ณัฐิญา ดียิ่ง : อิทธิพลของไอออนโลหะและการเปลี่ยนแปลงโครงรูปของตัวถูกละลายต่อการไฮเดรตของกรดอะมิโนขนาดเล็ก (INFLUENCE OF METAL ION AND SOLUTE CONFORMATION CHANGE ON HYDRATION OF SMALL AMINO ACID) อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร.กฤษณะ สาคริก, 192 หน้า. ISBN 974-533-535-5

งานวิจัยเรื่องนี้เป็นงานวิจัยเชิงทฤษฎีที่ศึกษาอิทธิพลของไอออนโลหะและผลของการเปลี่ยนแปลงโครงรูปของตัวถูกละลายที่มีต่อโครงสร้าง พลังงาน และพลวัตของโมเลกุลน้ำในชั้นไฮเดรชันของกรดอะมิโน ซึ่งศึกษาโดยใช้อะลานีน (Alanine; Ala) สามโครงรูปและสารประกอบเชิงซ้อนที่เกิดจากไอออนลิเทียมกับอะลานีน (Li^+/Ala) เป็นแบบจำลอง ทั้งนี้เริ่มจากการสร้างศักย์ระหว่างโมเลกุลเทสท์พาร์ทิเคิล (Test particle model; T-model) สำหรับโมเลกุลที่เกี่ยวข้องทั้งหมด จากนั้นนำศักย์ระหว่างโมเลกุลเทสท์พาร์ทิเคิลที่คำนวณได้ไปใช้ในการจำลองโมเลกุลพลวัต (Molecular Dynamics (MD) Simulations) Ala ในน้ำ ($[Ala]_{aq}$) และ Li^+/Ala ในน้ำ ($[Li^+/Ala]_{aq}$) ที่อุณหภูมิ 298 K ผลการคำนวณโดยวิธีการจำลองโมเลกุลพลวัตแสดงว่า โครงข่ายพันธะไฮโดรเจน (H-bond networks) ของน้ำรอบๆ หมู่ฟังก์ชันของ Ala มีความแข็งแรงมากขึ้นเนื่องจากอิทธิพลของไอออนโลหะ ในขณะที่การหมุนพันธะ $N-C^{\alpha}$ จากมุม $\phi = 0$ ถึง 180 องศา ส่งผลเพียงเล็กน้อยและไม่เป็นไปในทิศทางเดียวกัน ผลการศึกษาแสดงว่าพลวัตของโมเลกุลน้ำในชั้นไฮเดรชันที่หนึ่ง (the first hydration shell) สามารถคาดคะเนหรือประมาณได้จากภูมิภาพพลังงานศักย์เฉลี่ยสุทธิ (total-average potential energy landscapes) และแผนภาพการแลกเปลี่ยนน้ำ (water exchange diagrams) ผลการศึกษาเสนอว่าสำหรับกระบวนการการแลกเปลี่ยนน้ำ โมเลกุลน้ำเคลื่อนที่ในช่องภายในชั้นไฮเดรชันช่วงเวลาหนึ่ง ก่อนที่จะออกไปจากช่องนั้น ณ ตำแหน่งใดๆ ผลที่ได้จากการศึกษาเชิงทฤษฎีได้ย้ำความจำเป็นในการนำโมเลกุลน้ำมาพิจารณาสร้างแบบจำลองในการคำนวณ

สาขาวิชาเคมี ลายมือชื่อนักศึกษา_____

ปีการศึกษา 2548 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา_____

NATTHIYA DEEYING : INFLUENCE OF METAL ION AND SOLUTE CONFORMATION CHANGE ON HYDRATION OF SMALL AMINO ACID. THESIS ADVISOR : PROF. KRITSANA SAGARIK, Ph.D. 192 PP.
ISBN 974-533-535-5

ALANINE/LITHIUM ION/CONFORMATION/HYDRATION

The influence of metal ion and solute conformation change on the structures, energetic and dynamics of water molecule in the hydration shell of amino acid was studied, using three forms of alanine (Ala) and Li^+/Ala as model molecules. The theoretical investigations were started with construction of the test-particle model (T-model) potentials for all molecules involved and followed by Molecular Dynamics (MD) simulations of $[Ala]_{aq}$ and $[Li^+/Ala]_{aq}$ at 298 K. The MD results showed that, the hydrogen bond (H-bond) networks of water at the functional groups of Ala are strengthened by the metal ion binding; whereas the rotation of the $N-C^{\alpha}$ bond from the angle $\phi = 0$ to 180 degree brings about smaller effects which cannot be generalized. It was also shown that, the dynamics of water molecule in the first hydration shell of amino acid could be estimated from the total-average potential energy landscapes and the water exchange diagrams. The MD results suggested to include an additional dynamic step in the water exchange process, in which water molecule moves inside a channel within the first hydration shell of solute, before leaving the channel at some point. The theoretical results reported in the present work iterated the necessity to include explicit water molecules in the model calculations.

School of Chemistry Student's Signature Natthiya Deeying

Academic Year 2005 Advisor's Signature K-Sagarik