

ชื่อเรื่องวิทยานิพนธ์

การศึกษาเชิงทฤษฎีของปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอน
ที่สถานะกระตุ้นของ 7-เอซาอิน โดลกับกลุ่มเมทานอล
และอนุพันธ์ 2-(อิมิโนเมทิล)ฟีนอล

ผู้เขียน

นายธวัชวรรณ แดงเงิน

ปริญญา

วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิต (เคมี)

คณะกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์

ดร. นาวิ กังวาลย์ อาจารย์ที่ปรึกษาหลัก
ผศ. ดร. วินิตา บุญ โยคม อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

บทคัดย่อ

ปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอนระหว่างโมเลกุลที่สถานะกระตุ้น (ESIInterPT) ของ 7-เอซาอิน โดลกับกลุ่มเมทานอล ($7\text{-AI}(\text{MeOH})_n$ เมื่อ $n=1-3$) และปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอนภายในโมเลกุลที่สถานะกระตุ้น (ESIIntraPT) ของอนุพันธ์ 2-(อิมิโนเมทิล)ฟีนอล ได้ถูกศึกษาโดยใช้การจำลองทางพลวัตควอนตัม โครงสร้างที่สถานะพื้นที่มีพลังงานต่ำที่สุดได้ถูกศึกษาและนำเสนอ การจำลองพลวัตอณู-เดอะ-ไฟลบนสถานะกระตุ้นลำดับแรกถูกใช้เพื่อศึกษากลไกปฏิกิริยาและวิวัฒนาการเวลาของการถ่ายโอนโปรตรอน จากผลการศึกษาปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอนที่ไม่มีการซ้อนทับกันระหว่างสถานะ $S_{\pi\pi^*}$ และ $S_{\pi\sigma^*}$ เกิดขึ้นตามโครงข่ายพันธะไฮโดรเจน หนึ่งเมทานอล 2 โมเลกุลช่วยให้ปฏิกิริยา ESIInterPT เกิดได้ดีสำหรับระบบ $7\text{-AI}(\text{MeOH})_n$ ยิ่งไปกว่านั้นการเปลี่ยนแปลงความระะระกะหรือการเพิ่มความเป็นกรดของอนุพันธ์ 2-(อิมิโนเมทิล)ฟีนอลแสดงการลดลงของพันธะไฮโดรเจนภายในโมเลกุล ส่งผลให้เกิดปฏิกิริยา ESIIntraPT ได้รวดเร็วมาก

Thesis Title	Theoretical Studies of the Excited-State Proton Transfer Reactions in 7-Azaindole with Methanol Clusters and 2-(Iminomethyl)phenol Derivatives	
Author	Mr. Rathawat Daengngern	
Degree	Master of Science (Chemistry)	
Thesis Advisory Committee	Dr. Nawee Kungwan	Advisor
	Asst. Prof. Dr. Winita Punyodom	Co-advisor

ABSTRACT

The excited-state intermolecular proton transfer (ESInterPT) reactions of 7-azaindole with methanol clusters ($7AI(\text{MeOH})_n$ when $n=1-3$) and the excited-state intramolecular proton transfer (ESIntraPT) reactions of 2-(iminomethyl)phenol derivatives were performed using quantum dynamics simulations. Ground-state structures with the lowest energy were also investigated and presented. On-the-fly dynamics simulations on the first-excited state were employed to investigate reaction mechanisms and time evolutions of proton transfer. From results, the excited-state proton transfer reactions with no crossing between $S_{\pi\pi^*}$ and $S_{\pi\sigma^*}$ states take place along hydrogen-bonded network. In addition, two methanol molecules assist the ESInterPT reaction well for $7AI(\text{MeOH})_n$ system. Moreover, steric modification or increased acidity of 2-(iminomethyl)phenol derivatives shows shortening of the intramolecular hydrogen bond resulting in the ultrafast ESIntraPT reactions.