

Wpływ składu i architektury chemicznej nanorozmiarowych luminoforów typu rdzeń-płaszcz, domieszkowanych jonami lantanowców Er^{3+} oraz Yb^{3+} , na efektywność rezonansowego niepromienistego transferu energii FRET do organicznego akceptora energii

Proces rezonansowego transferu energii (ang. Resonance Energy Transfer, RET) znany jest od około 70 lat i obecnie jest szeroko stosowany w biologii i medycynie, do takich zastosowań jak wizualizacja procesów biologicznych, przykładowo za pomocą otrzymywania obrazów próbki z czasami życia (ang. Fluorescence Lifetime Imaging, FLIM), oraz w testach biologicznych. Försterowski rezonansowy transfer energii (FRET lub RET) pomiędzy dwiema cząsteczkami - donorem (D) i akceptorem (A) - jest mechanizmem standardowo stosowanym do badania ich oddziaływania. Zwłaszcza jego zależności wynikających z architektury układu i możliwości wizualizacji w czasie rzeczywistym przebiegu procesów biologicznych. Mechanizm ten wymaga spełnienia rygorystycznych warunków, takich jak niewielka (w zakresie 1 - 10 nm) odległość pomiędzy D i A oraz spektralne nakładanie się ich pasm (emisji D i absorpcji A). Najczęściej stosowanymi fluoroforami w mechanizmie RET są barwniki organiczne (jako D i A), jednak ulegają one zjawisku fotowysielania i silnej podatności na lokalne środowisko chemiczne. Inne optycznie aktywne materiały, takie jak jony lantanowców (Ln^{3+}) w matrycach nanokrystalicznych (ang. upconverting nanoparticles - UCNPs), które wykazują emisję anty-stokesowska, eliminują niepożądane cechy występujące w przypadku barwników organicznych. Dystrybucja odległości i stężenie jonów Ln^{3+} w architekturze typu rdzeń-płaszcz nanokryształów bezpośrednio wpływa na odległości pomiędzy jonami i barwnikami organicznymi.

Nanokryształy domieszkowane jonami Ln^{3+} mogą mieć duże znaczenie jako materiał optycznie aktywny do dopracowania materiałów, które mogą służyć jako znaczniki fluorescencyjne dla RET. Teoretyczne i eksperymentalne wskazanie najlepszego rozkładu pozwala na poprawę czułości pomiarów i wyznaczenie wydajności transferu energii na podstawie widm emisji i czasów życia luminescencji. W celu wskazania architektury nanokryształów o najwyższej wartości RET (uwzględniając dystrybucję oraz koncentrację) dla najlepszych potencjalnych donorów do eksperymentów RET planowane jest eksperymentalne sprawdzenie właściwości spektroskopowych tylko dla najlepszych donorów.

Procesy transferów energii, które mogą zachodzić w jonach lantanowców, mogą zostać opisane równaniami różniczkowymi, ale dają tylko uśrednione wyniki. Natomiast analiza transferów energii pomiędzy jonami metodą Monte Carlo (MC), umożliwi opis procesów zachodzących pomiędzy optycznie aktywnymi jonami w oparciu o odległości pomiędzy jonami. MC umożliwi wskazanie potencjalnie najlepszej architektury UCNPs z najwyższą wartością wydajności rezonansowego transferu energii w znacznikach fluorescencyjnych, co ma ogromny potencjał w rozwoju możliwości nowych materiałów do prowadzenia badań z wykorzystaniem RET w wizualizacji procesów biologicznych. Poprzez ilościowe opisanie transferów i migracji energii, poprzez obliczenia MC, pozwolą na uzyskanie bardziej kompleksowego spojrzenia na wpływ rozkładu odległości na wydajność RET.