ศุภชัย วันประโคน : การศึกษาโครงสร้างและพลวัตของไอออนโพแทสเซียมและไอออนแคลเซียมที่ซอลเวตอยู่ในสารละลายน้ำโดยใช้การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลที่ผสมผสานกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุลแบบดั้งเดิมและบนพื้นฐานของวิธีโอเนียม-เอกซ์เอส (STRUCTURE AND DYNAMICS OF THE HYDRATED K^+ AND Ca^{2+}: A COMPARATIVE STUDY OF THE CONVENTIONAL QM/MM MD AND QM/MM MD BASED ON ONIOM-XS METHOD) อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.อนันต์ ทองระอา, 134 หน้า.

การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลที่ผสมผสานกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุลแบบดั้งเดิม (conventional QM/MM MD) และการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลที่ผสมผสานกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุลบนพื้นฐานของวิธีโอเนียม-เอกซ์เอส (ONIOM-XS) ได้ถูกดำเนินการเพื่อศึกษาสมบัติเชิงโครงสร้างและเชิงพลวัตของไอออนโพแทสเซียม (K^+) และไอออนแคลเซียม (Ca^{2+}) ที่ซอลเวตอยู่ในสารละลายน้ำ โดยเทคนิคการจำลองดังกล่าวนี้ ส่วนของไอออนและน้ำที่อยู่ล้อมรอบไอออนจะถูกอธิบายด้วยกลศาสตร์ควอนตัมในระดับฮาร์ทรี-ฟอร์ค (HF) โดยใช้เบซิสเซตชนิด LANL2DZ และ DZV+ สำหรับไอออนและน้ำตามลำดับ ในขณะที่ส่วนที่เหลือของระบบจะถูกอธิบายโดยใช้ฟังก์ชันศักย์คู่ ผลการศึกษาพบว่า ค่าเลขไฮเดรชันเฉลี่ยของไอออนโพแทสเซียมและไอออนแคลเซียมในน้ำที่ได้จากการคำนวณโดยเทคนิค ONIOM-XS มีค่าเท่ากับ 6.3 และ 7.6 ตามลำดับ เปรียบเทียบกับผลที่ได้จากเทคนิค QM/MM แบบดั้งเดิม ซึ่งมีค่าเท่ากับ 7.0 และ 7.8 เมื่อพิจารณาร่วมกับข้อมูลด้านพลวัตซึ่งเทคนิคการจำลองทั้งสองให้ผลการศึกษาที่แตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญ แสดงให้เห็นความสามารถของเทคนิค ONIOM-XS ที่ทำนายสมบัติเชิงโครงสร้างและเชิงพลวัตของไอออนทั้งสองชนิดได้น่าเชื่อถือมากกว่าเทคนิค QM/MM แบบดั้งเดิม

สาขาวิชาเคมี ลายมือชื่อนักศึกษา_____

ปีการศึกษา 2554 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา_____

SUPACHAI WANPRAKHON : STRUCTURE AND DYNAMICS OF THE HYDRATED K^+ AND Ca^{2+}: A COMPARATIVE STUDY OF THE CONVENTIONAL QM/MM MD AND QM/MM MD BASED ON ONIOM-XS METHOD. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. ANAN TONGRAAR, Ph.D. 134 PP.

POTASSIUM ION/ CALCIUM ION/ ONIOM-XS/ QM/MM

Molecular dynamics (MD) simulations based on conventional QM/MM scheme and ONIOM-XS method were performed to investigate structural and dynamical properties of K^+ and Ca^{2+} in water. Regarding to the detailed analyses of the ONIOM-XS MD trajectories, the average hydration numbers for K^+ and Ca^{2+} were found to be 6.3 and 7.6, respectively, compared to the corresponding values of 7.0 and 7.8 derived by the conventional QM/MM simulations. Together with the significant difference found in the comparison of the dynamics details, the ONIOM-XS method clearly showed its capability in predicting more reliable detailed knowledge of these hydrated ions.

School of Chemistry Student's Signature_____

Academic Year 2011 Advisor's Signature_____