

บทคัดย่อ

โครงการวิจัยนี้ ผู้วิจัยได้นำเทคนิคการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลขั้นสูงที่ผสมผสานกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุล (QM/MM) ทั้งในส่วนที่เป็นเทคนิค QM/MM แบบดั้งเดิม และเทคนิค QMCF (ซึ่งเป็นเทคนิค QM/MM ที่ได้ทำการพัฒนาขึ้นใหม่ เพื่อใช้สำหรับการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลระบบไอออนในสารละลายโดยไม่จำเป็นต้องสร้างฟังก์ชันศักย์ระหว่างไอออนกับน้ำ) มาประยุกต์เพื่อศึกษาสมบัติเชิงโครงสร้างและเชิงพลวัตของไอออนที่ถูกซอลเวตอยู่ในสารละลายน้ำ ผลการศึกษาที่ได้ชี้ให้เห็นความสำคัญและความจำเป็นของการคำนวณบนพื้นฐานกลศาสตร์ควอนตัม สำหรับการอธิบายลักษณะโครงสร้างและพลวัตของชั้นซอลเวชันของไอออนชนิดต่างๆ โดยข้อมูลที่ได้จากการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลโดยเทคนิค QM/MM และ QMCF นี้ มีความถูกต้องและน่าเชื่อถือมากกว่าข้อมูลที่ได้จากการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลที่ดำเนินการโดยใช้กลศาสตร์โมเลกุลเพียงอย่างเดียว นอกจากนี้ ข้อมูลที่ได้จากการจำลองนี้ สามารถนำมาใช้สำหรับการตีความหมายข้อมูลทางสเปกโตรสโกปีได้ด้วย โดยเฉพาะในส่วนของข้อมูลการทดลอง X-ray absorption spectroscopy (XAS) ซึ่งถือเป็นการบูรณาการเทคนิคการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลขั้นสูงร่วมกับเทคนิคการทดลอง XAS ที่มีประสิทธิภาพสำหรับการศึกษาระบบทางเคมีดังกล่าว

Abstract

A series of molecular dynamics (MD) simulations based on combined quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) and on quantum mechanical charge field (QMCF) approaches have been performed to investigate solvation structure and dynamics of ions solvated in aqueous electrolyte solution. The results obtained by the QM/MM and QMCF MD simulations clearly demonstrate the importance of QM treatment in obtaining more reliable structural arrangements as well as correct dynamics properties of the solvated ions, *i.e.*, compared to the results derived by means of classical MM simulations. In conjunction with the X-ray absorption spectroscopy (XAS), the QM/MM and QMCF techniques can be seen as the elegant tools in developing refined models for the interpretation of the spectroscopic data.