

อภิรักษ์ พัทธมา : การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลที่ผสมผสานกลศาสตร์ควอนตัมและ
กลศาสตร์โมเลกุล (QM/MM MD) ของระบบไอออนฟอร์มेट (HCOO^-) และอะซิเตท
(CH_3COO^-) ในสารละลายน้ำ (*AB INITIO QM/MM MD SIMULATIONS OF
FORMATE (HCOO^-) AND ACETATE (CH_3COO^-) IONS IN AQUEOUS SOLUTION*)
อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร. อนันต์ ทองระอา, 150 หน้า.

การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลที่ผสมผสานกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุล 2 แบบ
ได้แก่ HF/MM และ B3LYP/MM ได้ถูกดำเนินการเพื่อคำนวณคุณลักษณะของพันธะไฮโดรเจน
ระหว่างไอออนฟอร์มेट (HCOO^-) และไอออนอะซิเตท (CH_3COO^-) กับน้ำ โดยเทคนิค QM/MM ที่
นำมาใช้นี้ส่วนของระบบที่เป็นไอออนกับน้ำบริเวณรอบ ๆ ไอออนจะถูกดำเนินการโดยวิธีฮาร์ตรี-
ฟอว์ก (HF) และวิธี B3LYP โดยใช้เบสเซตชนิด DZV+ ในขณะที่ส่วนที่เหลือของระบบอธิบาย
โดยใช้ฟังก์ชันศักร์ ผลที่ได้จากการจำลองแสดงให้เห็นความแข็งแรงของพันธะไฮโดรเจนระหว่าง
 HCOO^- กับน้ำ และ CH_3COO^- กับน้ำ โดยเฉพาะเมื่อเปรียบเทียบกับพันธะไฮโดรเจนของตัวทำ
ละลายน้ำ จากข้อมูลวิถีโคจรที่ได้จากการจำลองพบว่าน้ำที่อยู่ในซอลเวชันชั้นแรกสามารถที่จะยึด
เหนี่ยวกับอะตอมออกซิเจนของหมู่คาร์บอนิลของ HCOO^- และ CH_3COO^- ได้ในลักษณะ
หลวม ๆ และในลักษณะที่เหนียวแน่น ส่งผลให้ได้ค่าเลขไฮเดรชันของแต่ละอะตอมออกซิเจนของหมู่
คาร์บอนิลของ HCOO^- และ CH_3COO^- ที่เบี่ยงเบนสูง โดยมีค่าได้ตั้งแต่ 1 ถึง 6 โดยมีค่าที่มีความถี่
สูงสุดคือ 3 เมื่อเปรียบเทียบพันธะไฮโดรเจนระหว่าง HCOO^- กับน้ำ และ CH_3COO^- กับน้ำ พบว่า
พันธะไฮโดรเจนของ CH_3COO^- กับน้ำ มีความแข็งแรงมากกว่าของ HCOO^- กับน้ำ ซึ่งสามารถ
อธิบายได้จากการที่หมู่เมทิลของ CH_3COO^- สามารถให้อิเล็กตรอนกับหมู่คาร์บอนิลของ
 CH_3COO^- ส่งผลให้หมู่คาร์บอนิลของ CH_3COO^- สามารถเกิดพันธะไฮโดรเจนกับน้ำที่บริเวณ
รอบ ๆ ได้แข็งแรงมากขึ้น ในส่วนของการเปรียบเทียบการใช้งานวิธีฮาร์ตรี-ฟอว์กกับวิธี B3LYP
พบว่าวิธีฮาร์ตรี-ฟอว์กให้ผลการศึกษาเกี่ยวกับพันธะไฮโดรเจนนี้อ่อนกว่าการคำนวณ B3LYP
เล็กน้อย และทำนายระยะพันธะไฮโดรเจนที่ยาวกว่า แต่อย่างไรก็ตามการคำนวณ B3LYP ให้ผลการ
คำนวณในส่วนของสมบัติเชิงพลวัตที่ค่อนข้างต่ำกว่าผลการทดลองมาก

สาขาวิชาเคมี

ปีการศึกษา 2552

ลายมือชื่อนักศึกษา _____

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา _____

APIRAK PAYAKA : *AB INITIO* QM/MM MD SIMULATIONS OF
FORMATE (HCOO^-) AND ACETATE (CH_3COO^-) IONS IN AQUEOUS
SOLUTION. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. ANAN TONGRAAR,
Ph.D. 150 PP.

FORMATE/ACETATE/HYDROGEN BOND/WATER EXCHANGE

Two combined quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) molecular dynamics simulations, namely HF/MM and B3LYP/MM, have been performed to investigate the characteristics of HCOO^- -water and CH_3COO^- -water hydrogen bonds in aqueous solution. By the QM/MM technique, the ion and its surrounding water molecules were treated at HF and B3LYP levels of accuracy, respectively, using DZV+ basis set, while the rest of the system was described by means of classical pair potentials. In this work, the results obtained by the HF/MM and B3LYP/MM simulations clearly indicate strong HCOO^- -water and CH_3COO^- -water hydrogen bonds, especially when compare to that of water-water hydrogen bonds in bulk. Regarding to the HF/MM and B3LYP/MM trajectories, it is observed that first-shell waters are either “loosely” or “tightly” bound to their respective HCOO^- and CH_3COO^- oxygen atoms. Consequently, this leads to large fluctuations in the hydration number, varying from 1 to 6, with the prevalent value of 3. Comparing between the HCOO^- -water and CH_3COO^- -water hydrogen bonds, the latter one is found to be stronger as a consequence of electronic effects in CH_3COO^- , *i.e.*, the methyl group of CH_3COO^- can donate electron to CH_3COO^- carbonyl group. With regard to the HF and B3LYP methods for the description of QM treated region, the

first one leads to slightly too weak and thus longer hydrogen bonds, while the latter predicts them stronger with the too slow dynamical data.

School of Chemistry

Academic Year 2009

Student's Signature _____

Advisor's Signature _____