สุภาพร ไชยพงษ์ : การศึกษาสะพานเกลือในสารละลายน้ำโดยวิธีทางทฤษฎี (A THEORETICAL STUDY ON SALT-BRIDGE IN AQUEOUS SOLUTION) อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร.กฤษณะ สาคริก, 102 หน้า. ISBN 974-533-423-5

การศึกษาโครงสร้างและเสถียรภาพของสะพานเกลือ (salt-bridge) ในสารละลายน้ำ ดำเนินการโดยใช้สารประกอบเชิงซ้อน (complex) ที่เกิดจากการรวมตัวของไอออนกัวนิดีเนียม (guanidinium ion; Gdm^+) และไอออนฟอร์เมท (formate ion; FmO^-) เป็นแบบจำลอง โดยเริ่มจากการสร้างและทดสอบศักย์ระหว่างโมเลกุลเทสท์พาร์ทิเคิล (Test-particle model; T-model) เพื่อใช้อธิบายอันตรกิริยาในสารประกอบเชิงซ้อน Gdm^+-H_2O FmO^--H_2O และ Gdm^+-FmO^- จากนั้นประยุกต์ศักย์ระหว่างโมเลกุลที่คำนวณได้กับการจำลองโมเลกุลพลวัต (molecular dynamics (MD) simulations) ในสารละลายน้ำที่อุณหภูมิ 298 K สมบัติของสารละลายที่สนใจได้แก่โครงสร้างสามมิติและการกระจายพลังงานที่โครงข่ายพันธะไฮโดรเจน (H-bond networks) ของน้ำในชั้นไฮเดรชันที่ 1 (the first hydration shell) ที่อยู่ล้อมรอบไอออน Gdm^+ FmO^- และสารประกอบเชิงซ้อน Gdm^+-FmO^- ในงานวิจัยชิ้นนี้มีการสร้างแผนภาพการแจกแจงความน่าจะเป็น (probability distribution (PD) map) ในเชิงโครงสร้างและพลังงานของโครงข่ายพันธะไฮโดรเจน ซึ่งใช้อธิบายและวิเคราะห์เสถียรภาพตลอดจนพฤติกรรมพลวัต (dynamic behavior) ของโมเลกุลน้ำในชั้นไฮเดรชันที่ 1 ที่ล้อมรอบตัวถูกละลาย (solute) ผลการศึกษาพบว่าโมเลกุลน้ำในชั้นไฮเดรชันที่ 1 สร้างโครงข่ายพันธะไฮโดรเจนล้อมรอบสารประกอบเชิงซ้อน Gdm^+-FmO^- ชนิดชิดกัน (close-contact) เสริมให้เกิดเสถียรภาพในการรวมตัวเป็นคู่ไอออน (ion-pair) เพิ่มขึ้น ในขณะที่โครงข่ายพันธะไฮโดรเจนของน้ำหากแทรกอยู่ระหว่างไอออนของสารประกอบเชิงซ้อน Gdm^+-FmO^- ชนิดแยกโดยตัวทำละลาย (solvent-separated) จะทำให้เสถียรภาพการรวมตัวเป็นคู่ไอออนลดลงทำให้ไอออนเกิดการแยกตัวออกจากกันเป็นไอออนอิสระในที่สุด ผลการศึกษานี้แสดงให้เห็นด้วยว่าหากต้องการความเข้าใจอย่างลึกซึ้งเกี่ยวกับโครงสร้างและเสถียรภาพของคู่ไอออนในสารละลายน้ำ แบบจำลองที่นำมาใช้ในการคำนวณต้องพิจารณาโมเลกุลน้ำทุกตัวที่เกี่ยวข้องในระบบ (explicit water molecules) เสมอ

สาขาวิชาเคมี	ลายมือชื่อนักศึกษา สุภาพร ไชยพงษ์
ปีการศึกษา 2547	ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา

SUPAPORN CHAIYAPONGS : A THEORETICAL STUDY ON SALT-BRIDGE IN AQUEOUS SOLUTION. THESIS ADVISOR : PROF. KRITSANA SAGARIK, Ph.D. 102 PP. ISBN 974-533-423-5

GUANIDINIUM/FORMATE/SALT-BRIDGE/ION-PAIR/HYDRATION

Structures and stability of salt-bridges in aqueous solutions were investigated using a complex formed from the guanidinium (Gdm^+) and formate (FmO^-) ions as a model system. The Test-particle model (T-model) potentials to describe the interactions in the Gdm^+-H_2O, FmO^--H_2O and Gdm^+-FmO^- complexes were constructed, tested and applied in molecular dynamics (MD) simulations of the aqueous solutions at 298 K. The three-dimensional structures and energetic of the hydrogen-bond (H-bond) networks of water in the first hydration shells of the Gdm^+ and FmO^- ions, as well as the Gdm^+-FmO^- complex, were visualized and analyzed using various probability distribution (PD) maps. The structures of the average potential energy landscapes at the H-bond networks were employed to characterize the stability and dynamic behavior of water molecules in the first hydration shells of the solutes. It was observed that water molecules in the first hydration shell of the close-contact Gdm^+-FmO^- complex form associated H-bond networks, which introduce a net stabilization effect to the ion-pair, whereas those in the interstitial H-bond network destabilize and break the solvent-separated Gdm^+-FmO^- complex. The present results showed that, in order to provide complete insights into the structures and stability of ion-pairs in aqueous solutions, explicit water molecules have to be included in the model calculations.

School of Chemistry	Student's Signature	S. Chaiyapongs
Academic Year 2004	Advisor's Signature	K. Sagarik