

令和 2 年 6 月 19 日現在

機関番号：13701

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2019

課題番号：16K05038

研究課題名(和文) フォノン工学におけるメタマテリアル複合材料の応用に関する計算科学的研究

研究課題名(英文) Computer simulations of acoustic metamaterial composites in phonon engineering

研究代表者

寺尾 貴道 (Terao, Takamichi)

岐阜大学・工学部・教授

研究者番号：40271647

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：固体材料中に共鳴構造を含む音響メタマテリアル複合材料に関して、計算機シミュレーションに基づく研究を行い、その波動伝搬特性について調べた。具体的には、共鳴粒子をランダムに分散させた三次元複合構造体における振動状態密度、及び波の透過特性について明らかにした。その結果、異なる種類の共鳴粒子を導入する事により、系の振動スペクトル中に複数のバンドギャップを出現させる事が可能である事を示した。また、近年その性質が注目されているグラニューラー格子を用いて、非線形音響メタマテリアル複合材料に関する研究も行った。上記の音響メタマテリアル複合材料の解析に適した数値解析手法の開発を行い、その有効性を示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

音響メタマテリアルにおいては、遮音・制振という観点から実用上有効であることが期待されている。本研究では、ランダム音響メタマテリアル複合材料という新たな観点から、材料における性能や設計の自由度を向上させる事に成功している。本研究課題は計算科学の立場からのアプローチであったが、海外におけるこの分野の最近の研究事例においては、機械工学や音響学などの分野における研究者・研究グループによる実験研究も活発に行われている。今後、これら複数の研究分野間における研究成果が相互に波及する事によって更に材料の集積化が進み、より高度な性能を有するメタマテリアル研究へと発展する事が期待される。

研究成果の概要(英文)：Acoustic metamaterial composites were investigated by computer simulations. Vibrational properties of elastic composites containing a mass-in-mass microstructure embedded in a solid matrix are numerically studied. Using a lattice model, the vibrational density of states in three-dimensional composite structures where resonant particles are randomly dispersed was investigated. By dispersing resonant particles in the system, a sonic band gap appears. Such band gap can be introduced in a desired frequency regime, and the width of the band gap can be also controlled. In addition, multiple sonic band gaps can be realized using different species of resonant particles. These results give us an useful method to fabricate devices that can inhibit the propagation of elastic waves with specific frequencies using acoustic metamaterials.

研究分野：計算物理工学

キーワード：メタマテリアル 大規模数値シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

近年、様々な種類のメタマテリアルに関する特性およびその応用について注目されている。一般にメタマテリアルとは、波の波長よりも小さなスケールの内部構造を有する、新しい種類の人工材料である。この様な人工材料は、自然界に存在する天然の材料では容易に観察されない異常な挙動を示す。一連の研究における初期の段階では、主に誘電率と透磁率がともに負の値となり、その結果材料の屈折率も負となる可能性のある電磁メタマテリアルに関して、理論・実験の両面から研究が行われてきた。その結果、この様な材料が実現すると電磁波・光波の伝搬において、通常材料では現れない様な特徴的な物理現象の出現が期待される事が明らかとなってきた。

音波と電磁波の間の類似性(アナロジー)という観点から、音響メタマテリアル、すなわち負の質量密度や負の弾性率を有する材料の研究、およびこの様な媒質中における音波や弾性波の伝搬特性に興味を持たれている。電磁メタマテリアルの場合と同様に、音響メタマテリアルにおいても、自然界における天然の材料においてこの様な性質を有するものは知られていない。その為、この点に関して(特定の振動数領域において)負の質量密度を実現するために、微小な共鳴構造を利用して音響メタマテリアルを人工的に実現する、というアプローチが採用されている。

