): 空穴(橙色)完全分布于茈单元, 电子富集区(绿色)集中在蔡醌片段, 电子发生跨共轭骨架长距离转移, 典型 ICT 电子转移特征, 非辐射损耗大, 荧光猝灭; PID- Hg^{2+} 产物(图 6): 空穴与电子富集区域全部重叠于茈荧光母核内部, 无跨片段电子迁移, 仅发生分子内局部电子重排, 标准 LE 局域激发特征, 辐射跃迁效率显著提升, 释放蓝色荧光。空穴 - 电子分布图谱与电子密度差分结论完全吻合, 直观验证 ICT 与 LE 两种激发模式下电子转移行为的巨大差异, 解释反应前后荧光信号的剧烈变化。



橙色代表空穴分布; 绿色代表电子分布

Figure 5. Charge transfer distribution diagram of fluorescent probe PID

图 5. 荧光探针 PID 的电荷转移分布图



橙色代表空穴分布; 绿色代表电子分布

Figure 6. Charge transfer distribution diagram of the reaction product of fluorescent probe PID with Hg^{2+}

图 6. 荧光探针 PID 与 Hg^{2+} 反应产物的电荷转移分布图

3.4. 原子电荷转移贡献热图：定量解析各单元电子参与程度

原子电荷转移贡献热图以原子序号为横坐标，定量输出各原子对空穴、电子、轨道重叠的贡献值，量化不同片段在电子跃迁中的作用。色条刻度代表空穴/电子轨道贡献数值大小，暖色为高贡献、冷色为低贡献。游离 PID 探针(图 7)：空穴高贡献原子全部属于茈单元，电子高贡献原子集中于萘醌片段，两个共轭单元轨道重叠贡献极低，定量证实电子给体(茈)、电子受体(萘醌)空间分离，长程 ICT 效应占主导，荧光猝灭；PID-Hg²⁺产物(图 8)：空穴、电子高贡献原子均为茈荧光团骨架原子，轨道重叠贡献大幅提升。定量证明 Hg²⁺结合后电子转移仅局限于茈母核，局域激发成为唯一跃迁通道，轨道重叠增强辐射跃迁概率，实现荧光开启。

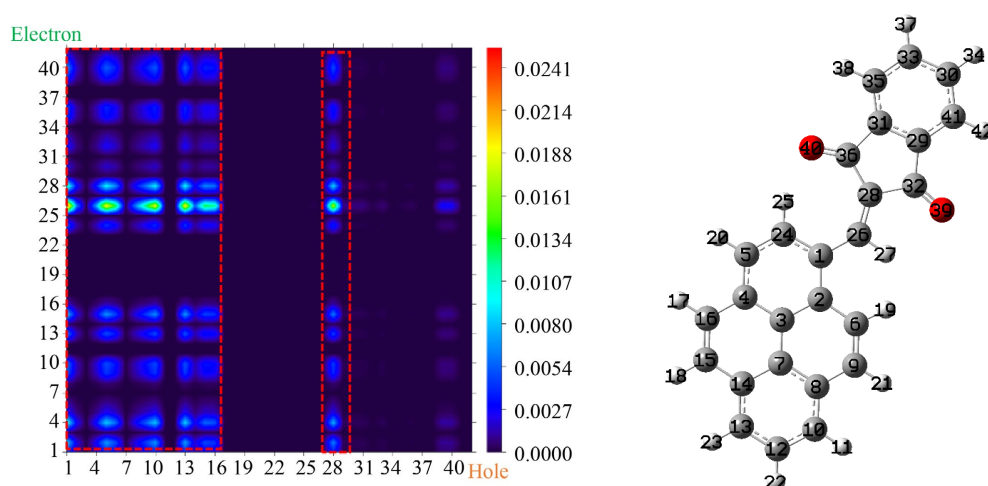


Figure 7. Charge transfer heat map and molecular structure diagram of fluorescent probe PID

