

## 定常光照射下で自励振動するアゾベンゼン分子集合体にみられる分子レベル継続ダイナミクスの集団化と巨視的ダイナミクス

(北大院理<sup>1</sup>・北大電子研<sup>2</sup>) ○景山 義之<sup>1</sup>・小林 康明<sup>2</sup>・矢崎 大介<sup>1</sup>・池上 智則<sup>1</sup>  
 Interplay between collective dynamics of molecular-level reaction and self-oscillatory macroscopic transformation in an azobenzene derivative assembly under steady light irradiation (<sup>1</sup>*Faculty of Science, Hokkaido University*, <sup>2</sup>*Research Institute for Electronic Science, Hokkaido University*) ○Yoshiyuki Kageyama,<sup>1</sup> Yasuaki Kobayashi,<sup>2</sup> Daisuke Yazaki,<sup>1</sup> Tomonori Ikegami<sup>2</sup>

Self-organization is the phenomenon where excited microscopic dynamics are converted into macroscopic dynamics. We reported self-oscillatory flipping motion of an azobenzene crystal, the motion of which is driven by the photoinduced repetitive isomerization of the azobenzene derivative. However, there are huge difference in size between the millimeter length crystal and the nanometer length molecule, and therefore, the mechanism for realizing the spatio-and-temporally patterned dynamics is not self-evident. In this work, we construct a simple mathematical model that demonstrates the periodic deformation of an elastic plate object, in which repetitive photoisomerization and crystalline phase transition are incorporated, as observed experimentally. By employing a kinetic equation which depend on the accepted light intensity ( $I$ ) and the phase-state ( $\phi$ ) (eq. 1), a Landau's function for a mean-field approximation for the first order phase transitions (eq. 2), and an equation for the spring elasticity between the elements, the model plate showed periodic flipping motion like as the observed crystal. Self-organizing behavior across the three levels of hierarchy is included in the modeled dynamic.

**Keywords :** *Self-organization, Hierarchization, Collective Dynamics, Molecular Motor, Discrete Mathematical Model*

自己組織化とは、エネルギー消費を伴うミクロなダイナミクスによって、マクロなダイナミクスが発現する現象である。我々は、定常光照射下で継続するアゾベンゼンの光異性化反応によって駆動される、アゾベンゼン含有結晶の自励振動現象を報告してきた。しかし、ナノメートルサイズの分子のダイナミクスが、どのようにミリメートルサイズの結晶の時空間秩序をもった運動を実現しているかは自明ではない。この解決を目指し、本研究では、光異性化と結晶相転移が組み込まれた弾性を有する板状物体の周期的変形を示す粗視化数理モデルを構築した。結晶の微視的領域における相状態( $\phi$ )と受容光強度( $I$ )に依存した光異性化反応速度式 (式 1)、ランダウの平均場近似を転用した異性化率( $\chi$ )と  $\phi$  との関係式 (式 2)、 $\phi$  に依存した板の自発曲率等を設定したモデルにおいて、粘弾性を持つ板は、観測結晶と同様に周期的な振動運動を示した。ここには、二つの階層にまたがる自己組織化挙動が含まれている。

$$\frac{d}{dt}\chi = (\alpha(\phi) - (\alpha(\phi) + \beta(\phi))\chi)I \quad (1)$$

$$f(\phi, \chi) = \frac{\Lambda(\chi)}{2}\phi^2 + \frac{B}{4}\phi^4 + \frac{C}{6}\phi^6 \quad (2)$$

謝辞: プログラミングと数値計算については、清水敏明氏 (WDB(株)) の協力を受けて行った。