

令和元年6月20日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K05041

研究課題名(和文) 結晶中に励起される非線形エネルギー局在の格子スケール制御法の構築

研究課題名(英文) Construction of a lattice scale control method of nonlinear energy localizations excited in crystal

研究代表者

土井 祐介 (Doi, Yusuke)

大阪大学・工学研究科 准教授

研究者番号：10403172

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：非線形格子モデルにおいて出現する非線形局在モード(Intrinsic Localized Mode, ILM)の励起手法および移動特性の支配因子の理解を目指して、非線形力学および数値シミュレーションによるILM励起過程のシミュレーションをおよび数理モデルと原子モデルの動力学シミュレーションによるILMの移動特性の解析を実施した。その結果、ILMの移動特性を向上させる格子モデルの構築方法及びその評価指標の提案を行った。またパルス連続入射によるILMの励起過程についての基礎的知見が得られた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ILMは幅広い非線形格子モデルでその存在が示されており結晶格子やマイクロ・ナノ構造物における振動モードとしてエネルギー局在を引き金とした現象の理解、またエネルギー局在を利用したプロセスの構築に役立つことが期待される。本研究はこれらの目的のために必要であるILMの励起方法および良い移動性に着目して解析を行い、格子モデルの設計パラメータの決定手法についての提案を行った。これにより、これまでほとんど検討されていないILMを積極的に利用する機構・メカニズムの設計に向けた手法の理解が進展すると期待される。

研究成果の概要(英文)：We perform theoretical analysis and numerical simulations on excitation and dynamics of traveling intrinsic localized mode (ILM) in mathematical models and atomic models for better understanding of governing factors of the excitation technique and transfer characteristic of traveling ILMs. As a result, we proposed a construction method of the lattice mode that supports good mobility of traveling ILMs and estimation method for the good mobility of ILMs. Moreover, basic knowledge about the excitation process of ILM by pulse continuous incidence is obtained.

研究分野：計算力学

キーワード：非線形局在モード 非線形格子 振動モード

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 非線形局在モード (Intrinsic Localized Mode, ILM) または離散ブリーザー (Discrete Breather, DB) と呼ばれる局在振動モードは、非線形格子モデルに出現する特異な振動モードとして、1988 年の報告以来、非線形物理学の分野において大きく注目されてきた。ILM は格子モデルの非線形相互作用によって励起される固有振動数帯から外れた振動数の振動が、固有振動モードと共鳴出来ないことにより空間的に拡げられないという機構により理解される。したがって、系の狭い領域にエネルギーを注入する、あるいは不安定ダイナミクスの結果として系のエネルギーが集中することにより励起されると考えられている。

(2) これまでの ILM の研究では最初期から数値モデルを用いた ILM の基礎的性質の解析が行われてきており、近年では現実の物理モデルにおける ILM の存在の検証が注目を集めている。これらの研究に加えて、ILM が力学プロセスとして種々のシステムの物理現象に及ぼす役割の検証および、ILM を積極的に利用した新しい方法論の構築が重要になってくると考えられる。特に結晶格子における非線形相互作用に着目したダイナミクスの解析はナノ・マイクロ力学の観点から興味深くまた重要である。

2. 研究の目的

ILM を材料内の原子スケールのダイナミクスとして、フォノンバンドから外れた特異な空間局在振動と捉える研究が近年注目を集めているが、その具体的な励起メカニズムおよび崩壊によるエネルギー解放についての制御方法は明らかにはなっていない。これらを明らかにするため材料中の ILM の存在を確かめ、それを一定の精度で制御し、さらに必要なタイミングで物理プロセスのトリガーとしてエネルギー解放するアプローチを検討する。これらの制御は材料の境界への力学的な作用を用いて制御する必要がある。本申請課題では、ILM の存在確認および物理プロセスでのトリガーの確認における実験条件・実験手法などの方法論を理論的・計算科学的に確立することを目指して、分子動力学法、非線形動力学の解析手法を用いて材料中の ILM を知る・動かす・止める・壊す方法を検討する。