本研究代表者はこの分野の問題に関して、1次元的な音響メタマテリアル多層膜の系における研究を行い、系を伝搬する弾性波の分散関係について既に明らかにしている。また、音響メタマテリアルを用いた二重障壁系に関して、弾性波の透過率に関する性質についても明らかにしてきた。本研究課題においては、より高度な音響メタマテリアル複合材料、すなわち通常の弾性体と音響メタマテリアルを組み合わせた系に関する物理的性質に着目して、計算科学の立場から明らかにした。

2. 研究の目的

音響メタマテリアルに関しては、固体あるいは流体を構成要素とする様々な人工材料における物理的性質が調べられており、いずれもその音響特性において特徴的な性質を示す事が明らかにされている。この様な音響メタマテリアルと通常の弾性体を組み合わせる事により、単一の音響メタマテリアルにはない複合材料特有の性質が期待され、また機能性材料としての物質設計及びその応用に関する可能性も広がる事が期待される。

また近年、硬い弾性体粒子が接触して周期的に配置した、グラニューラー鎖の性質に興味を持たれている。この様な粒子間に働くヘルツ相互作用により、その動的振動応答は系の非線形性により特徴的な振る舞いを示す事が期待される。この様な系は、波動伝搬特性への興味だけではなく、弾性波フィルターや音響整流器などの工学材料への応用が期待されている。従来の研究においては、主に1次元系(グラニューラー鎖)の研究が行われてきたが、本研究課題においては高次元系(グラニューラー格子)における性質について調べた。この様な粒子間の非線形接触によって構成されるグラニューラー格子において、音響メタマテリアルとしての内部構造を組み合わせる事により、新たな非線形音響メタマテリアルを設計する事が可能となる。

従来の計算機シミュレーションにおいては、弾性波、あるいは電磁波に関する数値シミュレーション手法が既に発達しており、その代表的な解析手法は数多く知られている。しかし、一般にメタマテリアル複合材料における数値シミュレーション解析を行う上では、従来の計算手法をそのまま適用する事が困難である、或いは精度の良い結果を得る事が難しい事例に遭遇する事も珍しくない。また、元々メタマテリアルは材料中に複雑な内部構造を内包している系であり、本格的な解析を行おうとすると非常に大規模な計算機シミュレーションは不可欠となる。この点に関して、メタマテリアル複合材料に適した大規模シミュレーション手法の開発を行った。

3. 研究の方法

本研究課題においては音響メタマテリアルに関して、主に2種類の理論モデルに基づく研究を行った。一つは、高次元系における音響メタマテリアルの音響特性を調べる為の、格子モデルに基づく解析を行った。実際の解析においては、ランチョス法を用いた大規模固有値解析に基づき、系の振動状態密度における振動数依存性、特に振動スペクトルにおけるギャップに関する高精度な解析を行った。また、特定の振動数の波が入射した場合における時間領域解析も行い、弾性波の透過率における振動数依存性についても明らかにした。

もう一つは、グラニューラー格子を用いて実現した音響メタマテリアルの物理的性質に関する解析を行った。本研究では、従来の研究で主に調べられている1次元系(グラニューラー鎖)ではなく、高次元系においてこのような非線形性の強い弾性体の構造中に、共鳴構造を導入して新たな非線形音響メタマテリアルを取り上げ、系の時間相関関数に対するスペクトル解析を行う事によって、系を伝搬する弾性波の特性について数値的に明らかにした。

4. 研究成果

本研究課題を遂行して得られた主な研究成果は、下記における(1)～(4)の通りである。

(1) ランダム音響メタマテリアル複合材料に関する音響特性

音響メタマテリアルにおいては、遮音・制振という観点から実用上有効であることが期待されている。従来の実験的研究においては、このような音響メタマテリアルを実現する上では、力学的な共鳴現象を示す物体を周期的に配置した人工構造体が作成されてきた。また理論解析においても同様に、空間的に周期構造を有するモデルの解析、具体的には分散関係の解析などがなされてきた。しかし、音響メタマテリアルはフォノン結晶と比較すると、弾性波に関するギャップが出現するという点に関しては一見似ているが、振動スペクトルにおけるギャップが発生する物理的な起源は全く異なる。具体的には、フォノン結晶におけるバンドギャップは、系の空間的な周期性に基づくブラッグ反射によるものであるが、音響メタマテリアルにおいては(少なくとも今までの研究事例においては)共鳴現象によって引き起こされるものであり、空間的な周期構造の有無は本質的ではないと考えられる。また材料全体に共鳴体を充填するのではなく、もし少数の共鳴体を系全体に分散させた状態においても、ソニック・バンドギャップが現れるのであれば、機能性材料における設計の自由度を著しく高める事が期待される。

