

高分子のアッベ数計算

2025年9月1日

概要

屈折率は同じ物質でも光の波長により異なる特性があり、この違いはメガネのレンズの性能などに影響します。屈折率の波長による変化の分散の指標としてアッベ数が使われ、アッベ数が大きいほど分散が小さくなり、レンズの色のにじみが小さくなります。本書では複数の高分子のアッベ数を量子化学計算から算出します。

計算手順

量子化学計算により入力指定した波長の分極率 α を求め、Lorentz-Lorenzの式に代入して屈折率 n を算出します。

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4\pi \rho N_A}{3M} \alpha$$

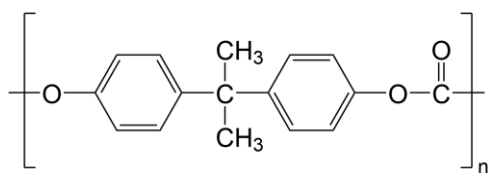
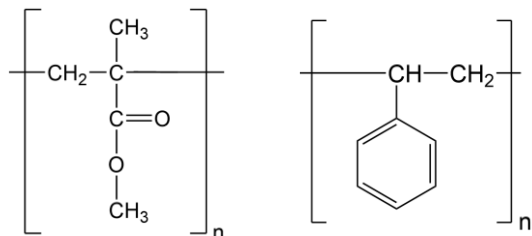
ρ は高分子の密度、 M は量子化学計算を行う分子の分子量、 N_A はアボガドロ数です。得られた屈折率から次の定義のアッベ数を算出します。

$$V_D = \frac{n_D - 1}{n_F - n_C}$$

n_D : 589.3 nmに対する屈折率、 n_F : 486.1 nmに対する屈折率、 n_C : 656.3 nmに対する屈折率です。

計算条件

PMMA(ポリメチルメタクリレート)、ポリスチレン、ポリカーボネートの3つの高分子について、末端を水素原子で修飾した構成単位の単量体の構造最適化をwB97XD/6-31G*レベルで、589.3nm、486.1nm、656.3nmにおける分極率をwB97XD/6-311+G**レベルでGaussianプログラムを使って計算しました。屈折率算出において、高分子の密度は実験値を採用しました。もし実験値が無い場合は、分子動力学(MD)計算から算出することができます。



計算結果

量子化学計算の結果から得られた屈折率及びアッベ数を表1及び2にまとめました。単量体の計算にもかかわらず、高分子の屈折率及びアッベ数は実験をよく再現しています。

表3に基底関数ごとの屈折率をまとめました。分極率はエネルギーの電場による2階微分により求めるため、一般的に構造最適化よりも大きな基底関数が必要になります。

表1 各高分子の屈折率

	波長 (nm)	計算値	実験値 [1]
PMMA	589.3	1.498	1.493
	486.1	1.504	
	656.3	1.496	
ポリスチレン	589.3	1.619	1.592
	486.1	1.613	
	656.3	1.634	
ポリカーボネート	589.3	1.618	1.585
	486.1	1.612	
	656.3	1.635	

表2 各高分子のアッベ数

	計算値	実験値[2]
PMMA	56.9	58
ポリスチレン	29.2	30
ポリカーボネート	26.1	31

表3 基底関数ごとのD線(589.3nm)の屈折率

	6-31G*	6-311G**	6-311+G**
PMMA	1.420	1.458	1.496
ポリスチレン	1.503	1.555	1.614
ポリカーボネート	1.518	1.559	1.612

Winmostarを用いたアッベ数の算出手順については[無料のチュートリアル資料](#)において細かく紹介されており、初心者の方でも実施できるようになっています。通常、分子構造作成、出力ファイルから必要なデータ抽出は煩雑で大きな作業コストを伴いますが、Winmostarを用いるとマウス操作で手軽に実行でき、作業を大幅に効率化できます。

Winmostarバージョン: 11.12.4

対応ソルバ: Gaussian

引用: [1] Sci. Data 11, 94 (2024).

[2] 透明ポリマーの屈折率制御、
季刊化学総説 No.39 (1998).