3. 研究の方法

(1) 移動型 ILM の移動性を決定する要因を切り分けるために、結晶構造をモデル化した数値モデルにおける ILM の移動性について時間発展シミュレーションにより解析を行なう。Fermi-Pasta-Ulam 格子の拡張として得られた、ILM が高い移動性を示す対称格子の構築法を高次の非線形相互作用をもつ格子モデルおよび 2 次元非線形格子モデルに適用し、それらのモデルでの ILM の構造、ダイナミクスを検証する。

(2) 結晶内を局在性を保ったまま伝播する移動型 ILM についてその移動性を対称性の異なる 2 つの静止型 ILM のエネルギー差で定義されるパイエルスナバロ (PN) ポテンシャルに着目し、PN ポテンシャルを最小化する結合強度の組み合わせを探索する。

(3) 結晶構造内での ILM の励起過程、移動過程およびそれに伴う脱局在過程を明らかにするために 3 次元結晶格子モデルから ILM が励起・伝播する格子列に着目してオンサイトポテンシャルを持つ 1 次元非線形モデルへのモデル化を行う。またそのモデルを用いた ILM の励起過程の解析を行う。

(4) 結晶内での ILM の寿命の制御に関する基礎的知見を得るためカーボンナノチューブにおけるひずみ付与と ILM のダイナミクスの関係についての分子動力学解を行う。

(5) 格子系の境界から複数のパルスを入射し ILM が生成されるかについて検討を行う。パルスの振幅、入射間隔を様々に変更して解析を行い ILM の生成条件を解析する。また生成後の ILM の振る舞いを調べる。

4. 研究成果

(1) 移動型 ILM の滑らかな移動をサポートする 1 次元格子モデルにおいて導入した長距離相互作用を高次非線形性を持つ 1 次元格子や、2 次元格子にそのまま適用しても ILM の移動性を抑える非線形項を完全にゼロにすることは困難であることが明らかになった。そのため、この非線形項を最小化する相互作用パラメータの組み合わせを計算した。これにより高次の非線形相互作用を持つ 1 次元格子モデルに対して良好な ILM の移動性を実現する系の拡張が可能となったが、正方格子型 2 次元格子モデルにおいては実効的オンサイトポテンシャルの影響により移動性が大きく向上することは無いことが確かめられた。

(2) PN ポテンシャルを基盤とした評価関数を用いて格子系の結合係数を探索した。得られたパラメータを用いて時間発展シミュレーションを行い ILM が良好な移動性を示すことを確認した。得られた結果は結晶内での ILM の移動性を制御する物性パラメータの定量化に役立つと考えら

れる。

(3) 相互作用ポテンシャルの形状(偶奇性)およびオンサイトポテンシャルの相対的な大きさによって ILM の移動性が大きく変化すること, また移動型 ILM の振舞いは、初期状態からの静止型 ILM の不安定化による移動開始のプロセスと、移動型 ILM が生成されたあとの定常状態での振舞いが非線形相互作用ポテンシャルのそれぞれ異なる特性によって規定されることを確かめた。さらに、格子の対称性の概念を用いた非線形オンサイトポテンシャルおよび相互作用ポテンシャルの形状を考慮することにより ILM の移動性が向上することを確認した。

(4) カーボンナノチューブに与えるひずみの大きさによって ILM の寿命が変化することが確認できた。具体的には引張ひずみをカーボンナノチューブに与えることにより ILM の寿命が長くなること、また不安定化の際にはカーボンナノチューブの面外の振動が励起されるが、引張ひずみによって面外振動が抑制されていることが確認できた。

(5) 非線形格子の境界から入射する複数のパルスの時間間隔によって ILM が生成される条件を明らかにした。入射時間の間隔が小さすぎる場合生成した ILM が相互に干渉して移動性が妨げられる一方、間隔が大きすぎると入射パルス間の相互作用は発生せず ILM が励起されないことが明らかになった。

