บทคัดย่อ

190540

คำนวณแบบจำลองพลวัตโมเลกุลที่ใช้ฟังก์ชันศักย์และแบบที่รวมกลศาสตร์ควอนตัมและกลศาสตร์โมเลกุลของ Ru^{2+} และ Ru^{3+} ในน้ำ เพื่อศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและสมบัติทางพลศาสตร์ จากคำนวณพบว่า การกระจายในแนวรัศมีของชั้นซอลเวชันที่ 1 มีค่าเท่ากับ 2.42 Å และ 2.10 Å สำหรับ Ru^{2+} และ Ru^{3+} ตามลำดับ การคำนวณสมบัติทางโครงสร้างอื่นๆ เช่น การกระจายตัวของมุมต่าง (angular distribution functions, tilt- และ θ-angle distributions) เพื่อใช้วิเคราะห์พฤติกรรมของ Ru^{2+} และ Ru^{3+} ในน้ำ จากการคำนวณพบว่ามีการแลกเปลี่ยนโมเลกุลของน้ำระหว่างชั้นซอลเวชันที่ 2 และบัลค์ โดยมีค่าเวลาเฉลี่ยของการอาศัยอยู่ในชั้นซอลเวชันเท่ากับ 7.1 และ 6.5 ps สำหรับ Ru^{2+} และ Ru^{3+} ตามลำดับ

Abstract

190540

Classical and *ab initio* quantum mechanical/molecular mechanical (QM/MM) molecular dynamics simulations have been performed to investigate structural and dynamical properties of the hydrated Ru^{2+} and Ru^{3+}. The QM/MM simulations predict the average first-shell distances of 2.42 Å and 2.10 Å for the Ru^{2+} and Ru^{3+}, respectively. Several structural parameters such as angular distribution functions, and tilt- and θ-angle distributions were determined to characterize the hydration structures of Ru^{2+} and Ru^{3+}. Ligand exchange processes between the second hydration shell and the bulk occur with the mean residence times of 7.1 and 6.5 ps for Ru^{2+} and Ru^{3+}, respectively.