

大学院集中講義

講義名: 物理化学特別講義 I(1 単位) (R0315,R0316)

講師: 高江 恭平 氏(東京大学・講師)

タイトル: ソフトマターにおける相転移ダイナミクス

日時: 10月10日(火) 3・4・5

17日(火) 3・4・5

24日(火) 3・4

場所: 12号館106室

履修申請用 Forms URL

履修申請用 Forms QR

<https://forms.office.com/r/0WHNSRp7UU>



講義要旨:

ソフトマターとは、力学的にやわらかな応答を示す物質群の総称である。典型的には、高分子・液晶・コロイド溶液のような、複雑な内部構造をもつ液体を意味するが、形状記憶合金や多孔性結晶などの結晶も、複雑な内部構造のためにやわらかな応答を示し、広い意味でソフトマターの範疇に含まれる。本講義ではそのような、力学的なやわらかさを内包した物質の相転移について、概説する。まず、相転移の熱力学、とくに秩序変数を用いた現象論(ランダウ理論)をもとに、相転移を記述する枠組みについて解説したのち、ダイナミクスについて解説する。相転移の動的過程においては、液体であれば流動、固体であれば弾性変形との結びつきのために、豊富な物性を示す。流体力学と弾性論を復習しつつ、これらの現象を現象論の枠組みで記述するための方法論について解説し、ソフトマターにおける複雑な現象を、単純なモデルにより取り扱う技巧を習得することを目的とする。

内容:

第1回 イントロダクション: ソフトマターとしての液体と固体

第2回 相転移の熱力学

第3回 ソフトマターにおける相転移

第4回 非平衡熱力学と流体力学・弾性論

第5回 液体における相転移のダイナミクス

第6回 ソフトマターのダイナミクス

第7回 ソフトクリスタルにおける相転移

第8回 セミナー: ソフトポーラスクリスタルの統計物理学

セミナー題目: ソフトポーラスクリスタルの統計物理学

要旨：

ソフトポーラスクリスタルとは、力学的にやわらかい骨組みをもつ多孔性結晶のことであり、ガス分子の吸着・脱着と格子変形が結びつくことで、吸着剤やガス分離・貯蔵などに、機能を発揮する材料として注目されている[1]。しかし、ソフトポーラスクリスタルに分子が吸着される時、ホストとなる多孔性結晶の、硬さと格子定数が変化することが、実験的に知られているが、これらが、吸着・脱着転移や、吸着分子の空間的な分布におよぼす影響については明らかにされていなかった。本研究では、分子吸脱着に伴う格子の変形・硬さの変化を取り入れた統計力学モデルを構築し、数値シミュレーションにより、この影響を明らかにすることを目指した[2]。その結果、ホスト結晶の弾性を媒介した有効的な相互作用が、吸着分子間に働くこと、および、吸着分子が局所的に格子の硬さを変えるために生ずる弾性不均一によって、分子の分布が非等方になることを発見し、ヒステリシス制御につながることを明らかにした。

参考文献：

- [1] S. Horike, S. Shimomura, and S. Kitagawa, *Nature Chem.* 1, 695 (2009).
- [2] K. Mitsumoto and K. Takae, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 120, e2302561120 (2023).