

平成22年5月10日現在

研究種目：若手研究 (B)
 研究期間：2008～2009
 課題番号：20760057
 研究課題名 (和文) 非線形エネルギー局在による結晶中のき裂のダイナミクスの
 数理モデル化
 研究課題名 (英文) Modeling of dynamics of crack in crystals by nonlinear energy
 localization
 研究代表者
 土井 祐介 (DOI YUSUKE)
 大阪大学・工学研究科・助教
 研究者番号：10403172

研究成果の概要 (和文)：

材料中のマイクロなスケール(原子・分子スケール)において原子・分子間の相互作用ポテンシャルの非線形性によって出現する特異な局在振動の構造およびダイナミクスの解析を行った。特に理想的な2次元炭素構造体であるグラフェンシートに着目し、原子運動のシミュレーション(分子動力学シミュレーション)と方程式の数値手法を組み合わせ炭素-炭素結合に現れる非線形振動の探索および構造の解析を行った。さらに局在振動の安定性解析を行い、局在構造の不安定化時の初期的なふるまいを示した。以上の結果より、局在振動が炭素-炭素結合の切断や再結合など、原子・分子構造における構造変化におけるトリガーとなりうることが示唆される。

研究成果の概要 (英文)：

We investigate structure and dynamics of nonlinear localized vibration (intrinsic localized mode, ILM) in crystal structure due to the nonlinear interaction potential between atoms. We consider ILM in graphene sheet which is two dimensional structure of carbon atoms. By combining molecular dynamics method and Newton-Raphson method, we search localized vibration in graphene sheet and investigate its structure. We also investigate stability of localized structure. These results imply possibility that ILM can be trigger of change of structure in atomic scale in crystal such as cutting and recombination of carbon-carbon bonds.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,900,000	570,000	2,470,000
2009年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,800,000	840,000	3,640,000

研究分野：非線形力学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎 工学基礎

キーワード：非線形格子力学, 分子動力学, 離散ブリーザー, 非線形局在モード
 グラフェンシート

1. 研究開始当初の背景

(1)自然界に存在する物体，人工物に様々なスケールで出現する周期構造物のモデルとして格子モデルは解析されてきている．その中でも格子間の相互作用が非線形関数で与えられる非線形格子モデルは大振幅振動のモデルとして注目される一方，非線形現象を数理的に取り扱いやすいモデルとして注目されていた．そのような中，1988年に Sievers, Takeno によって非線形格子に出現する特異な振動モードとして離散ブリーザーが発見された．

(2)離散ブリーザーは従来数理モデル，特に一次元非線形格子モデルでの解析および数値シミュレーションによる研究が進められてきた．その一方で離散ブリーザーが現実の物理系において励起されるか否かの観点からさまざまな物理系における実験やシミュレーションの研究がおこなわれるようになってきた．また数理モデルにおいても，モデルの多次元化や相互作用の複雑化を行い，現実系に近付けて解析が行われるようになってきた．

(3)材料のミクロスケールのダイナミクスとしては原子間相互作用に経験的ポテンシャルを用いて原子の運動を追跡する分子動力学(Molecular Dynamics; MD)法を用いた解析が幅広く行われてきている．しかしながら，MDの結果からこれらのダイナミクスに関する理論的な議論を行うのは非常に困難である．個々の複雑な運動から理論を定式化することが困難であることによる．

(4)結晶格子は原子・分子が周期的に配列をしており，原子・分子間の相互作用は非線形性を有する．したがって，非線形格子モデルとみなすことが可能であり，離散ブリーザーが励起する可能性がある．このような結晶格子のモデルにおいて非線形力学の観点から離散ブリーザーの研究を行った例はほとんどなく，このような研究を進めることによって従来とは異なる新しい枠組みを作り出せる可能性がある．

2. 研究の目的

(1)前述のように結晶格子のダイナミクスを非線形力学の手法を用いて解析するという新しい枠組みの方法論を確立することを目指す．このために結晶格子構造における離散ブリーザーの励起を確認し，その構造及びダイナミクスの解析を行う．

(2)非線形力学においては離散ブリーザーの現実の物理現象としての重要性を示すことにより，この分野の研究の更なる進展に寄与

することができる．

(3)材料力学の分野においては，非線形力学の理論を導入することによる新しい理論の展開が可能であること，また，構造物の安定性に直結する材料中の微小き裂のダイナミクスにする新しい理論の構築が可能であることを示して，ナノ材料工学の新たな進展に寄与すると期待される．

(4)具体的には2次元の炭素構造体であるグラフェンシートについて，分子動力学法と非線形力学理論を併用した離散ブリーザーの解析手法の構築，グラフェンシートに励起された離散ブリーザーの構造および安定性解析を行う．

3. 研究の方法

(1)結晶格子構造での原子の局在振動構造を詳細に調べるため，数値的に離散ブリーザー解を探索するコードを構築する．モデルとしては2次元モデルを考えるFermi-Pasta-Ulam格子などの非線形格子モデルや炭素構造体を模擬できるBrennerポテンシャルといった現実の材料特性にフィッティングしたポテンシャルも採用し，それぞれの系における解析結果を比較しながら解の探索を行う．この解析のために，格子モデルにおける周期解探索プログラムおよび，分子動力学シミュレーションの連結コードを開発する．計算手法としては，全格子点または原子の位置で構成される相空間(空間座標および速度座標で構成される空間)中での周期軌道Newton-Raphson法を用いて探索する．またNewton-Raphson法において効率の良い解の探索を行うため，少数自由度の原子系での解の探索を行い，徐々に系のサイズを拡張しながら解を探索しなおすことを繰り返すことによって，系の境界の影響を除外した振動モードを得る．システムの概略を図1に示す．

