

# ผลงานวิจัยดีเด่นของ มหาวิทยาลัยมหิดล



มหาวิทยาลัยมหิดล  
กรุงเทพฯ@งแห่งดิน

งานสารสนเทศงานวิจัย กองบริหารงานวิจัย  
สำนักงานอธิการบดีมหาวิทยาลัยมหิดล  
โทร. 02-849-6241-6 โทรสาร 02-849-6247  
E-mail : dircopra@mahidol.ac.th

## โครงสร้างและพลวัตของโมเลกุลน้ำที่ล้อมรอบไอออน $K^+$ และ $Ca^{2+}$ การเปรียบเทียบ ระหว่างการจำลองพลศาสตร์โมเลกุล QM/MM และ ONIOM-XS

### บทคัดย่อ

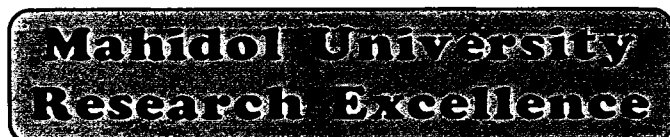
ในงานวิจัยนี้เราได้ทำการจำลองพลศาสตร์เชิงโมเลกุลแบบ QM/MM และแบบ ONIOM-XS เพื่อศึกษาโครงสร้างการล้อมรอบไอออน  $K^+$  และ  $Ca^{2+}$  ในน้ำ ผลวิเคราะห์โดยละเอียดพบว่าระเบียบวิธีแบบ ONIOM-XS ซึ่งเป็นวิธีใหม่ ให้ค่าไฮเดรชันเท่ากับ 6.3 และ 7.6 ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบกับระเบียบวิธี QM/MM ที่เก่ากว่า ซึ่งให้ค่าการล้อมรอบเท่ากับ 7.0 และ 7.8 ตามลำดับ จากการวิเคราะห์สมบัติเชิงพลวัตอื่นๆ นั้นได้ข้อสรุปว่าระเบียบวิธี ONIOM-XS มีศักยภาพสูงในการทำนายสมบัติต่างๆ ของสารละลายอย่างถูกต้องแม่นยำ

### ติดต่อขอรายละเอียดเพิ่มเติม



หัวหน้าโครงการ ผศ. ชีวเกียรติ เกิดเจริญ  
ที่อยู่ ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์  
(วิทยาเขตพญาไท) มหาวิทยาลัยมหิดล  
โทร 0-2201-5770  
Email sctkcomahidol.ac.th

ผู้ร่วมวิจัย  
ที่อยู่  
โทร  
Email



Research Management and Development  
Office of the President  
Tel : 02-849-6241-6 Fax : 02-849-6247  
E-mail : dlrcopra@mahidol.ac.th



MAHIDOL UNIVERSITY  
*Wisdom of the Land*

Hydration structure and dynamics of  $K^+$  and  $Ca^{2+}$  in aqueous solution:  
Comparison of conventional QM/MM and ONIOM-XS MD simulations

Abstract

Molecular dynamics (MD) simulations based on the conventional QM/MM scheme and ONIOM-XS method have been performed to investigate structural and dynamical properties of  $K^+$  and  $Ca^{2+}$  in water. Regarding the detailed analyses of the ONIOM-XS MD trajectories, the average hydration numbers for  $K^+$  and  $Ca^{2+}$  were found to be 6.3 and 7.6, respectively, compared with the corresponding values of 7.0 and 7.8 derived by the conventional QM/MM simulations. Together with the significant difference found in the comparison of the dynamics details, the ONIOM-XS method clearly shows its capability in predicting more reliable detailed knowledge of these hydrated ions.

*For More Information*



Name (PI) Teerakiat Kerdcharoen  
Address Department of Physics, Faculty of Science  
(Phyachai campus), Mahidol University  
Tel: 0-2201-5770  
Email: [scrk@mahidol.ac.th](mailto:scrk@mahidol.ac.th)



Name  
Address  
Tel  
Email