图 7. 荧光探针 PID 的电荷转移热图及其结构

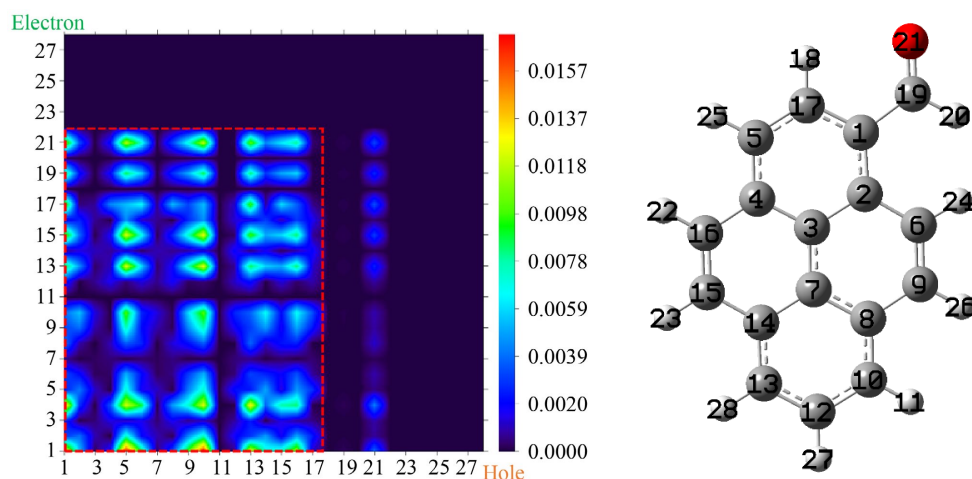


Figure 8. Charge transfer heat map and molecular structure diagram of the reaction product of fluorescent probe PID with Hg²⁺

图 8. 荧光探针 PID 与 Hg²⁺反应产物的电荷转移热图及结构

3.5. 激发能与振子强度量化验证荧光开关特性

TD-DFT 计算得到 S₀→S₁ 跃迁关键光物理参数，振子强度直接表征辐射跃迁概率，数值越高荧光发

射越强。将 B3LYP、CAM-B3LYP 两套泛函计算的最大吸收波长、发射波长、振子强度与参考文献[11]实测光谱数据定量对比。

游离 PID 探针:

B3LYP: $\lambda_{\text{abs}} = 362 \text{ nm}$, $f = 0.0008$; CAM-B3LYP: $\lambda_{\text{abs}} = 355 \text{ nm}$, $f = 0.0004$; 两套泛函均得到极低振子强度, ICT 长程电荷转移导致辐射跃迁概率极小, 激发态能量以热能形式非辐射耗散, 探针无荧光:

PID-Hg²⁺加成复合物:

B3LYP: $\lambda_{\text{em}} = 468 \text{ nm}$, $f = 0.8014$; CAM-B3LYP: $\lambda_{\text{em}} = 459 \text{ nm}$, $f = 0.8327$; 激发模式转为 LE 局域激发后, 振子强度提升三个数量级, 辐射跃迁概率显著提高, 激发态电子以光子形式释放能量, 发射特征蓝色荧光:

与文献[11]实验值对比: 实验测得探针响应 Hg²⁺后发射峰 452 nm, 两套泛函理论发射波长与实验偏差 < 16 nm, 误差来源分为三点: ① PCM 隐式溶剂模型未考虑水溶液中水分子氢键、溶剂化动态效应; ② 理论为单分子静态最优构型, 实验体系存在分子聚集、动态构象分布; ③ 泛函交换相关势固有系统误差, CAM-B3LYP 长程校正后偏差显著缩小, 证明长程校正泛函更适配本 ICT 体系。

振子强度与波长定量对比从量化角度证实 ICT→LE 激发模式转换是 PID 探针实现 Hg²⁺荧光开启的核心光物理机制, 长程校正泛函 CAM-B3LYP 计算结果与实验吻合度更高, 进一步支撑本文机理结论的真实性。

4. 结论

本研究通过 DFT/TD-DFT 多维度电子结构计算, 系统揭示 PID 荧光探针特异性识别 Hg²⁺的微观机制, 核心结论如下: 1) ALIE 平均局部离子化能计算明确, PID 分子 C=C 双键区域电子电离能最低、电子活性最强, 是 Hg²⁺发生特异性配位加成的反应位点, 解释探针高选择性识别 Hg²⁺的分子基础; 2) 未结合 Hg²⁺的游离 PID 探针, HOMO 定域茈萘单元、LUMO 定域萘醌单元, 轨道空间分离诱发分子内电荷转移(ICT), 长距离跨单元电子转移加剧非辐射弛豫, S₀→S₁ 振子强度极低, 探针处于无荧光“关”状态; 3) Hg²⁺与 C=C 双键特异性结合后重构分子共轭骨架, PID-Hg²⁺产物 HOMO、LUMO 均局域于茈萘荧光母核, 激发模式由 ICT 转变为局域激发(LE), 电子仅在荧光团内部重排, 轨道重叠度显著提升, 振子强度大幅升高, 非辐射损耗被抑制, 体系发射明亮蓝色荧光, 实现荧光“开”信号; 4) DOS 态密度、电子密度差分、原子电荷转移热图、振子强度多组计算结果相互印证, 完整构建“反应位点-轨道分布-电子转移-光物理性能”的构效关系链条。

