บทคัดย่อ

T166760

การจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลขั้นสูงที่รวมกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุลเข้าด้วยกันได้ถูกนำมาประยุกต์เพื่อศึกษาโครงสร้างซอลเวชันและพลวัตของไอออนที่อยู่ในน้ำและในสารละลายแอมโมเนีย โดยเทคนิคของการจำลองพลวัตเชิงโมเลกุลที่รวมกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุลเข้าด้วยกัน ส่วนของระบบที่มีความสำคัญทางเคมีมากที่สุดคือซอลเวชันชั้นแรกของไอออนซึ่งถูกอธิบายโดยกลศาสตร์ควอนตัมในระดับแอบ อินิชิโอ ในขณะที่ส่วนที่เหลือของระบบถูกอธิบายโดยใช้ฟังก์ชันศักย์แบบอันตรกิริยาคู่ ผลการศึกษาชี้ให้เห็นความสำคัญของการประยุกต์กลศาสตร์ควอนตัมสำหรับการอธิบายสมบัติเชิงโครงสร้างและเชิงพลวัตของซอลเวชันของไอออน ข้อมูลที่เกี่ยวข้องกับการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างและพลวัตของซอลเวชันของไอออนที่ได้จากการจำลองดังกล่าวนี้ สามารถนำมาใช้ประโยชน์ในการพัฒนาแบบจำลองสำหรับการตีความหมายข้อมูลทางสเปกโตรสโกปี

Abstract

TE 166760

High-level *ab initio* QM/MM molecular dynamics simulations have been performed to investigate solvation structure and dynamics of ions in water 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 based on classical pairwise additivity. The simulation results indicate the importance of the QM treatment in obtaining the reliable structural arrangements as well as the correct dynamics properties of the solvated ions. The details of 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.