

水溶液の差分空間分布関数による解析 II：  
ジメチルエーテル、180° エチルメチル  
エーテルおよび 0° エチルメチル  
エーテルの水和構造

秦 季之、小野 行雄

*Chemical & Pharmaceutical Bulletin*, 48 (1), 16-20 (2000)

**Difference Spatial Distribution Function Analysis of  
Aqueous Solutions. II. Hydration Structures of  
Dimethyl ether, 180° Ethyl methyl ether and  
0° Ethyl methyl ether Solutions**

Toshiyuki Hata and Yukio Ono

**ABSTRACT**: Monte Carlo simulations were presented to demonstrate the influence of the hydrophobic group's steric bulk on hydration structure. We had simulated a dimethyl ether (DME), and two conformations for ethyl methyl ether (EME). Based on the results of Spatial distribution function (SDF) in an infinitely dilute aqueous solution of ethers, the distribution of hydration water molecules could be divided into hydrogen acceptor (HA) and hydrophobic hydration (HH) regions, and the spatial orientation of the hydrogen-bonded water in the HA region was found to form a triple-layer structure, as it did in alcohol solutions. From the results of an analysis of the difference SDF (DSDF) between the SDFs of EME and DME, it was apparent that the distribution changes of hydration water molecules in ether solutions were essentially similar to those in the alcohol solutions.

抄録 ジメチルエーテル (DME) とエチルメチルエーテル (EME) の無限希釈水溶液を用いて疎水性基の嵩高さの影響が水和構造に与える影響を明らかにする為に、モンテカルロシミュレーション (MC) を行った。MCで得られた空間分布関数の解析結果から、エーテル分子に対する水和水の分布は水素原子受容体 (HA) 領域と疎水性水和 (HH) 領域に分けられ、HA領域はアルコール水溶液の場合と同様に三層構造を形成

していることが明らかとなった。またメチル基とエチル基を有するDMEとEME水溶液の差分空間分布関数の解析結果から、エーテル水溶液の水和水の分布変化は対応するアルコール水溶液の分布変化と本質的に同じであることが明らかとなった。