

カタストロフィー理論を用いたフォトクロミック単結晶の屈曲現象の数理モデル化

Mathematical modeling of bending phenomena in photochromic single crystals by catastrophe theory

東大情報理工¹, 山梨大工², 龍谷大理工³

○(D)鈴木洗胤¹, 内山和治², 内田欣吾³,

ニコラショヴェ¹, アンドレレーム¹, 堀崎遼一¹, 堀裕和², 成瀬誠¹

Univ. of Tokyo¹, Univ. of Yamanashi², Ryukoku Univ.³,

°Hirotsugu Suzui¹, Kazuharu Uchiyama², Kingo Uchida³,

Nicolas Chauvet¹, André Röhm¹, Ryoichi Horisaki¹, Hirokazu Hori² and Makoto Naruse¹

E-mail: hirotsugu_suzui@ipc.i.u-tokyo.ac.jp

我々は、光と物質の合成系を基礎とした知的機能構築の実現に向け、フォトクロミックジアリールエテン(DAE)単結晶の光異性化に着目した研究を行っている[1]。DAE 結晶は消色光の可視光と着色光の紫外光で可逆的な光異性化を起こすことが知られる物質であり、光照射による光学特性の変化のみならず、屈曲、ジャンプ、非可逆的破壊、急峻な溝構造形成などの多様な動的形態形成を伴う現象を示す点も特徴である[2-4]。しかしこのような現象の統一的な記述は未だなされておらず、現象理解と新機能創成に向けた数理モデル構築は重要である。そこで本研究では物質の形態形成を 7 種類に分類するトムのカタストロフィー理論を用いて統一的な記述を目指した[5]。本研究では、屈曲とクラックの発生の二つの現象が生じる単結晶に着目した(Fig. 1(a))。現象が、分子内の異性化に伴う歪みと、異性化の繰り返しによる不整合によるものであると想定し、カタストロフィー理論におけるツバメの尾のカタストロフィーを採用し数理モデル化した(Fig. 1(b))。その結果、本モデルによって、屈曲、クラック発生の現象の記述のみならず、結晶の非可逆的破壊現象についても同一モデルで記述可能であることが分かった(Fig. 1(c))。この 2 つの現象の記述は、カタストロフィー理論による統一モデル構築の効果の一例であるとともに、類似の形態形成に関係した全く異なるシナリオの設計や未踏・未活用な動作領域の明示、さらには新たな分子設計の提言の可能性を示唆している。

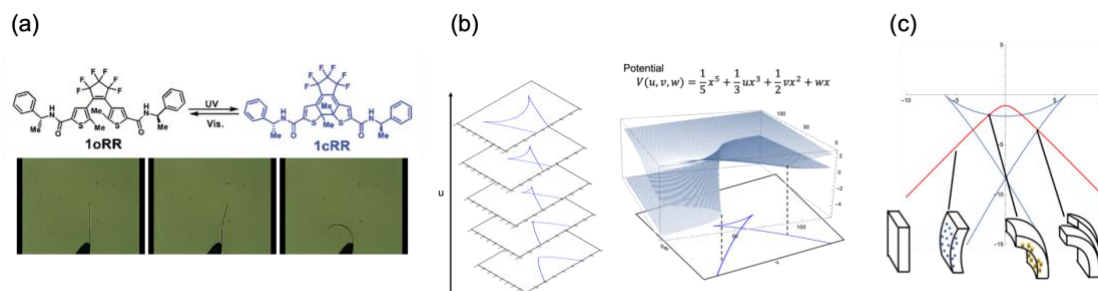


Fig. 1(a) Molecular structures and bending phenomena. **(b)** Swallow-tail catastrophe and parameter change. **(c)** Modeling of bending phenomena using the swallow-tail catastrophe and corresponding a motion curve.

謝辞 本研究の一部は JST CREST(JPMJCR17N2)JSPS 科研費(JP20H00233)の支援を受けた。

参考文献 [1] R. Nakagomi, et al., Appl. Phys. A, **124**, 10 (2018). [2] E. Hatano, et al., Chem. Eur. J., **22**, 12680 (2016). [3] A. Fujimoto, et al., Chem. Sci., **11**, 12307 (2020). [4] H. Suzui, et al., Appl. Phys. Express, **14**, 075003 (2021). [5] T. Poston and I. Stewart, Catastrophe Theory and its Applications (Dover Publications, New York, 1978).