

รหัสโครงการ SUT1-102-43-12-55



รายงานการวิจัย

การศึกษาโครงสร้างไฮเดรชันของไอออนแมกนีเซียมโดยวิธีการจำลอง
พลวัตเชิงโมเลกุลที่รวมกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุลเข้าด้วยกัน
(Hydration Shell Structure of Mg^{2+} Studied by combined Quantum
Mechanical and Molecular Mechanical (QM/MM) Molecular
Dynamics Simulation)

คณะผู้วิจัย

หัวหน้าโครงการ

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.อนันต์ ทองระอา

สาขาวิชาเคมี

สำนักวิชาวิทยาศาสตร์

มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

ได้รับทุนอุดหนุนการวิจัยจากมหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี ปีงบประมาณ 2543

ผลงานวิจัยเป็นความรับผิดชอบของหัวหน้าโครงการวิจัยแต่เพียงผู้เดียว

พฤศจิกายน 2544

บทคัดย่อ

การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุล โดยเทคนิคที่รวมกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุลเข้าด้วยกัน ได้ถูกดำเนินการ เพื่อศึกษาผลของส่วนสนับสนุนหลายอนุภาคที่มีต่อโครงสร้างไฮเครชันของไอออนแมกนีเซียม ส่วนของระบบที่สนใจคือส่วนที่เป็นชั้นซอลเวชันของไอออนแมกนีเซียมซึ่งอธิบายโดยใช้การคำนวณบนพื้นฐานของกลศาสตร์ควอนตัมในระดับแอบ อินิซิโอ ที่ใช้การประมาณแบบบอร์น ออปเพนไฮเมอร์ ในขณะที่ส่วนที่เหลือของระบบถูกอธิบายโดยอาศัยการคำนวณบนพื้นฐานของกลศาสตร์โมเลกุล จากผลการศึกษาพบว่า โครงสร้างไฮเครชันของไอออนแมกนีเซียมในชั้นซอลเวชันที่หนึ่งและสองประกอบด้วยน้ำจำนวน 6 และ 12 โมเลกุล ตามลำดับ ในขณะที่การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลที่อยู่บนพื้นฐานของกลศาสตร์โมเลกุลแต่เพียงอย่างเดียวทำนายว่า โครงสร้างไฮเครชันของไอออนแมกนีเซียมประกอบด้วยน้ำในชั้นซอลเวชันที่หนึ่งจำนวน 8 โมเลกุลและที่อยู่ในชั้นซอลเวชันที่สองจำนวน 19 โมเลกุล ตามลำดับ ผลการศึกษายังพบว่า ผลของส่วนสนับสนุนหลายอนุภาคมีบทบาทสำคัญต่อการจัดเรียงตัวของโมเลกุลน้ำที่อยู่ในชั้นซอลเวชันของไอออนแมกนีเซียมด้วย

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^{2+} . The active-site region, the sphere including the second hydration shell of Mg^{2+} , 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^{2+} .