A THEORETICAL STUDY OF THE INFLUENCE OF SOLVENT ON THE INTERNAL ROTATION OF GLYCINE ZWITTERION

Mr. Prayong Doungdee

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Science
Departement of Chemistry
Graduate School
Chulalongkorn University
1985

ISBN 974-566-127-9

Thesis Title	A Theoretical Study of the Influeuce of Solvent on the Internal Rotaion of Glycine Zwitterion
By	Mr. Prayong Doungdee
Department	Chemistry
Thesis Advisor	Associate Professor Sirirat Kokpol, Ph.D.
	Professor B. M. Rode, Ph.D.

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree.

S. Bunnag ..... Dean of Graduate School
(Professor Supradit Bunnag, Ph.D.)

Thesis Committee

Padet Sidisunthorn ..... Chairman
(Professor Padet Sidisunthorn, Ph.D.)

Salag Dhabanandan ..... Member
(Associate Professor Salag Dhabanandana, Ph.D.)

Waret Veerasai ..... Member
(Dr. Waret Veerasai)

Sirirat Kokpol ..... Member
(Associate Professor Sirirat Kokpol, Ph.D.)

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การศึกษาทางทฤษฎี ถึงผลกระทบของตัวทำละลายที่มีต่อการหมุนภายในของไกลซีน สวิตเตอร์ไอออน

ชื่อนิสิต นาย ประยงค์ ดวงดี

อาจารย์ที่ปรึกษา รองศาสตราจารย์ ดร. ศิริรัตน์ กกผล

ศาสตราจารย์ ดร. บี เอ็ม โรเด

ภาควิชา เคมี

ปีการศึกษา 2528

บทคัดย่อ

ไฮเดรชันเชลของไกลซีน สวิตเตอร์ไอออน ถูกสร้างขึ้นโดย การศึกษาพลังงานอินเทอแรคชันระหว่างไกลซีน สวิตเตอร์ไอออน กับโมเลกุลของน้ำที่ล้อมรอบ โดยใช้วิธีการคำนวณทั้งแบบ เซมิเอ็มไพริกัล และเอ็บอินนิชิโอ พร้อมทั้งได้วิจารณ์ข้อจำกัด และข้อได้เปรียบ เสียเปรียบของวิธีการคำนวณทั้งสอง นอกจากนั้น โดยใช้วิธีการเปรียบเทียบกับไกลซีน สวิตเตอร์ไอออนที่อยู่ในสภาพของโมเลกุลเดี่ยว ทำการศึกษาผลของ ไฮเดรชันเชล ที่มีต่อการหมุนภายในของไกลซีน สวิตเตอร์ไอออน ศึกษาผลของโมเลกุล น้ำที่อยู่ใน ไฮเดรชันเชล ที่มีต่อการเปลี่ยนแปลงคอนฟอร์ เมชัน ทั้งนี้โดยใช้วิธีคำนวนแบบ เซมิเอ็มไพริกัล

Thesis Title A Theoretical Study of the Influeuce of Solvent on the Internal Rotaion of Glycine Zwitterion

Name Mr. Prayong Doungdee

Thesis Advisor Associate Professor Sirirat Kokpol, Ph.D.

Professor B. M. Rode, Ph.D.

Department Chemistry

Academic Year 1985

ABSTRACT

To construct the hydration shell of glycine zwitterion, the interaction of glycine zwitterion with water has been studied. The relative stability of the possible coordination sites has been evaluated using the semiempirical CNDO/2 method and ab initio calculations with minimal Gaussian basis sets. The abilities and limitations of both computational frameworks are critically discussed and a model for the full hydration shell of glycine and the coresponding stabilization energy are given. The influence of a full first hydration shell on the energy barriers related to conformational changes of glycine has been studied by means of approximate molecular orbital calculations. The energy optimized pathway is discussed and compared with that of the isolated molecule, evaluating the possibility of corotation of the hydration shell during conformational changes.

Acknowledgements

I would like to thank Visiting Professor B. M. Rode and Associate Professor Sirirat Kokpol for the direction and the advice which made the writing of this thesis possible. I am also grateful to the System Analyzers and Operators of the Computer Center of Chulalongkorn University for many helpful suggestions about the programs. A special debt is owed to Bangorn Narmngam, who has given me encouragement and financial support throughout my months of work on this project. Larry Lohmann helped proofread the English version.

Contents

Contents continued

Contents continued

List of Tables

List of tables continued

List of tables continued

List of tables continued

List of tables continued

Pages

List of tables continued

Pages

List of tables continued

List of Figures

List of Figures continued

List of Figures continued

Pages

List of Figures continued

Pages