

# 2024 年度夏学期 第6回 駒場物性セミナー

## 柔らかい多孔性結晶における分子吸脱着転移

講師 光元 亨汰 氏 (東大総合)

日時 2024年 6月 7日(金) 午後 4 時 50 分-6 時 15 分程度

場所 16号館827及びオンライン

-オンライン参加の方へ:

Zoom アドレスはメーリングリストで配布します。メーリングリストに参加していない方は駒場物性セミナーの HP から参加登録をお願いします。

金属イオンに有機分子が配位結合して構成される結晶は金属有機構造体 (Metal-Organic Framework, MOF) と呼ばれ、ガス貯蔵・分離等の機能を持つ多孔性材料として注目されている。中には、分子吸着によって大きな変形を示すほど柔らかな結晶構造を持つ物質も多く存在する[1]。この時、吸着はラングミュア的ではなく、大きなヒステリシスを伴う強い一次転移的な振る舞いを示す。この現象を利用した工学的な応用開発が盛んに行われている。しかし、何故このような協力現象が生じるかについての理解については不十分なままであった。我々は、分子吸着によって細孔の大きさと硬さが変化するというに着目し、統計力学的なモデルを構築した[2]。そして数値シミュレーションを行った結果、このモデルがヒステリシスを伴う吸脱着転移を再現することがわかった。また、吸着質の吸着分布が弾性の不均一性に支配されていることがわかり、これが大きなヒステリシスを生み出すことを見出した。本セミナーでは、上記について詳細に議論するとともに、このモデルが示す超格子秩序や[3]、吸着時に示す非平衡ダイナミクス[4]についても議論したい。

[1] S. Horike, S. Shimomura, and S. Kitagawa, Nat. Chem. 1, 695–704 (2009).

[2] K. Mitsumoto and K. Takae, Proc. Nat. Acad. Sci. 120, e2302561120 (2023).

[3] K. Mitsumoto and K. Takae, Phys. Rev. Research 6, L012029 (2024).

[4] K. Mitsumoto and K. Takae, in preparation.

○物性セミナーのページ 「駒場物性セミナー」で検索！

物性セミナー世話人 加藤雄介 塩見雄毅 福島孝治 簗口友紀

