

## 二つの電子供与/求引基を有するジフェニルアセチレン誘導体の二光子吸収特性

(青学大院理工<sup>1</sup>・桜美林大リベラルアーツ<sup>2</sup>) ○渡邊 翔太<sup>1</sup>・尾崎 渚<sup>1</sup>・磯崎 輔<sup>2</sup>・柏原 航<sup>1</sup>・鈴木 正<sup>1</sup>

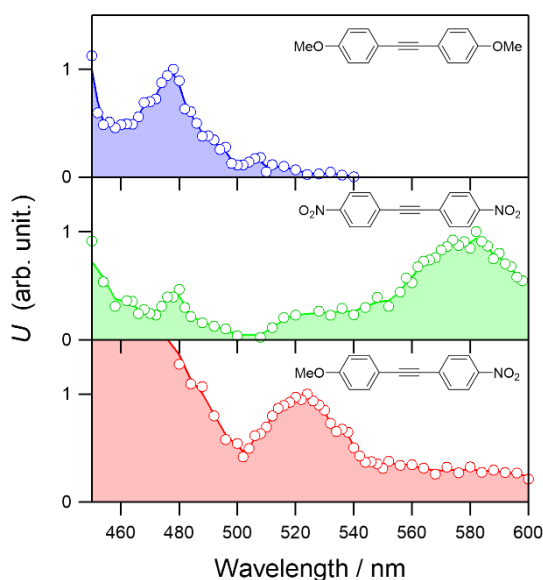
Two-Photon Absorption Properties for Donor- and/or Acceptor-Disubstituted Diphenylacetylene Derivatives (<sup>1</sup>Graduate School of Science and Engineering, Aoyama Gakuin University, Japan, <sup>2</sup>Division of Natural Sciences, J. F. Oberlin University, Japan) ○ Shota Watanabe<sup>1</sup>, Nagisa Ozaki<sup>1</sup>, Tasuku Isozaki<sup>2</sup>, Wataru Kashiwara<sup>1</sup>, Tadashi Suzuki<sup>1</sup>

Two-photon absorption for diphenylacetylene (DPA) derivatives with two substituents at the 4,4'-positions was investigated by optical-probing photoacoustic spectroscopy. The two-photon absorption spectra and two-photon absorption cross-sections for DPA derivatives were successfully obtained. Two-photon absorption spectra for DPA derivatives were simulated with quantum chemical calculations. According to the experimental and theoretical results, effects of two substituents on two-photon absorption properties will be discussed in detail.

**Keywords :** Two-photon Absorption; Two-photon Absorption Cross-section; Quantum Chemical Calculation; Optical-probing Photoacoustic Spectroscopy, Diphenylacetylene

非共鳴二光子吸収は、始状態と終状態のエネルギー差よりも低いエネルギーの光子を二つ同時に吸収して基底状態から励起状態に遷移する過程である。高効率二光子吸収材料の創出のためにコンパクトな分子系の二光子吸収特性についての知見が必要不可欠である。そこで本研究では、二光子吸収材料として注目されているジフェニルポリインの最小単位であるジフェニルアセチレン (DPA) の 4,4' 位に同じ置換基を導入した DPA-RR、および異なる置換基を導入した DPA-RR' の二光子吸収特性における置換基効果について実験結果および量子化学計算の両面から調べた。

Fig. 1 に DPA 誘導体の二光子吸収スペクトルを示す。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状は大きく異なった。量子化学計算による解析から、対称心を持つ分子 (DPA-RR) と持たない分子 (DPA-RR') で二光子吸収を強める因子が異なることが分かった。発表では、詳細な議論を行う。



**Fig. 1** Two-photon absorption spectra for DPA-OMeOMe, DPA-NO<sub>2</sub>NO<sub>2</sub>, and DPA-OMeNO<sub>2</sub> in dioxane.