

メタノールおよびエタノール水溶液の 差分空間分布関数による解析

秦 季之、小野行雄

Chemical & Pharmaceutical Bulletin, 47 (5), 615–620 (1999)

Difference Spatial Distribution Function Analysis of Methanol and Ethanol Solutions

Toshiyuki Hata and Yukio Ono

ABSTRACT Spatial distribution function (SDF), $g_{OO}(x,y,z)$, has been used to characterize the anisotropic structure of solutions in computer simulations. In this article, a new method for structural change analysis is proposed based on the difference spatial distribution function, (DSDF) $\Delta g_{OO}(x,y,z)$, and is applied to liquid water, and to infinitely dilute aqueous solutions of methanol and ethanol. The new DSDF method presented in this work should be widely applicable to structural change analysis of anisotropic hydration structure for various solutions by computer simulation.

抄録 メタノールとエタノールの無限希釈水溶液の水和構造をコンピュータシミュレーションによって求めた空間分布関数(SDF)を用いて調べた。さらに、構造変化の新しい解析法として差分空間分布関数(DSDF)を提案し、それらの水溶液が温度変化あるいは疎水性基の違いによって生じる水合構造の変化を解析した。その結果、新しい解析法である差分空間分布関数はコンピュータシミュレーションによって、水合構造の変化を調べるのに広く利用できることを示した。