

## 1. Abstract

### In Thai:

ไดนามิกส์ของการถ่ายโอนโปรตอนระหว่างโมเลกุลในสถานะกระตุ้นของ 1-เฮกโซโร[3,2-*h*]ควิโนลีน (พีคิว) กับโมเลกุลของน้ำและเมทานอลถูกศึกษาโดยวิธีจำลองทางเคมีควอนตัม พลังงานต่ำสุดของโครงสร้างในสถานะพื้นได้ถูกทำนายก่อน จากนั้นการจำลองทางเมโมกุลไดนามิกส์ในสภาวะกระตุ้นที่หนึ่งถูกใช้ในการหากลไกปฏิกิริยาและเวลาในการเกิดการถ่ายโอนโปรตอน ผลจากการจำลองทางไดนามิกส์ได้พบว่าปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอนของทั้งระบบที่ทำการศึกษาเป็นการถ่ายโอนโปรตอนแบบหลายโปรตอนในเวลาใกล้เคียงกันโดยการถ่ายโอนโปรตอนนั้นถูกทำให้เร็วขึ้นด้วยโมเลกุลของสารละลายซึ่งคือน้ำและเมทานอลที่เข้ามาสร้างเครือข่ายพันธะไฮโดรเจน โดยเฉพาะปฏิกิริยาการถ่ายโอนโปรตอนแบบสองตัวในเวลาเดียวกันของสารพีคิวกับเมทานอลให้ความน่าจะเป็นในการถ่ายโอนโปรตอนสูงสุด ทั้งนี้คุณลักษณะของการถ่ายโอนโปรตอนถูกยืนยันด้วยพลังงานที่ไม่ซ้อนทับกันระหว่างชั้นพลังงาน ไพ-ไพสตาร์ และ ไพ-ซิกมาสตาร์

### In English:

The dynamics of ultrafast excited-state multiple intermolecular proton transfer (PT) reactions in complexes of 1*H*-pyrrolo[3,2-*h*]quinoline with water and methanol (PQ(H<sub>2</sub>O)<sub>*n*</sub> and PQ(MeOH)<sub>*n*</sub>, where *n* = 1, 2) is modeled using quantum-chemical simulations. The minimum energy ground-state structures of the complexes are determined. Molecular dynamics simulations in the first excited state are employed to determine reaction mechanisms and the time evolution of the PT processes. Excited-state dynamics results for all complexes reveal synchronous excited-state multiple proton transfer (ESmultiPT) via solvent-assisted mechanisms along an intermolecular hydrogen-bonded network. In particular, excited-state double proton transfer (ESDPT) is the most effective, occurring with the highest probability in the PQ(MeOH) cluster. The PT character of the reactions is suggested by nonexistence of crossings between  $\pi\pi^*$  and  $\pi\sigma^*$  states.