このような観点から本研究では、ランダムな構造を有する3次元音響メタマテリアル複合材料に関する計算機シミュレーションを行い、その振動特性について定量的に明らかにした。この問題に関連して、共鳴体に相当するユニットを系の中にランダムに分散させた理論モデルを提案した。図1は、3種類の異なる共鳴振動数を有する共鳴体を系の中に分散させて、系の振動状態密度に関する振動数依存性について計算した結果の例である。3通りの共鳴振動数に対応して、振動スペクトルにおける明確なギャップが3か所に表れている様子が観測されている。次に、そのユニットに関する数密度を系統的に変化させる事により、系の振動状態密度における振る舞いについて数値的に明らかにした。その結果、音響メタマテリアルにおいて共鳴現象を引き起こすユニットは、系全体に充填されておらずその数密度がある程度小さくても、振動状態密度において明確なギャップが出現する様子が観測された。また系に添加した共鳴体の数密度が高くなると、系の振動スペクトルにおけるギャップ幅が広がる事も明らかとなった。

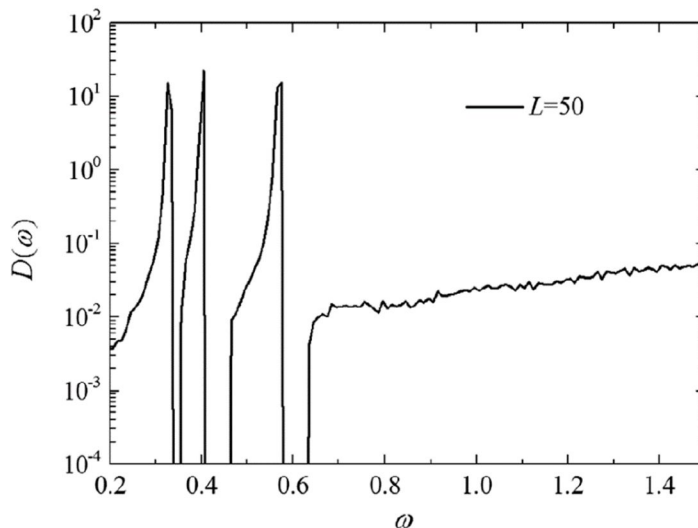


図1

3次元音響メタマテリアル複合材料における振動状態密度 $D(\omega)$

(2) 非線形音響メタマテリアル複合材料の物理的性質に関する研究

近年、グラニューラー格子に関する音響特性の研究が行われている。グラニューラー格子とは、固体粒子が互いに接触して系全体として結晶格子を組んでいる系であり、これらの粒子間には接触力学に登場するヘルツ相互作用が働く。その結果、弾性体としての性質においては非線形性が重要な役割を果たす。具体的には、このような非線形性の強い材料を用いた3次元音響メタマテリアル複合材料に関する物理的性質について、計算科学の立場から明らかにした。その結果、系に導入する弾性波の振幅、およびグラニューラー格子中に導入する共鳴構造の数密度を変化させる事により、元々のギャップが現れる振動数領域の近傍で、系における弾性波の透過率が大きく変化して特徴的な振る舞いを示す様子が観測された。