本研究阐明的 ICT/LE 可控转换机制, 为 Hg²⁺响应型荧光探针分子设计提供清晰改造思路: 可通过调控分子 C=C 双键位点电子云密度提升 Hg²⁺响应灵敏度, 或调控荧光团与吸电子片段连接方式, 精准调控 ICT 与 LE 效应, 开发高信噪比、低检出限的重金属荧光探针; 同时本文采用的 ALIE 定位反应位点 + 多维度电子结构计算的分析框架, 可直接迁移至其他金属离子、生物小分子荧光探针的识别机制理论研究。

基金项目

辽宁省大学生创新训练项目(X202410160057)。

参考文献

- [1] Pu, C.M., Li, S.Y., Cao, X.L., Ren, Y., Bai, R., You, F., *et al.* (2025) A Novel Dual-Function Peptide-Based Fluorescent Probe with Large Stokes Shift for the Simultaneous Detection and Quantification of Ag(I) and Hg(II) Ions. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **336**, Article ID: 126032.

- <https://doi.org/10.1016/j.saa.2025.126032>
- [2] Ma, Y.Q. and Cheng, X.J. (2024) Cellulose-Based Fluorescent Film Probes for the Recognition and Removal of $\text{Hg}^{2+}/\text{Hg}^+$ Ions. *International Journal of Biological Macromolecules*, **282**, Article ID: 136948. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2024.136948>
 - [3] He, Y., Chen, Y.F., Li, C.C., Wang, M.H., Li, L., Chen, G., *et al.* (2024) A Novel 1,3,5-Triazine-Based Fluorescent Probe with Large Stokes Shift for the Detection of $\text{Hg}(\text{II})$ and Its Application in Cell, Zebrafish and Tobacco Imaging. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, **447**, Article ID: 115171. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2023.115171>
 - [4] He, J., Huang, Y.X., Xu, J.L., Zeng, F. and Cheng, X. (2024) Fluorescent Dendritic Fibrous Nanosilica@chitosan Porous Composite Microbeads: Selective and Sensitive Probes and Removal Adsorbents for $\text{Hg}^{2+}/\text{Hg}^+$ Ions. *Separation and Purification Technology*, **343**, Article ID: 127166. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.127166>
 - [5] Liu, K.Q., Marin, L. and Cheng, X.J. (2023) Water-Soluble β -Cyclodextrin Based Turn-On Amplifying Fluorescent Probes for Sensitive and Selective Detection of $\text{Hg}^{2+}/\text{Hg}^+$ Ions. *Sensors and Actuators B: Chemical*, **377**, Article ID: 133060. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2022.133060>
 - [6] Kumar, A. (2023) Recent Development in Fluorescent Probes for the Detection of Hg^{2+} Ions. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, **54**, 3269-3312.
 - [7] Li, C.W., Duan, L. and Cheng, X.J. (2022) Facile Method to Synthesize Fluorescent Chitosan Hydrogels for Selective Detection and Adsorption of $\text{Hg}^{2+}/\text{Hg}^+$. *Carbohydrate Polymers*, **288**, Article ID: 119417. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2022.119417>
 - [8] Jin, X.C., Sun, T., Wu, Z.Y., Wang, D., Hu, F., Xu, J., *et al.* (2022) Label-Free Hairpin Probe for the Rapid Detection of $\text{Hg}(\text{II})$ Based on T-Hg (II)-T. *Analytica Chimica Acta*, **1221**, Article ID: 340113. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2022.340113>
 - [9] Liu, S.D., Feng, D., Zhang, L.W., Song, H., Wang, Y., Zhang, X., *et al.* (2020) A Reaction-Based Ratiometric Fluorescent Probe for Mercury Ion Detection in Aqueous Solution. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, **243**, Article ID: 118817. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2020.118817>
 - [10] Yu, Y.M., Duan, Q.X., Zhang, X., Li, X., Wang, K., Liu, C., *et al.* (2019) A Highly Selective and Ultrasensitive Fluorescent Probe for Monitoring Hg^{2+} and Its Applications in Real Water Samples. *Analytical Sciences*, **35**, 1251-1254. <https://doi.org/10.2116/analsci.19p232>
 - [11] Liang, Q.X., Zhou, W., Wu, A.B., Shu, W. and Yu, W. (2023) A Novel Pyrene-Based “Off-On” Fluorescent Probe with High Selectivity and Sensitivity for Hg^{2+} . *Journal of the Chinese Chemical Society*, **70**, 1937-1943. <https://doi.org/10.1002/jccs.202300231>
 - [12] Yanai, T., Tew, D.P. and Handy, N.C. (2004) A New Hybrid Exchange-Correlation Functional Using the Coulomb-Attenuating Method (CAM-B3LYP). *Chemical Physics Letters*, **393**, 51-57. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.06.011>
 - [13] 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>