5 . 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 6 件)

1. A.B. Togueu Motcheyo, M. Kimura, Y. Doi and C. Tchawoua, Supratransmission in discrete one-dimensional lattices with the cubic-quintic nonlinearity, *Nonlinear Dynamics* (2018) (査読有).
2. J.F.R. Archilla, Y. Zolotaryuk, Yu. A. Kosevich and Y. Doi, Nonlinear waves in a model for silicate layers, *Chaos* 28, 083118 (2018) (査読有).
3. Y. Y. Yamaguchi and Y. Doi, Low-frequency discrete breathers in long-range systems without on-site potential, *Phys. Rev. E*, Vol. 97, 062218 (2018) (査読有).
4. Y. Watanabe, T. Nishida, Y. Doi and N. Sugimoto, Experimental demonstration of excitation and propagation of intrinsic localized modes in a mass-spring chain, *Physics Letters A*, Vol. 382, pp. 1957-1961 (2018) (査読有).
5. N. Higashiyama, Y. Doi, and A. Nakatani, Nonlinear dynamics of a model of acoustic metamaterial with local resonators, *Nonlinear Theory and Its Applications*, IEICE, Vol. 8, pp.129-145 (2017) (査読有).
6. Y. Doi and K. Yoshimura, Symmetric potential lattice and smooth propagation of tail-free discrete breathers, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 117, 014101 (2016) (査読有).

[学会発表] (計 27 件)

1. 吉村和之・土井祐介, 非線形格子の局在モードと伝播, 電子情報通信学会複雑コミュニケーションサイエンス研究会, (2019.3)
2. Yu. S. Kosevich, Y. Doi, Localization and trapping of negative-effective-mass electrons by supersonic kinks in nonlinear chains with realistic interatomic potentials and electron-phonon interactions, First International Nonlinear Dynamics Conference (NODYCON 2019) (2019.2).
3. 小宮拓也・土井祐介・永島壮・中谷彰宏, 2次元結晶モデルにおける非線形周期解探索法の構築, 日本機械学会講演論文集(第31回計算力学講演会(CMD2018)), 18-8, 316 (2018.11).
4. 志岐一輝・土井祐介・永島壮・中谷彰宏, 長距離相互作用を有する一次元格子モデルとその連続体モデルの波動伝ば特性解析, 日本機械学会講演論文集(第31回計算力学講演会(CMD2018)), 18-8, 318 (2018.11).
5. 山口義幸・土井祐介, 長距離相互作用系における離散ブリーザー, 日本物理学会 2018 年秋季大会概要集, 2190 (2018.9).
6. 土井祐介・吉村和之, 全粒子結合による対称ポテンシャル格子の構築, 日本物理学会 2018 年秋季大会概要集, 2427 (2018.9).
7. 土井祐介・吉村和之・胡子逸雄, 対称ポテンシャル格子の熱伝導, 日本物理学会 2018 年秋季大会概要集, 2428 (2018.9).
8. M. Kimura, Y. Doi, and K. Yoshimura, Bifurcation of Intrinsic Localized Modes in Perturbed Pairwise Interaction Symmetric Lattice, In Proc. of 2018 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2018), pp.569-570 (2018.9).
9. N. Uchida, Y. Doi, and A. Nakatani, Numerical Study on Dynamics of Nonlinear Discrete Bridge Induced by Pedestrians, In Proc. of 2018 International Symposium on Nonlinear

