

หัวข้อวิทยานิพนธ์

การศึกษาเชิงทฤษฎีของปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอนที่
สถานะกระตุ้นของ 7-เอซาอินโดลกับกลุ่มน้ำ แอมโมเนีย
และน้ำ-แอมโมเนีย

ผู้เขียน

นางสาวกนิษฐา เกิดผล

ปริญญา

วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิต (เคมี)

อาจารย์ที่ปรึกษา

ดร. นาวี กังวาลย์

บทคัดย่อ

ปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอนระหว่างโมเลกุล ที่สถานะกระตุ้นของ 7-เอซาอินโดลกับกลุ่มน้ำ ($7AI(W)_n$ เมื่อ $n=1-5$), แอมโมเนีย ($7AI(A)_n$ เมื่อ $n=1-3$) และน้ำ-แอมโมเนีย ($7AI(AW)_n$ เมื่อ $n=2-3$) ได้ถูกศึกษาโดยใช้การจำลองทางพลวัตควอนตัม โครงสร้างที่สถานะพื้นได้จากการคำนวณทางเคมีคอมพิวเตอร์ด้วยวิธี RI-ADC(2) ร่วมกับ SVP-SV(P) ในสถานะก๊าซ จากนั้นนำโครงสร้างที่ได้มาทำการจำลองทางพลวัตที่สถานะกระตุ้นลำดับที่หนึ่ง เพื่อศึกษากลไกการเกิดปฏิกิริยา, ระยะเวลาที่เกิดขึ้นของการถ่ายโอนโปรตอนและผลกระทบของสารละลายที่แตกต่างกันล้อมรอบโมเลกุล 7AI จากผลการศึกษาพบว่าปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอนเกิดขึ้นผ่านพันธะไฮโดรเจนระหว่างโมเลกุล 7AI กับโมเลกุลสารละลาย สำหรับ $7AI(W)_n$ เมื่อ $n=1-5$ พบว่าปฏิกิริยาส่วนใหญ่เกิดผ่านโมเลกุลสารละลายชั้นแรก และเมื่อจำนวนโมเลกุลสารละลายเพิ่มขึ้นจะช่วยให้ค่าพลังงานก่อกัมมันต์ต่ำลง ส่งผลให้ร้อยละของโอกาสในการเกิดปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอนเพิ่มขึ้น ในส่วนของ $(7AI(A)_n$ เมื่อ $n=1-3$) พบว่า $7AI(A)$ เกิดปฏิกิริยาถ่ายโอนโปรตอนได้ดีกว่า $7AI(A)_{2-3}$ และนอกจากนี้ในการศึกษา $7AI(AW)_n$ เมื่อ $n=2-3$ พบว่าเมื่อแทนที่น้ำด้วยแอมโมเนียที่ตำแหน่งโมเลกุลสารละลายใกล้ N-H ของ 7AI จะทำให้เกิดปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอนง่ายขึ้น เพราะค่าพลังงานก่อกัมมันต์ต่ำลง

Thesis Title Theoretical Studies of Excited-state Proton Transfer Reactions of 7-Azaindole with Water, Ammonia and Water-Ammonia Clusters

Author Miss Khanittha Kerdpol

Degree Master of Science (Chemistry)

Advisor Dr. Nawe Kungwan

ABSTRACT

Excited-state intermolecular proton transfer (ESIPT) reactions of 7-azaindole with water ($7AI(W)_n$ when $n=1-5$), ammonia ($7AI(A)_n$ when $n=1-3$) and mixed water-ammonia ($7AI(AW)_n$ when $n=2-3$) clusters were investigated by quantum dynamics simulation. The ground-state structures were optimized using RI-ADC(2)/SVP-SV(P) in the gas phase. Dynamic simulations on the first-excited state were employed to investigate reaction mechanisms, time evolution of proton transfer processes and the different solvent effects around 7AI. In this study, we found that ESIPT occurs via intermolecular hydrogen-bonded network. For $7AI(W)_{n=1-5}$, PT took place preferentially through the first shell of solvent and an increasing number of water molecules tends to reduce the free energy barrier. For $7AI(A)_{n=1-3}$, ESIPT reactions occur in $7AI(A)$ better than $7AI(A)_{2-3}$ clusters. Moreover, for $7AI(AW)_{n=2-3}$, $7AI(AW)$ clusters with ammonia placed near N-H of 7AI has the highest probability among other isomers.