

透明ポリマーの光物性値予測システムの開発

Optical properties prediction system for transparent polymers

応用化学生物学科 谷尾宣久 (Norihiisa TANIO)

We clarify quantitative relation between the essential optical properties of polymer and the chemical structure of the repeat unit, in order to predict optical properties only from the chemical structure. The system which predicts refractive index and inherent transparency of polymer is reported.

次世代光技術を担う透明ポリマー¹⁾の効率的な材料開発に資するため、ポリマーの光物性値を繰り返し単位の化学構造のみから定量的に予測するシステムの開発を行っている。ここでは、ポリマーを構成する原子の種類とその数をパソコンに入力するのみで、屈折率が計算できる屈折率予測システム、および本質的な透明性が計算できる透明性予測システムの最新の開発状況²⁾について報告する。

繰り返し単位を構成する原子の種類とその数をパソコンに入力するのみで、ポリマーの屈折率およびその波長依存性（アッペ数）が表示される屈折率予測システムを作成した。Fig.1 にシステム起動時に表示されるメニュー画面を示す。この画面より使用するシステムを選択する。屈折率予測システムを選択し、入力画面で繰り返し単位を構成する原子の種類とその数を入力すると屈折率が計算される。PMMA を例に屈折率計算結果画面を Fig.2 に示す。

ポリマーの化学構造と光散乱損失および光吸収損失の定量的な関係から、繰り返し単位を構成する原子の種類とその数を入力するのみで本質的な透明性を計算するシステムを作成した。光伝送損失（dB/km）で透明性を出力でき、光ファイバー材料の低損失化に資する「光伝送損失予測システム」、および透過率（%）を出力でき、ディスプレイ用光学フィルム等の高透明化に資する「透過率予測システム」の2つのシステムを作成した。「光伝送損失予測システム」は、光散乱損失及び光吸収損失の波長依存性、さらにそれらを足し合わせたものとして、光伝送損失の波長依存性を計算するものである。Fig.3 に、非晶性全フッ素化ポリマー（旭硝子㈱、CYTOP）を例に、光伝送損失計算結果画面を示す。「透過率予測システム」は、散乱損失および吸収損失に加え、反射率を化学構造から計算して、透過率の波長依存性を計算するものである。

- 1) "透明ポリマーの材料開発と高性能化", 谷尾宣久監修, シーエムシー出版(2015)
- 2) 谷尾宣久、館山拓矢、高分子学会予稿集、Vol.66、No.1、2G16 (2017)

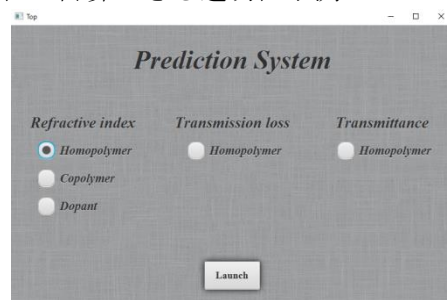


Fig.1 Opening menu

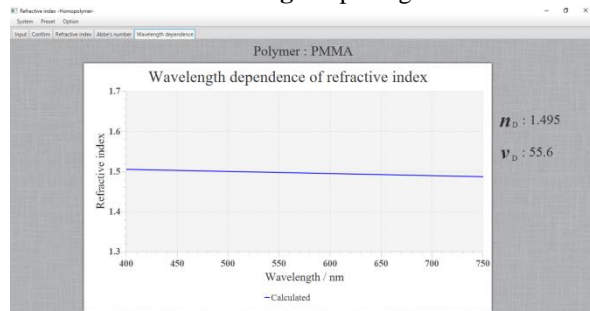


Fig.2 Refractive index prediction system of transparent polymer.

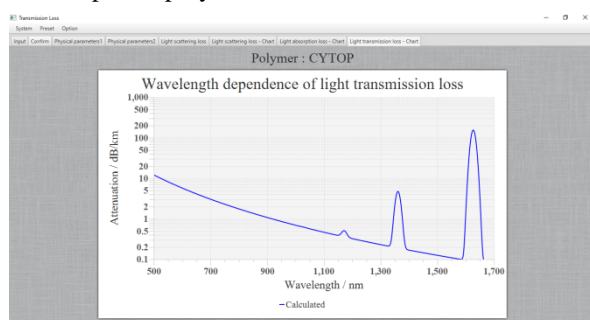


Fig. 3 Transmission loss prediction system of optical polymer.