

ABSTRACT

Project Code: PDF 24/2541

Project Title: A Study of Structure and Dynamics of the Infinitely Diluted Solutions of Alkali and Alkaline-earth Metal Ions in Ammonia by Means of Molecular Modeling and Simulations

Investigators: Dr. Teerakiat Kerdcharoen (Principal Investigator)
Assoc. Prof. Dr. Supot Hannongbua (Consultant)

E-mail: sctkc@mahidol.ac.th

Project Period: 1 July 2541 – 30 June 2543

Objectives:

The objectives of this project are to investigate structure and dynamics of diluted ammonia solutions of alkali and alkaline-earth ions and to observe tendency of properties upon change of the ions from similar row or period of the periodic table. In addition, the importance of many-body effects in the potential energy surface will be focused. New simulation methodology and development of software are also another targets.

Methodology:

The structure and dynamics of the solutions were obtained by statistical analysis of the results extracted from molecular dynamics simulations. The potential energy surface used in the simulations can be modeled by quantum mechanics method.

Results:

It is found that many-body effects are very high in the ionic solutions. Inclusion of such effects into the simulations are critically important to correctly model the structure and dynamics. To achieve high quality results, combined quantum mechanics and molecular mechanics (QM/MM) simulation has been purposed. These findings are accepted for publication in international journals.

Conclusion:

Many-body effects are necessary for simulations of ion solvation and such effects can be efficiently modeled by combined quantum mechanics and molecular mechanics (QM/MM) method.

Suggestions / Further Implication:

Knowledge and technology obtained from this project will be extended to study more complex problems in biological sciences. One potential application of this project is metalloprotein where metal ions are embeded in the protein 3-D structure to exhibit protein's functionality.

Keywords: computer simulation, ion solvation, alkali, alkaline-earth

ABSTRACT (ภาษาไทย)

หมายเลขโครงการ: PDF 24/2541

ชื่อโครงการ: การศึกษาสมบัติเชิงโครงสร้างและเชิงพลวัตของสารละลายเจือจางอนันต์ของ ไอออนโลหะอัลคาไลน์และ อัลคาไลน์เอิร์ธ ในแอมโมเนีย ด้วยการออกแบบและ จำลองเชิงโมเลกุล

ผู้วิจัย: ดร. ชีรเกียรติ์ เกิดเจริญ (หัวหน้าโครงการ)
รศ. ดร. สุพจน์ หารหนองบัว (ที่ปรึกษาโครงการ)

E-mail: sctkc@mahidol.ac.th

ระยะเวลา: 1 กรกฎาคม 2541 – 30 มิถุนายน 2543

วัตถุประสงค์:

เพื่อศึกษาโครงสร้างและพลวัตของสารละลายของไอออนโลหะอัลคาไลน์ และ อัลคาไลน์เอิร์ธ ใน แอมโมเนีย และตรวจสอบแนวโน้มการเปลี่ยนแปลงของสมบัติดังกล่าวของธาตุในคาบหรือหมู่เดียวกัน ของตารางธาตุ นอกจากนี้แล้วยังจะศึกษาเน้นหนักไปที่ความสำคัญของผลจากหลายอนุภาคในการ สร้างพื้นผิวพลังงานศักย์อีกด้วย เป้าหมายอีกอย่างหนึ่งก็คือ การพัฒนาระเบียบวิธีการจำลองด้วย คอมพิวเตอร์แบบใหม่ ๆ

ขอบเขตของการวิจัย:

ใช้วิธีการวิเคราะห์ทางสถิติกับข้อมูลที่ได้มาจากการจำลองพลศาสตร์เชิงโมเลกุลเพื่อให้ได้คำตอบเกี่ยวกับ โครงสร้างและพลวัตของสารละลายดังกล่าว โดยจะใช้ระเบียบวิธีทางกลศาสตร์ควอนตัมเพื่อสร้างพื้น ผิวพลังงานศักย์ที่ในการจำลองพลศาสตร์เชิงโมเลกุล

คำตอบ ผลที่ได้:

ได้พบว่าผลจากหลายอนุภาคนั้นมีค่าที่สูงมากสำหรับระบบที่มีไอออนในสารละลาย การรวมผลดังกล่าว เข้าไปในการจำลองคอมพิวเตอร์นั้นมีความสำคัญมาก เพื่อให้ได้มาซึ่งโครงสร้างและพลวัตที่ถูกต้องของ ระบบนี้ และเพื่อที่จะอธิบายผลจากหลายอนุภาคด้วยคุณภาพที่สูงพอ จึงได้เสนอวิธีการผสมกลศาสตร์ ควอนตัมและกลศาสตร์เชิงโมเลกุล โดยการค้นพบดังกล่าวได้รับการยอมรับให้ตีพิมพ์ในวารสารนานาชาติ

สรุปสาระสำคัญ:

ผลจากหลายอนุภาคเป็นสิ่งจำเป็นอย่างยิ่งที่จะต้องรวมเข้าไปด้วยทุกครั้งที่ศึกษาระบบของไอออนใน สารละลาย และ วิธีการที่มีประสิทธิภาพสูงในการอธิบายผลดังกล่าวคือวิธีผสมผสมกลศาสตร์ควอนตัม และ กลศาสตร์เชิงโมเลกุล

สังเคราะห์ผล ข้อเสนอแนะ

องค์ความรู้และเทคนิคที่ได้จากการศึกษาตามโครงการนี้สามารถที่จะขยายไปสู่ระบบที่มีความซับซ้อนมากขึ้น อย่างเช่นระบบของสิ่งมีชีวิต งานประยุกต์อย่างหนึ่งที่มีความน่าสนใจและสามารถทำได้คือ การศึกษาเมทัลโลโปรตีน ซึ่งเป็นโปรตีนที่มีโลหะเป็นองค์ประกอบทำให้สามารถทำหน้าที่ได้อย่างเฉพาะเจาะจง