

含硫黄透明ポリマーの屈折率予測に関する研究

Refractive index prediction of sulfur-containing transparent polymers

応用化学生物学科 谷尾宣久 (Nori-hisa TANIO)

Refractive index of transparent polymers is determined by the chemical structure of the repeat unit. We clarified uncertain the atomic refraction and atomic dispersion value for sulfur. The system which predicts refractive index of polymers is reported.

ポリマーの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、屈折率が計算できる屈折率予測システムの開発を行っている。屈折率を計算する際に基盤となる“原子屈折、原子分散値”および“ポリマー固体中での分子鎖パッキング状態”を決定、解明することにより、様々な化学構造、結合様式をもつ透明ポリマーに対応できる予測システムに発展させることができる。本研究では、高屈折率化に有利となる硫黄 (S) の原子屈折、原子分散を解明し、含硫黄透明ポリマーの屈折率予測を可能にした。

Fig.1 に示すようにポリマーの屈折率を化学構造から計算するためには原子屈折および原子分散値が必須である。原子屈折および原子分散値は、解明したい原子を含むポリマーまたは液体化合物の各波長における屈折率と密度から決定できる。試料の屈折率と密度から Lorentz-Lorenz 式に基づき化合物の分子屈折が求められ、そこから既に判明している原子屈折を差し引くことで、解明したい原子についての原子屈折が決定される。硫黄 (S) の原子屈折および原子分散値を屈折率精密測定により決定した。解明した硫黄の原子屈折 ($[R]_D$) および原子分散 ($[R]_F - [R]_C$) を Table.1 に示す。Table.2 に示すように、解明した硫黄の原子屈折、原子分散値より計算された含硫黄透明ポリマーの屈折率 n_D およびアッペ数 v_D は、報告値とよく合い、解明した原子屈折及び原子分散値の信憑性が確認された³⁾。

【謝辞】本研究で用いた硫黄化合物の一部は、ダイセル化学㈱より提供していただいた。

- 1) Y.Suzuki, T.Higashihara, S.Ando, M.Ueda. *Polym.J.*, **41**, 860(2009)
- 2) R.Okutsu, Y.Suzuki, S.Ando, M.Ueda. *Macromolecules.*,**41**, 6165(2008)
- 3) 平井郁乃、谷尾宣久：「含硫黄透明ポリマーの屈折率予測に関する研究」、第 49 回高分子学会北海道支部研究発表会講演要旨集、P41、平成 27 年 1 月、札幌

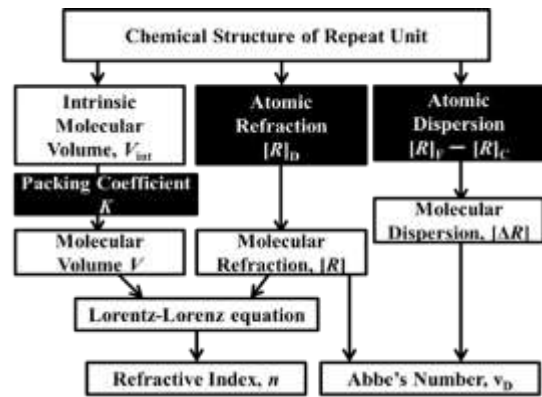


Fig 1. Estimate of refractive index (n) and Abbe's number (v_D) of transparent polymer from the chemical structure of repeat unit.

Table 1 Atomic refraction ($[R]_D$) and atomic dispersion ($[R]_F - [R]_C$) for sulfur.

Atom	Binding mode	$[R]_D$	$[R]_F - [R]_C$
Sulfur		8.314	0.089
		7.174	-0.026
		6.756	0.255

Table 2 Refractive index (n_D) and Abbe's number (v_D) for polysulfone.

polymer	n_D		v_D	
	Cal.	Rep.	Cal.	Rep.
BMM/DVS [®] 	1.70	1.65	39.5	42.6
DVS/DT-DT [®] 	1.64	1.69	39.5	48.6