

# 透明ポリマーの屈折率予測システムの開発

## Refractive Index Prediction System of Transparent Polymer

バイオ・マテリアル学科 谷尾宣久 (Norihisa TANIO)



Refractive index of optical polymer glass is determined by the packing of molecular chain and the chemical structure of the repeat unit. We clarified uncertain the atomic refraction and atomic dispersion value experimentally. The system which predicts refractive index of polymer is reported.

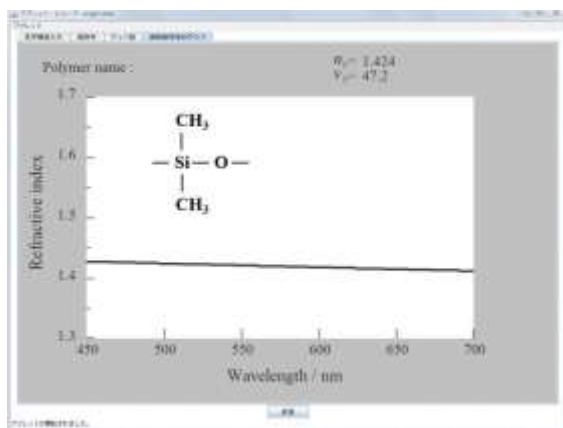
透明ポリマーの繰り返し単位の化学構造のみから屈折率およびその波長依存性（アッペ数）を計算する屈折率予測システムの開発を行っている。未解明の原子屈折、原子分散値を実験的に解明し、解明した値を計算システムに組み込むことにより、様々な化学構造、結合様式をもつ透明ポリマーに対応できる予測システムに発展させた。

ポリマーの屈折率およびアッペ数を計算するためには、原子屈折および原子分散値が必須である。我々は、“化学便覧基礎編改訂4版”（日本化学会編、丸善、1993）に掲載されている原子屈折および原子分散値を基に透明ポリマーの屈折率予測システムを作成している。しかしながら、光学応用にとって重要であると思われる原子および原子団でありながら、原子屈折値が明らかになっていない原子が数多くある。本研究では、透明ポリマーの屈折率予測に必要な原子および原子団について、原子屈折および原子分散値をポリマーの屈折率精密測定から決定した。具体的には、低屈折率化に有利となるフッ素（F）、ポリアミドを構成する窒素（N）、シリコン樹脂を構成するケイ素（Si）などの原子、フェニル基などの原子団の原子屈折および原子分散値を決定した。解明した値をシステムに組み込むことで屈折率予測システムの適用性を高めた。現在、予測システムに組み込まれて

いる原子屈折および原子分散値を Table 1 に示す（\*付の値が本研究で解明した値である）。ケイ素の原子屈折及び原子分散値をシステムに組み込み、ケイ素ポリマーの屈折率を計算した。システムの計算結果画面を Fig.1 に示す。値の信憑性についての詳細を近々報告する予定にしている。  
 <文献>谷尾宣久, Polyfile, 50(587), 31(2013)  
 <謝辞>本研究は科学研究費助成事業（基盤研究C）により実施された。

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

Atom	Binding mode	$[R]_D$	$[R]_F - [R]_C$
Carbon	>C<	2.418	0.025
Benzene ring		25.07*	0.730*
		24.11*	0.720*
Double bond	=	1.733	0.138
Triple bond	≡	2.336	0.114
Hydrogen	-H	1.100	0.023
Oxygen (ether)	-O-	1.643	0.012
Oxygen (carbonyl)	=O	2.211	0.057
Nitrogen	-N-	2.410*	0.060*
	-N=	4.100	0.160
Fluorine	-F	1.100*	0.010*
Chlorine	-Cl	5.967	0.107
Bromine	-Br	8.865	0.211
Sulfur (dyad)	-S-	7.800	0.220
Silicon	-Si-	5.820*	0.120*



**Fig.1** Refractive index prediction system of optical polymer.