

利用事例紹介 7

屈折率の算出

量子化学計算で得られる数値と屈折率に関連した関係式を利用して、屈折率の算出を行いました。

ローレンツ-ローレンツ式

$$\frac{n^2-1}{n^2+2} = \frac{4\pi}{3} N\alpha = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{\rho N_A}{M} \alpha = \frac{[R]}{V_0}$$

微視的な分極率と屈折率との関係を示す式

(n: 屈折率、 α : 分極率、N: 単位体積あたりの分子数 ρ : 密度 N_A : アボガドロ数 M: 分子量)

分極率の値と密度がわかれば、屈折率を計算可能



分極率を量子化学計算で算出
(密度は実測値を利用)

典型的な化合物での計算結果

化合物	屈折率	
	計算値#	実測値
アセトニトリル	1.261	1.344
酢酸エチル	1.295	1.372
トルエン	1.386	1.496
アニリン	1.438	1.586
m-ニトロトルエン	1.441	1.541

SPARTAN B3LYP / 6-31G* (without diffuse function)

計算値は実測値より少し小さくなっていますが、数値の変化傾向は反映できています。光学材料等の開発に活用できます。