(3) 音響メタマテリアル複合材料における広帯域化に関する研究

一般に音響メタマテリアルにおいては、系に組み込まれた内部構造における共鳴現象を利用して、通常の弾性体とは異なる物理的性質を実現している。その為、メタマテリアルとしての性質が現れる特徴的な振動数領域は、いわゆる共鳴振動数の近傍に限定されていた。本研究代表者は上記 1) の課題とも関連して、音響メタマテリアルにおけるバンドギャップの広帯域化に関する定量的な研究を行った。

(4) メタマテリアル複合材料に適した数値計算手法、及びそのソフトウェア開発

2. 研究の目的の箇所でも述べた様に、メタマテリアル複合材料の解析に適した大規模計算手法の開発が望まれている。この問題に関連して本研究代表者は独自の手法に基づき、一般の大規模疎行列における固有値解析に適したソフトウェアの開発を行っていたが、本研究課題においては計算手法の改良を行い、固有値解析において精度の高い計算結果をより容易に得る事が可能となるソフトウェアの開発に成功している。またメタマテリアルにおいては、媒質中における波動の伝搬特性を決定づける 2 種類の物理量 (例: 電磁メタマテリアルの場合は誘電率と透磁率、音響メタマテリアルの場合は有効密度と弾性率) において、多くの場合その両者は特徴的な周波数依存性を有する事が知られている。これはメタマテリアル系に特徴的な性質であるといえる。

例えば、従来研究されてきたフォトニック結晶における典型的な問題においては、そのフォトニック・バンド構造を数値的に明らかにする上で、平面波展開法 (PWE) などの手法が適用されてきた。この場合、媒質の誘電率は座標に関して空間的に変化するが、透磁率に関しては真空の透磁率に等しいとして扱われた。また、フォトニック結晶を構成する材料が分散性媒質である場合には、FDTD-ADE 法や PLRC 法の様な手法が用いられてきた。しかし、これらの数値計算手法は、系の誘電率における周波数依存性が既知の関数形に従うとして定式化されている。それに対して、メタマテリアルにおいては媒質を特徴づけるこれらの物理量の周波数依存性は、従来理論的に想定されていた様な単純な関数形で書き下す事が可能であるとは限らない。すなわち、人工的に作成されたメタマテリアルにおける系の内部構造を反映して、媒質の周波数分散特性は一般に複雑な振る舞いをする可能性がある事が過去の研究においても言及されている。すなわち、メタマテリアル複合材料における波動伝搬特性を解明するには、媒質を記述する上記 2 種類の物理量がそれぞれ任意の周波数依存性を示す問題を扱う事が可能である数値計算手法を、新たに導入する事が求められる。その為、PWE 法や FDTD 法等といった従来の計算手法を、本研究課題における問題に直接適用しようとするると困難が生ずる。

本研究ではこの様な材料に適した独自の解析手法の一つとして、従来の平面波展開法を拡張した一般化平面波展開法 (G-PWE) の開発を行った。また、メタマテリアル複合材料の問題に適用する事により、数値シミュレーションにおけるその有効性について示した。

