MOLECULAR DYNAMICS OF THE NANOSCALE INTERFACE

SRIPRAJAK KRONGSUK

**A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENTS FOR
THE DEGREE OF DOCTOR OF PHILOSOPHY (PHYSICS)
FACULTY OF GRADUATE STUDIES
MAHIDOL UNIVERSITY
2006**

ISBN 974-04-7281-8

COPYRIGHT OF MAHIDOL UNIVERSITY

พลวัตเชิงโมเลกุลที่รอยต่อระดับนาโน (MOLECULAR DYNAMICS OF THE NANOSCALE INTERFACE).

ศรีประจักร์ ครองสุข 4637443 SCPY/D

ปร.ด. (ฟิสิกส์)

คณะกรรมการควบคุมวิทยานิพนธ์ : ธีรเกียรติ์ เกิดเจริญ, Dr.rer.nat. (PHYSICAL CHEMISTRY), สุพจน์ หารหนองบัว, Dr.rer.nat. (PHYSICAL CHEMISTRY), สิรพัฒน์ ประโทนเทพ, Ph.D. (PHYSICS)

บทคัดย่อ

ได้ทำการศึกษาคุณสมบัติเชิงโครงสร้างและเชิงพลวัตของโมเลกุล 18-CROWN-6 ที่รอยต่อระหว่างน้ำกับคาร์บอนเตตระคลอไรด์ด้วยวิธีการจำลองโมเลคิวลาร์ไดนามิกส์ นอกจากนี้ยังได้ศึกษาโครงสร้างของสารละลายล้อมรอบโมเลกุล 18-CROWN-6 ในสารละลายคาร์บอนเตตระคลอไรด์ และของสารประกอบเชิงซ้อน 18-CROWN-6/K^+ ในสารละลายน้ำด้วยวิธีการจำลองมอนติ คาร์โล ผลการศึกษา 18-CROWN-6/K^+ ในน้ำพบว่าแม้ว่าจำนวนโมเลกุลของน้ำในชั้นแรกของสารละลายจะเท่ากันเหมือนกับในกรณีศึกษาโมเลกุล 18-CROWN-6 ในน้ำแต่ว่าโครงสร้างการล้อมรอบมีความแตกต่างกันอย่างมีนัยสำคัญในขณะที่โครงสร้างของสารละลายรอบโมเลกุล18-CROWN-6 ในคาร์บอนเตตระคลอไรด์พบว่าชั้นการล้อมรอบมีความโดดเด่นน้อยกว่าชั้นโครงสร้างของน้ำเนื่องจากว่าอันตรกิริยาระหว่างน้ำกับคาร์บอนเตตระคลอไรด์ค่อนข้างอ่อน

สำหรับการจำลองโมเลคิวลาร์ไดนามิกส์ของ 18-CROWN-6 และ 18-CROWN-6/K^+ ที่รอยต่อระหว่างน้ำกับคาร์บอนเตตระคลอไรด์ พบว่าโมเลกุลของตัวถูกละลายส่วนใหญ่จะอยู่ที่ตรงรอยต่อระหว่างพื้นผิวการมีอยู่ของไอออน K^+ ไม่เพียงแต่จะทำให้เกิดการเคลื่อนย้ายของตัวถูกละลายเข้าไปในสารละลายแต่ยังทำให้การวางตัวของโมเลกุล 18-CROWN-6 เปลี่ยนไปด้วย ในการศึกษาการจำลองโมเลคิวลาร์ไดนามิกส์ของ PzH_2 แบบชั้นโมเลกุลเดียวที่พื้นผิวระหว่างน้ำกับอากาศพบว่าการเพิ่มขึ้นของจำนวนโมเลกุล PZH_2 ที่พื้นผิวรอยต่อมีผลทำให้ความหนาแน่นของน้ำลดลงอย่างมีนัยสำคัญและยังทำให้ชั้นโครงสร้างของน้ำเปลี่ยนแปลงด้วยยิ่งไปกว่านั้นการวางตัวของโมเลกุลน้ำที่พื้นผิวรอยต่อมีความเป็นระเบียบมากขึ้นตามการเพิ่มขึ้นของจำนวนโมเลกุล PzH_2

98 หน้า ISBN 974-04-7281-8

MOLECULAR DYNAMICS OF THE NANOSCALE INTERFACE.

SRIPRAJAK KRONGSUK 4637443 SCPY/D

Ph.D. (PHYSICS)

THESIS ADVISORS : TEERAKIAT KERDCHAROEN, Dr.rer.nat. (PHYSICAL CHEMISTRY), SUPOT HANNONGBUA, Dr.rer.nat. (PHYSICAL CHEMISTRY), MR. SIRAPAT PRATONTEP, Ph.D. (PHYSICS)

ABSTRACT

Structural and dynamical properties of the 18-crown-6 molecule at the water–CCl_4 interface and the porphyrazine (PzH_2) molecule at the water–air interface were studied using molecular dynamics simulations. The solvation structures of uncomplex 18-crown-6 in CCl_4 solution and that of 18-crown-6/K^+ complex in aqueous solution were also investigated using the Monte Carlo (MC) method. The MC simulation study of 18-crown-6/K^+ in aqueous solution revealed that although a number of water molecules in the first hydration shell is the same as that of the non-complex case, hydration structures for the two cases were significantly different. However, solvation structure of the 18-crown-6 in CCl_4 is less dominant than that in an aqueous solution due to weak interaction between 18-crown-6 and CCl_4.

The molecular dynamics (MD) simulations of the 18-crown-6 and 18-crown-6/K^+ complex at the water–CCl_4 interface indicated that most solute molecules are preferential to adsorb at the interface region. The presence of K^+ ions for the 18-crown-6 complex affects not only the migration of solute molecules to the bulk phase, but also the orientation of 18-crown-6 molecules at the interface. The MD simulation study of PzH_2 monolayer at the water–air interface reveled that increment of the number of PzH_2 molecules results to the significantly decreased water density and the layered structures of water. Moreover, the orientations of water molecules at the interface became more regular while the number of PzH_2 molecules increased.

KEY WORDS : 18-CROWN-6 / SOLVATION / WATER–CCl_4 INTERFACE
MONTE CARLO / MOLECULAR DYNAMICS/ SIMULATION
AB INITIO POTENTIAL/ PORPHYRAZINE / MONOLAYER

98 pp. ISBN 974-04-7281-8