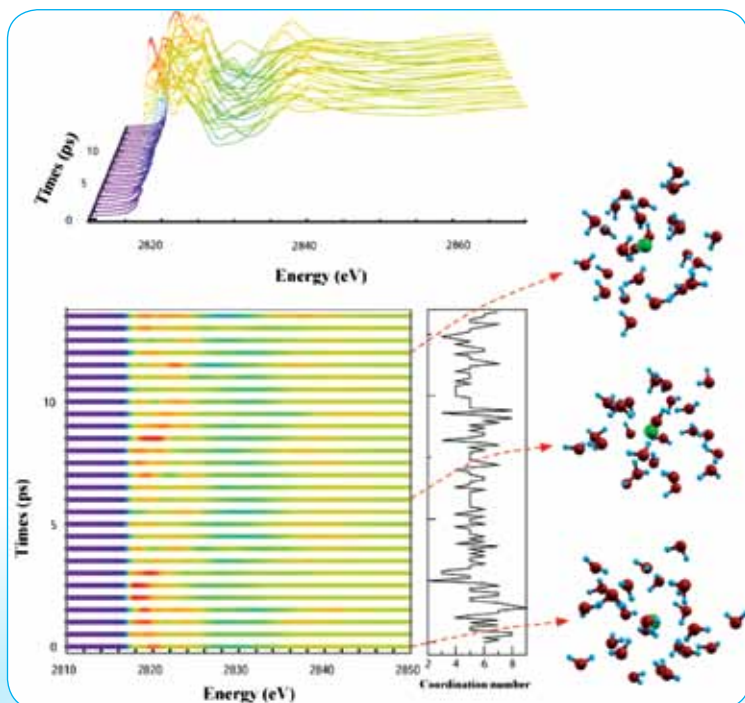


การศึกษาโครงสร้างของน้ำรอบไอออนแคลเซียม และคลอไรด์



แม้ว่าในปัจจุบันมนุษย์จะเข้าใจธรรมชาติมากขึ้น ทำให้สามารถพัฒนาเทคโนโลยีต่างๆ และปรับเปลี่ยนสารให้มีสมบัติพิเศษหลายด้าน แต่เป็นที่น่าแปลกใจว่าความเข้าใจในอันตรกิริยาระหว่างโมเลกุลของน้ำกับไอออนของธาตุที่เป็นที่รู้จักกันอย่างดี คือ คลอไรด์ และ แคลเซียม กลับไม่เป็นที่ทราบกันอย่างแน่ชัด คณะผู้วิจัยจึงได้อาศัยเทคนิคการดูดกลืนรังสีเอกซ์ประกอบกับเทคนิคการคำนวณเคมีควอนตัม และฟิสิกส์ ควอนตัม ในการศึกษาโครงสร้างของน้ำรอบไอออนของธาตุทั้งสอง โดยในส่วนของทดลองได้นำสารแคลเซียมคลอไรด์ (CaCl_2) มาละลายน้ำ และไปวัดการดูดกลืนรังสีเอกซ์ในย่านของแคลเซียม และคลอไรด์ ตามลำดับ ส่วนของการคำนวณนั้น ได้เริ่มตั้งแต่การใช้เทคนิคเคมีควอนตัมในการจำลองพลวัตของโมเลกุลน้ำรอบไอออนแคลเซียมและคลอไรด์ โดยในการจำลองมีโมเลกุลน้ำจำนวนหลายร้อยโมเลกุล และได้ทำการจำลองเป็นเวลานานพอที่ระบบเข้าสู่ภาวะสมดุลเชิงความร้อน (แต่โมเลกุล



การเปลี่ยนแปลงของสเปกตรัมการดูดกลืนรังสีเอกซ์ของไอออนคลอไรด์ที่ได้จากการจำลองจากเทคนิคเคมีควอนตัมร่วมกับฟิสิกส์ควอนตัม ก่อนที่จะหาค่าเฉลี่ยเพื่อเทียบกับการทดลอง

ของน้ำยังมีการเคลื่อนที่ตลอดเวลา) หลังจากนั้นได้ทำการบันทึกการเรียงตัวของโมเลกุลน้ำรอบไอออนที่เวลาต่างๆ ทำให้ทราบพลวัตโดยละเอียดของโมเลกุลน้ำรอบไอออน อย่างไรก็ตาม ผลการจำลองนี้เป็นเพียงผลตามทฤษฎี ซึ่งการได้มานั้นมีการประมาณต่างๆ หลายอย่าง ดังนั้นจึงต้องมีการยืนยันความถูกต้อง ทั้งนี้ ในปัจจุบันได้มีงานคำนวณทางทฤษฎีของระบบไอออนทั้งสองนี้ในน้ำจากหลายกลุ่มวิจัยทั่วโลก ซึ่งได้ผลการคำนวณที่แตกต่างกัน ขึ้นอยู่กับรายละเอียดในการคำนวณ ในงานวิจัยนี้ ได้คำนวณการดูดกลืนรังสีเอกซ์ของระบบที่ได้จากการจำลองโดยเคมีควอนตัม โดยคำนวณการดูดกลืนรังสีเอกซ์ด้วยเทคนิคควอนตัมฟิสิกส์ จากโครงสร้างที่บันทึกไว้ตามเวลาที่ในการจำลองเปลี่ยนไปที่ละโครงสร้างและเฉลี่ยเพื่อหาการดูดกลืนเฉลี่ยไปเทียบกับการทดลอง ผลการเปรียบเทียบ ได้ผลลัพธ์ที่ใกล้เคียงกันทำให้เชื่อได้ว่า พลวัตของน้ำรอบไอออนที่คำนวณได้มีความน่าเชื่อถือสูง นอกจากนั้นงานวิจัยนี้ยังเป็นการบุกเบิกระเบียบวิธีการศึกษาระบบอื่นที่มีลักษณะเดียวกัน โดยบูรณาการเทคนิคการวัดการดูดกลืนรังสีเอกซ์เข้ากับการคำนวณโดยระเบียบวิธีเคมีควอนตัมและฟิสิกส์ควอนตัม

รศ.ดร.อนันต์ ทองระอา อ.ดร.สาโรช รุจิรวรรณ และ ศ.ดร. ชูกิจ ลิมปิจำนงค์
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี
อ.ดร.จิรวัฒน์ ต.เทียนประเสริฐ
มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

เอกสารอ้างอิง

Tongraar, A., T-Thienprasert, J., Rujirawat, S., Limpijumnong, S., (2010). Structure of the hydrated Ca^{2+} and Cl^- : Combined X-ray absorption measurements and QM/MM MD simulations study. *Physical chemistry chemical physics* 12 (36) : 10876 -10887.