(1) ~ (4) における一連の研究成果より、音響メタマテリアル複合材料における動的特性を制御する上で、有益な知見が得られた。特に、この分野における従来の研究においては殆ど手が付けられてこなかった、ランダム音響メタマテリアル複合材料に関する問題について幅広く探索を行い、その物理的性質について明らかにする事に成功している。本研究は計算科学の立場からのアプローチであったが、海外におけるこの分野の最近の研究事例においては、機械工学や音響学などの分野における研究者・研究グループによる実験研究も活発に行われている。今後、これら複数の研究分野間における研究成果が相互に波及する事によって更に材料の集積化が進み、より高度な性能を有するメタマテリアル研究へと発展する事が期待される。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Terao Takamichi	4. 巻 -
2. 論文標題 A machine learning approach to analyze the structural formation of soft matter via image recognition	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Soft Materials	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/1539445X.2020.1715433	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Terao T.	4. 巻 -
2. 論文標題 Numerical Method to Study Three-Dimensional Metamaterial Composites	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of 13th international congress on artificial materials for novel wave phenomena	6. 最初と最後の頁 X-429 ~ X-431
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1109/MetaMaterials.2019.8900943	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 T. Terao	4. 巻 -
2. 論文標題 Numerical study of metamaterial composites in higher dimension	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of 13th international congress on artificial materials for novel wave phenomena	6. 最初と最後の頁 VI-303 ~ VI-305
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Mizuno Ryo, Okumura Kentaro, Oguri Junya, Terao Takamichi	4. 巻 45
2. 論文標題 Generalised local bond order parameter analysis: application to colloidal particles with dendritic polymer brushes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Molecular Simulation	6. 最初と最後の頁 743 ~ 751
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/08927022.2019.1582774	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Terao	4. 巻 28
2. 論文標題 Manipulating sonic band gaps at will: vibrational density of states in three-dimensional acoustic metamaterial composites	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Waves in Random and Complex Media	6. 最初と最後の頁 253 ~ 260
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/17455030.2017.1340689	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takamichi Terao	4. 巻 213
2. 論文標題 Wave propagation in acoustic metamaterial double-barrier structures	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Physica Status Solidi A	6. 最初と最後の頁 2773 ~ 2779
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssa.201600156	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takamichi Terao	4. 巻 89
2. 論文標題 Hopping electron model with geometrical frustration: Kinetic Monte Carlo simulations	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 European Physical Journal B	6. 最初と最後の頁 209/1 ~ 209/5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1140/epjb/e2016-70141-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 Takamichi Terao
2. 発表標題 Molecular simulation of generalized Gaussian-core model
3. 学会等名 The 5th International Soft Matter Conference (ISMC2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Terao
2. 発表標題 Numerical method to study three-dimensional metamaterial composites
3. 学会等名 13th international congress on artificial materials for novel wave phenomena (Metamaterials 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Terao
2. 発表標題 Numerical study of metamaterial composites in higher dimension
3. 学会等名 13th international congress on artificial materials for novel wave phenomena (Metamaterials 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 甲斐真也, 杉浦拓実, 赤塚陽介, 寺尾貴道
2. 発表標題 非球形微粒子系に関するモンテカルロ・シミュレーション
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 赤塚陽介, 杉浦拓実, 甲斐真也, 寺尾貴道
2. 発表標題 Patchy粒子系に関する構造形成
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takamichi Terao
2. 発表標題 Structural formation of soft colloidal particles - the existence of non-close-packed structures
3. 学会等名 16th Conference of the International Association of Colloid and Interface Scientists (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takamichi Terao
2. 発表標題 Application of Finite-difference Frequency-domain Method to Study Photonic Crystals and Metamaterial Composites
3. 学会等名 Progress In Electromagnetics Research Symposium (40th PIERS) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 甲斐 真也, 杉浦 拓実, 小栗 潤也, 寺尾 貴道
2. 発表標題 ソフトコロイド粒子系の秩序化に関する分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第69回コロイドおよび界面化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 水野涼, 奥村賢太郎, 寺尾貴道
2. 発表標題 コロイド結晶における一般化秩序パラメータの解析
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 寺尾貴道
2. 発表標題 ソフトマテリアルを用いた微粒子集積化材料に関する計算機シミュレーション
3. 学会等名 第5回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takamichi Terao
2. 発表標題 Structural formation of polymer-tethered colloids
3. 学会等名 Bridging the scales in soft matter simulations (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takamichi Terao
2. 発表標題 Structural formation of soft colloids
3. 学会等名 日本化学会第98春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 寺尾 貴道、水野 涼、奥村 賢太郎、小栗 潤也
2. 発表標題 分岐高分子ブラシを付与した微粒子系に関するモンテカルロ・シミュレーション
3. 学会等名 第31回 分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takamichi Terao
2. 発表標題 Monte Carlo Simulation of Dendritic Spherical Polymer Brushes
3. 学会等名 Structure formation in soft colloids (CECAM Workshop) (国際学会)
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----