207208

โครงการวิจัยนี้ ผู้วิจัยได้นำเทคนิคการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลขั้นสูงที่ผสมผสานกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุล มาประยุกต์เพื่อศึกษาสมบัติเชิงโครงสร้างและเชิงพลวัตของไอออนที่ถูกซอลเวตอยู่ในน้ำ ในแอมโมเนีย และในของผสมระหว่างน้ำกับแอมโมเนีย บนพื้นฐานของเทคนิคการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลที่ผสมผสานกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุลดังกล่าวนี้ ส่วนของระบบที่มีความสำคัญทางเคมีมากที่สุดคือ ชั้นซอลเวชันของไอออนซึ่งถูกอธิบายโดยกลศาสตร์ควอนตัมในระดับแอบ อินิชิโอ ในขณะที่ส่วนที่เหลือของระบบถูกอธิบายโดยใช้ฟังก์ชันศักย์แบบอันตรกิริยาคู่ ผลการศึกษาชี้ให้เห็นความสำคัญของการประยุกต์กลศาสตร์ควอนตัมสำหรับการอธิบายลักษณะโครงสร้างและพลวัตของชั้นซอลเวชันของไอออน ข้อมูลที่เกี่ยวข้องกับการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างและพลวัตของซอลเวชันของไอออนที่ได้จากการจำลองดังกล่าวนี้ สามารถนำมาใช้ประโยชน์ในการพัฒนาแบบจำลองสำหรับการตีความหมายข้อมูลทางสเปกโตรสโกปี

207208

High-level *ab initio* QM/MM molecular dynamics simulations have been performed to investigate solvation structure and dynamics of ions solvated in water, in liquid ammonia and in aqueous ammonia solution. Based on the QM/MM technique, the chemically most relevant region, the solvation sphere of the ions, is treated by Born-Oppenheimer *ab initio* quantum mechanics, while the rest of the systems is described by means of pairwise additive approximations. The simulation results clearly indicate the importance of QM treatment in order to obtain more reliable structural arrangements as well as correct dynamics properties of the solvated ions. The detailed information on solvate structure and dynamical changes between solvate configurations revealed by the QM/MM simulations can prove helpful in developing refined models for the interpretation of spectroscopic data.