27 AUG 2001

MONTE CARLO SIMULATIONS OF 18-CROWN-6 IN AQUEOUS SOLUTION USING AB INITIO PAIR POTENTIAL

SRIPRAJAK KRONGSUK

ได้รับพระราชทาน
จาก
บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยมหิดล

A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT

OF THE REQUIREMENTS FOR

THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE (PHYSICS)

FACULTY OF GRADUATE STUDIES

MAHIDOL UNIVERSITY

2001

ISBN 974-040-364-6

COPYRIGHT OF MAHIDOL UNIVERSITY

TH
S 474 M
2001
c. 2

Copyright by Mahidol University

4137693 SCPY/M: MAJOR: PHYSICS; M.Sc. (PHYSICS)
KEY WORDS: MONTE CARLO SIMULATION / 18-CROWN-6 / AQUEOUS SOLUTION / HYDRATION SHELL
SRIPRAJAK KRONGSUK: MONTE CARLO SIMULATIONS OF 18-CROWN-6 IN AQUEOUS SOLUTION USING AB INITIO PAIR POTENTIAL. THESIS ADVISORS: ASST. PROF. TEERAKIAT KERDCHAROEN, Ph.D., ASSOC. PROF. SUPOT HANNONGBUA, Ph.D. 65 P. ISBN 974-040-364-6

The solvation structure of 1, 4, 7, 10, 13, 16 - hexaoxacyclooctadecane (18-Crown-6) in aqueous solution was investigated using the Metropolis Monte Carlo scheme. Simulations were carried out for a system containing 501 rigid particles, including one 18-Crown-6 molecule, which was fixed at the center of the cube. With a volume of 500 water molecules at 298 K and 1 atm plus additional space occupied by the 18-Crown-6 molecule, a periodic cubic volume of side length 25 Å was yielded. 18-Crown-6-water pair potential was developed based on *ab initio* calculations. For these calculations, the DZP basis set, including BSSE correction, was selected while the MCY potential was employed to describe water-water interactions. The results showed that two waters were coordinated to the first hydration shell of the ligand, one above and the other below the ligand plane. Each of the waters was strongly bound to the ligand cavity, pointing two hydrogen atoms to oxygen atoms of the 18-Crown-6 molecule. In addition, significant solvent structure around the 18-Crown-6 molecule was observed up to 12 Å from the center of the ligand. It is suggested for further research that the same system, 1, 4, 7, 10, 13, 16 – hexaoxacyclooctadecane, be studied in a non-polar solution.

©Copyright by Mahidol University

4137693 SCPY/M: สาขาวิชา: ฟิสิกส์; วท.บ (ฟิสิกส์)

ศรีประจักร์ ครองสุข: การจำลองมอนติ คาร์โล ของสารละลาย 18-CROWN-6-ในน้ำโดยใช้ฟังก์ชันศักย์คู่แบบ แอบอินิทริโอ (MONTE CARLO SIMULATIONS OF 18-CROWN-6 IN AQUEOUS SOLUTION USING AB INITIO PAIR POTENTIAL). คณะกรรมการควบคุมวิทยานิพนธ์: ธีรเกียรติ์ เกิดเจริญ, Ph.D., สุพจน์ หารหนองบัว, Ph.D 65 หน้า. ISBN 974-040-364-6

ได้ทำการศึกษาโครงสร้างชอลเวชันของ 1, 4, 7, 10, 13, 16 — เฮกซะออกซะไซโคลออกตะเดคเคน (18-Crown-6) ในน้ำโดยใช้ระเบียบวิธี เมโทรโปลิส มอนติ คาร์โล. ระบบบรรจุอนุภาคแข็งเกร็ง 501 ตัวซึ่งรวม หนึ่งโมเลกุลของ 18-Crown-6 เข้าไปด้วยโดยวางอยู่ตรงกลางของกล่องลูกบาศก์ ปริมาตรของน้ำ 500 โมเลกุลที่อุณหภูมิ 298 องศาเคลวิล ความดันบรรยากาศ 1 เอทีเอ็มรวมกับปริมาตรที่บรรจุโมเลกุล 18-Crown-6 ทำให้ได้ความยาวของกล่องลูกบาศก์ 25 อังสตรอม ศักย์คู่ระหว่าง 18-Crown-6 กับน้ำได้ทำการพัฒนาขึ้นโดยวางอยู่บนพื้นฐานการคำนวณแอบอินิทริโอสำหรับการคำนวณนี้ได้ใช้เบซิสเซ็ต DZP พร้อมกับทำการแก้ผลของ BSSE ขณะฟังก์ชันศักย์ MCY ถูกใช้เพื่อบรรยายอันตรกิริยาระหว่างน้ำกับน้ำ ผลการทดลองแสดงให้เห็นว่ามีน้ำสองโมเลกุลอยู่ในชั้นแรกของการชอลเวชันของลิแกนด์ตัวหนึ่งอยู่ข้างบนอีกตัวอยู่ข้างล่างระนาบของลิแกนด์น้ำแต่ละตัวจะถูกยึดอย่างแรงกับโพรงของลิแกนด์โดยหันไฮโดรเจนอะตอมทั้งสองไปยังออกซิเจนอะตอมของโมเลกุล 18-Crown-6 ยิ่งไปกว่านั้นโครงสร้างของตัวทำละลายรอบโมเลกุล18-Crown-6 ที่มีความสำคัญได้ทำการสังเกตจนถึง 12 อังสตรอมจากจุดศูนย์กลางของลิแกนด์ข้อเสนอแนะสำหรับการทำวิจัยเพิ่มเติมคือระบบเดียวกัน, 1, 4, 7, 10, 13, 16 — เฮกซะออกซะไซโคลออกตะเดคเคน (18-Crown-6), จะถูกศึกษาในสารละลายที่ไม่มีขั้ว

Copyright by Mahidol University