

Theoretical Insights into Excited-State Intermolecular Proton Transfers of 2,7-Diazaindole in Water Using a Microsolvation Approach

Warinthon Chansen and Nawee Kungwan*

J. Phys. Chem. A **2021**.

報告者：陳開妍 報告日期：Apr. 20, 2023

具有質子予體及受體的雙官能基分子，可能會發生分子內或分子間的激發態質子轉移 (Excited-state proton transfer, ESPT)。這種激發態質子轉移已被證實是重要的化學及生物反應^{1,2}。其中，2,7-雙氮雜吡啶 (2,7-diazaindole, 2,7-DAI) 分子具有質子受、予體，能夠檢測蛋白質周遭的水環境，是一種具有潛力的光學探針³。為了確認其在水溶液環境下的光學性質及反應機制，研究者使用微水合模型 (microsolvation model) 與隱含溶劑模型 (implicit solvent model) 計算其反應位能曲面。同時，他們也使用即時動力學模擬 (on-the-fly dynamic simulations) 了解其反應機制。

研究結果顯示，在 2,7-DAI 分子內、外水層分別有兩個及三個水分子時，反應能障最低，且反應途徑最放熱。與以往研究認定其為較慢的 ESPT 不同，在上述情況下，2,7-DAI 分子會快速進行 ESPT，且反應為逐步的三質子轉移，更貼近實驗數據。作者認為，這種研究方法具有成本效益，可用來研究水溶液環境下 ESPT 現象。

參考資料：

1. Lim, H.; Park, S.-Y.; Jang, D.-J. Excited-State Double Proton Transfer Dynamics of Model DNA Base Pairs: 7-Hydroxyquinoline Dimers. *J. Phys. Chem. A* **2010**.
2. Sengupta, B.; Reilly, S. M.; Davis, D. E., Jr; Harris, K.; Wadkins, R. M.; Ward, D.; Gholar, D.; Hampton, C. Excited State Proton Transfer of Natural Flavonoids and Their Chromophores in Duplex and Tetraplex DNAs. *J. Phys. Chem. B* **2015**.
3. Shen, J.-Y.; Chao, W.-C.; Liu, C.; Pan, H.-A.; Yang, H.-C.; Chen, C.-L.; Lan, Y.-K.; Lin, L.-J.; Wang, J.-S.; Lu, J.-F.; Chun-Wei Chou, S.; Tang, K.-C.; Chou, P.-T. Probing Water Micro-Solvation in Proteins by Water Catalysed Proton-Transfer Tautomerism. *Nat. Commun.* **2013**.