230068

รหัสโครงการ: MRG5080292

ชื่อโครงการ: โครงการสมบัติทางโครงสร้างและพลศาสตร์ของสารละลายไอออนโดยใช้วิธีการจำลองทางพลวัตเชิงโมเลกุลที่รวมระเบียบวิธี แอบ อินิชิโอ กลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุล

ชื่อนักวิจัย: ผศ.ดร.ชินพงษ์ กฤตยากรนุพงศ์
ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าธนบุรี

E-mail Address: chinapong.kri@kmutt.ac.th

ระยะเวลาโครงการ: 2 ปี

บทคัดย่อ:

แบบจำลองพลวัตโมเลกุลที่รวมกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุลถูกใช้เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและสมบัติทางพลศาสตร์ของ Cr^{2+} และ Ag^{2+} ในน้ำ เลขโคออร์ดิเนชันสำหรับชั้นซอลเวชันที่ 1 มีค่าเท่ากับ 6 สำหรับไอออนโลหะทั้งสองชนิด การบิดเบี้ยวอย่างรวดเร็วของปรากฏการณ์ Jahn-Teller ของโครงสร้างทรงเหลี่ยมแปดหน้า $[Cr(H_2O)_6]^{2+}$ และ $[Ag(H_2O)_6]^{2+}$ ถูกพบในการคำนวณแบบจำลองพลวัตโมเลกุลที่รวมกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุลสำหรับสารละลาย Cr^{2+} ค่าเฉลี่ยความยาวพันธะระหว่างไอออนและโมเลกุลน้ำที่อยู่ในแกน "equatorial" มีค่าเท่ากับ 2.19 Å ในขณะที่ค่าเฉลี่ยความยาวพันธะ Cr^{2+}-O ของแกน "axial" มีค่าเท่ากับ 2.32 Å สารละลาย Ag^{2+} ถูกพบโดยมีความยาวพันธะ Ag^{2+}-O_{eq} และ Ag^{2+}-O_{ax} เท่ากับ 2.17 และ 2.27 Å ตามลำดับ สมบัติทางโครงสร้างเช่น การกระจายตัวของมุม tilt และ มุม θ ถูกทำการวัดเพื่อวิเคราะห์โครงสร้างสารละลาย Cr^{2+} และ Ag^{2+} สำหรับสมบัติทางพลศาสตร์ ไม่พบการแลกเปลี่ยนโมเลกุลน้ำในชั้นซอลเวชันที่ 1 ค่าเวลาเฉลี่ยของการอาศัยอยู่ในชั้นซอลเวชันที่ 2 สำหรับ Ag^{2+} มีค่าเท่ากับ 7.0 ps ซึ่งใกล้เคียงกับค่าที่ตรวจวัดได้จากกรณีของ Cr^{2+}

230068

Project Code: MRG5080292

Project Title: Structural and dynamical properties of solvated ions: *ab initio* quantum mechanical/molecular mechanics molecular dynamics simulations

Investigator: Assist. Prof. Dr. Chinapong Kritayakornupong

E-mail Address: chinapong.kri@kmutt.ac.th

Project period: 2 years

Abstract:

The hybrid *ab initio* quantum mechanical/molecular mechanical (QM/MM) molecular dynamics simulations were performed for evaluating structural and dynamical properties of the hydrated Cr^{2+} and Ag^{2+} ions. All two metal ions were found to coordinate six water molecules in the first hydration shell. A fast dynamical Jahn-Teller distortion of the octahedral $[Cr(H_2O)_6]^{2+}$ and $[Ag(H_2O)_6]^{2+}$complexes is exhibited in the QM/MM molecular dynamics simulations. For the hexahydrated Cr^{2+}, the average distance of the "equatorial" water molecules is 2.19 Å, whereas the average Cr^{2+}-O distance of the "axial" waters is 2.32 Å. The Ag^{2+}-hexaaqua ion was observed with the Ag^{2+}-O_{eq} and Ag^{2+}-O_{ax} distances of 2.17 and 2.27 Å, respectively. Several structural parameters such as angular distribution functions, and tilt- and θ-angle distributions were also determined to characterize the hydration structures of Cr^{2+} and Ag^{2+}. For dynamical properties, no ligand exchange processes in the first hydration shell were observed for both ions. The mean residence time of 7.0 ps is estimated for the ligand exchange processes in the second hydration shell of Ag^{2+}, which is almost identical to that observed for Cr^{2+}.