

## ジフェニルアセチレン誘導体の二光子吸収における二つの置換基導入の効果

(青学大理工) ○渡邊 翔太・柏原 航・鈴木 正

Effects of Two-Substituents on Two-Photon Absorption for Diphenylacetylene Derivatives  
(College of Science and Engineering, Aoyama Gakuin University) ○Shota Watanabe, Wataru Kashihara, Tadashi Suzuki

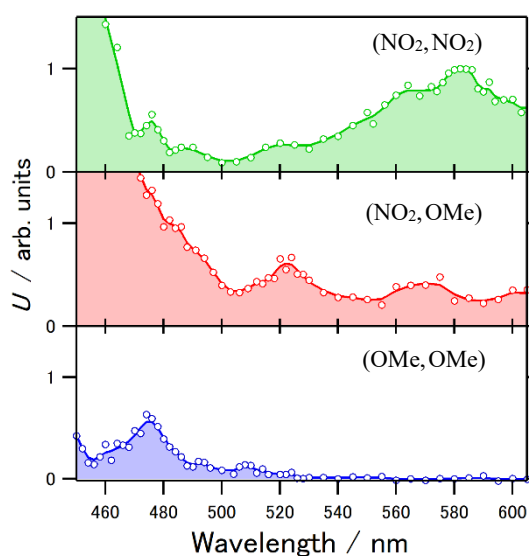
Two-photon absorption can be applied to three-dimensional optical modeling, photodynamic therapy, and so on. Diphenylpolyynes are attracting attention as building blocks for two-photon absorption materials. In this study, two-photon absorption spectra of diphenylacetylene (DPA) derivatives with two substituents, -NO<sub>2</sub> and -OMe, at the 4,4'-position were successfully obtained by optical-probing photoacoustic spectroscopy (OPPAS). The signals of DPA derivatives at their peak depended on the kinds of the substituents. Two-photon absorption spectra of DPA derivatives were simulated on the basis of quantum chemical calculations. Calculated spectra agreed well with the experimental ones. Based on theoretical results, dominant elements determining two-photon absorption cross-section were discussed.

**Keywords:** Optical-probing photoacoustic spectroscopy; Two-photon absorption; Substituent effect

二光子吸収は三次元光造形や光線力学療法などへの応用が期待されている。二光子吸収材料の基本骨格としてジフェニルポリインが注目されている。本研究では、4,4'位に電子求引基もしくは電子供与基をもつジフェニルアセチレン (DPA) 誘導体の二光子吸収スペクトルを光検出光音響分光 (OPPAS) 法を用いて調べた。

Fig.1 に DPA 誘導体の二光子吸収スペクトルを示す。信号強度  $U$  は二光子吸収断面積  $\sigma^{(2)}$  に比例する。導入した置換基の種類によって二光子吸収スペクトルの形および二光子吸収ピークでの信号強度が異なった。

次に、各 DPA 誘導体について量子化学計算を行い、その結果をもとに二光子吸収スペクトルシミュレーションを行った。シミュレーション結果は実験結果を良く再現した。この計算結果を用いて二光子吸収ピークでの  $\sigma^{(2)}$  を支配的に決めている因子について議論した。



**Fig. 1** Two-photon absorption spectra of DPA derivatives (green; (NO<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub>)-DPA in 1,4-dioxane, red; (NO<sub>2</sub>, OMe)-DPA in methanol, blue; (OMe, OMe)-DPA in methanol).