- Theory and Its Applications (NOLTA2018), pp.517-520 (2018.9).
10. J.F.R. Archilla, Y. Doi, and M. Kimura, Breathers and Tail-Breathers in a Realistic Model of a Silicate, In Proc. of 2018 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2018), pp.513 (2018.9).
 11. Y. Doi, K. Yoshimura and A. Nakatani, Dynamics of Intrinsic Localized Modes in Pairwise Interaction Relative Symmetric Lattices, In Proc. of 2018 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2018), pp.511-512 (2018.9).
 12. J.F.R. Archilla, Y. Doi, and M. Kimura, Nonlocal breathers as possible energy carriers in secondary tracks in muscovite, Abstracts of VI International Symposium on Strong Nonlinear Vibronic and Electronic Interactions in Solids, p.26 (2018.5).
 13. 孫光輝・永島壮・土井祐介・中谷彰宏, 変形させたカーボンナノチューブにおける非線形局在モードの安定性の分子動力学解析, 日本機械学会講演論文集(関西支部第93期定時総会講演会), 184-1, pp.90-91 (2018.3).
 14. Y. Doi and K. Yoshimura, Dynamics of Moving Intrinsic Localized Modes in Pairwise Interaction Symmetric Potential Lattices, In Proc. of International Symposium on Intrinsic Localized Modes: 30th Anniversary of Discovery (ILM2018), p.33 (2018.1).
 15. K. Yoshimura and Y. Doi, Thermal Conduction in Symmetric Potential Lattices, In Proc. of International Symposium on Intrinsic Localized Modes: 30th Anniversary of Discovery (ILM2018), p.32 (2018.1).
 16. J.F.R. Archilla, F. M. Russell, Y. Zolotaryuk, Y.A. Kosevich and Y. Doi, Experiments and theory in solitary waves in muscovite mica, In Proc. of International Symposium on Intrinsic Localized Modes: 30th Anniversary of Discovery (ILM2018), p.12 (2018.1).
 17. G. Sun, Y. Doi and A. Nakatani, Numerical Study on Intrinsic Localized Modes in Carbon Nanotubes with Bending and Torsion, In Proc. of 2017 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2017), p.559 (2017.12).
 18. Y. Doi, K. Okamoto and A. Nakatani, Numerical Simulation of Nonlinear Vibration Modes in a Small Number Atomic System, In Proc. of 2017 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2017), p.558 (2017.12).
 19. 垣本健二・土井祐介・中谷彰宏, 結晶内の局在エネルギーの移動性に関する評価法の構築, 第2回マルチスケール材料力学シンポジウム講演論文集, P20 (2017.5).
 20. Y. Doi and A. Nakatani, Mobility of discrete breathers in a symmetric potential lattice, International Workshop on Nonlinear Energy Localization in Crystals and Related Media (NELC2016), p.7 (2016.12).
 21. G. Sun, Y. Doi, and A. Nakatani, Molecular dynamics simulation of intrinsic localized modes in two types of carbon nanotube, International Workshop on Nonlinear Energy Localization in Crystals and Related Media (NELC2016), P1(Poster) (2016.12).
 22. Y. Doi and K. Yoshimura, Mobility of Discrete Breather in Truncated Pairwise Interaction Symmetric Lattices, In Proc. of 2016 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2016), p.685 (2016.11).
 23. 土井祐介, 原子スケールでの非線形振動・ダイナミクス, 第26回格子欠陥フォーラム, (2016.9).
 24. 土井祐介・吉村和之, 近似対称格子における離散ブリーザーの移動性, 日本物理学会2016年秋季大会 (2016.9).
 25. Y. Doi, Discrete breathers in theoretical lattice and crystal, Workshop on Integrable and nonintegrable lattice models: theory and computation, (2016.7).
 26. Y. Doi, Mobility of discrete breathers in a symmetric potential lattice, Workshop on Integrable and nonintegrable lattice models: theory and computation, (2016.7).
 27. 孫光輝・Lei Xiao-Wen・土井祐介・中谷彰宏, カーボンナノチューブにおける非線形局在モードの3次元構造の解析, マルチスケール材料力学シンポジウム(第21回分子動力学シンポジウム・第9回マイクロマテリアルシンポジウム)講演論文集, P30 (2016.5).

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。