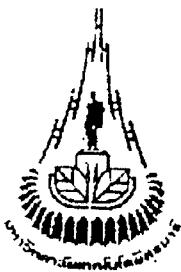


รหัสโครงการ SUT1-102-43-12-55



## รายงานการวิจัย

การศึกษาโครงสร้างไฮเดรชันของไอออนแมgnีเซียมโดยวิธีการจำลอง  
พลวัตเชิงโมเลกุลที่รวมกลศาสตร์ความต้มและกลศาสตร์โมเลกุลเข้าด้วยกัน  
**(Hydration Shell Structure of Mg<sup>2+</sup> Studied by combined Quantum  
Mechanical and Molecular Mechanical (QM/MM) Molecular  
Dynamics Simulation)**

### คณะผู้วิจัย

หัวหน้าโครงการ  
ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.อันันต์ ทองระอา  
สาขาวิชาเคมี  
สำนักวิชาวิทยาศาสตร์  
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

ได้รับทุนอุดหนุนการวิจัยจากมหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี ปีงบประมาณ 2543  
ผลงานวิจัยเป็นความรับผิดชอบของหัวหน้าโครงการวิจัยแต่เพียงผู้เดียว

พฤษภาคม 2544

## บทคัดย่อ

การจำลองพลวัตเชิงโนมแอกุลโดยเทคนิคที่รวมกลศาสตร์ความตันและกลศาสตร์โนมแอกุลเข้าด้วยกันได้ถูกดำเนินการ เพื่อศึกษาผลของส่วนสนับสนุนหลายอนุภาคที่มีต่อโครงสร้างไไซเดรชันของไอออนแมกนีเซียมซึ่งอธิบายโดยใช้การคำนวณบนพื้นฐานของกลศาสตร์ความตันในระดับแอน อะนิชิโอ ที่ใช้การประมาณแบบบอร์น ขอบเพนไชเมอร์ ในขณะที่ส่วนที่เหลือของระบบถูกอธิบายโดยอาศัยการคำนวณบนพื้นฐานของกลศาสตร์โนมแอกุล จากผลการศึกษาพบว่า โครงสร้างไไซเดรชันของไอออนแมกนีเซียมในชั้นชอลเวชันที่หนึ่งและสองประกอบด้วยหน้าจานวน 6 และ 12 โนมแอกุล ตามลำดับ ในขณะที่การจำลองพลวัตเชิงโนมแอกุลที่อยู่บนพื้นฐานของกลศาสตร์โนมแอกุลแต่เพียงอย่างเดียวทำนายว่า โครงสร้างไไซเดรชันของไอออนแมกนีเซียมประกอบด้วยหน้าในชั้นชอลเวชันที่หนึ่งจำนวน 8 โนมแอกุลและที่อยู่ในชั้นชอลเวชันที่สองจำนวน 19 โนมแอกุล ตามลำดับ ผลการศึกษาขึ้นพบว่า ผลของส่วนสนับสนุนหลายอนุภาคมีบทบาทสำคัญต่อการจัดเรียงตัวของโนมแอกุลน้ำที่อยู่ในชั้นชอลเวชันของไอออนแมกนีเซียมด้วย

## Abstract

An *ab initio* QM/MM molecular dynamics simulation has been performed to investigate the effects of non-additive contributions on the hydration shell structure of Mg<sup>2+</sup>. The active-site region, the sphere including the second hydration shell of Mg<sup>2+</sup>, was treated by Born-Oppenheimer *ab initio* quantum mechanics using LANL2DZ basis sets, while the rest is described by classical pair potentials. A hydration complex with 6 inner shell waters and 12 second shell waters was observed, in contrast to a polyhedral structure with the corresponding of 8 and 19 water molecules, as observed by classical pair potentials. It was also found that the effects of non-additive terms play an important role in the preferential orientation of water molecules inside the hydration sphere of Mg<sup>2+</sup>.