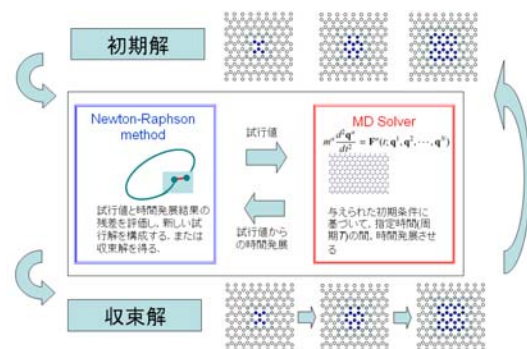


図1 解析システムの概略

(2)MDおよびNewton-Raphson法の連結コードにより得られた離散ブリーザーの解を初期値として用いて，MDによる時間発展シミュレーションを行い，離散ブリーザーの特性を解

析する。その際、系のパラメータを網羅的に変化させて、パラメータが離散ブリーザーの構造に与える影響を調べる。

(3) 非線形動力学における周期解の安定性理論を用いて、数値的に得られた離散ブリーザーの線形安定性解析を行う。具体的にはフロケの理論に基づいて、離散ブリーザー周りの擾乱の時間反転を記述する変分方程式を評価する。この変分方程式を数値的に積分することによって、擾乱の成長の情報を含むモノドロミー行列を数値的に求める。このモノドロミー行列の固有値分布を調べることによって、離散ブリーザーの線形安定性が明らかになる。また対応する不安定モードを調べることによって、不安定化が発生した場合の離散ブリーザーのダイナミクスを解析する。

4. 研究成果

(1) 主な解析対象であるグラフェンシートの概略を図2に示す。グラフェンシートは炭素の六印環構造で構成される2次元のシートである。

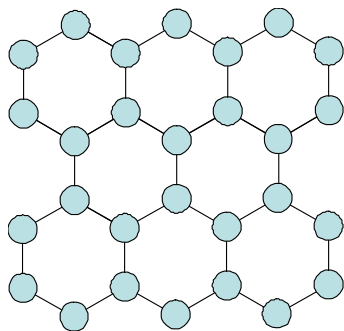


図2 グラフェンシートの構造

(2) グラフェンシートにおいて、MD法とNewton-Raphson法を結合した解析コードによって探索した離散ブリーザー解を図3に示す。黒い点が原子の軌跡を示している。中心部の2つの原子が大振幅振動をし、残りの部分がほぼ静止している様子が分かる。振動原子がボンド方向に沿って振動している様子が分かる。振動の振幅はグラフェンシートの

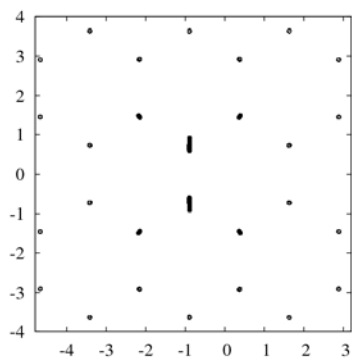


図3 離散ブリーザーの構造

炭素-炭素結合の平衡長10%程度である。角振動数は線形のフォノンバンドの外側に位置しており、何らかの非線形性によって局在振動が励起されていることが分かる。

(3) 図4に離散ブリーザーの角振動数を変化させた場合の振幅の変化を示す。 d_{\max} は最大伸長時、 d_{\min} は最大圧縮時の振幅を示す。この図から角振動数が増大するにつれて離散ブリーザーの振幅が増大していることが分かる。これはフォノンモードの振動数と振幅が独立であることと対照的に非線形性の影響により振動数が振幅に依存していることを示す。

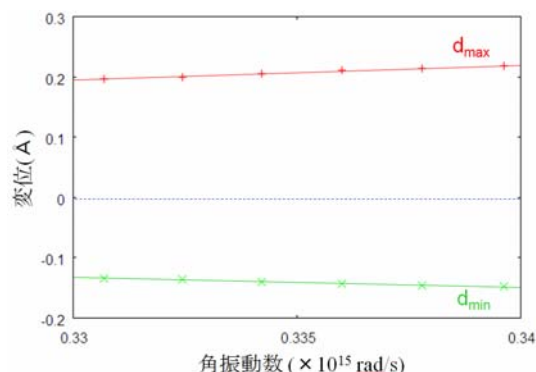


図4 離散ブリーザーの振幅 - 角振動数関係

以上のように、現実の炭素構造物であるグラフェンシートを模擬したモデルにおいて離散ブリーザーが存在し得ることが分かった。またその構造は炭素-炭素結合の相互作用の非線形性の影響を反映していることが明らかである。離散ブリーザーの数値解を得ることによって、非線形力学のアプローチを用いて原子のダイナミクスを解析することが可能であることが示された。

(4) 数値的に得られた離散ブリーザーの解に対してフロケの理論に基づいて安定性解析を行う。図5にモノドロミー行列の固有値分布の例を示す。図からわかるように今回解析した振動数領域においては、すべての場合において絶対値が1ではない固有値が存在した。このことから離散ブリーザーは線形不安定であることが分かる。固有値の分布は振動数に依存しており、振動数(振動振幅)によって、不安定化のメカニズムが異なることが分かった。絶対値が1ではない固有値に対応する固有ベクトルを計算することにより、不安定化するモードが明らかになった。多くの場合において、離散ブリーザーの振動方向と垂直、すなわち炭素-炭素結合と垂直な方向への変位が最も不安定なモードとなっており、エネルギーが局在化してボンド方向の振動が励起されたのちに、それに垂直な方向の振動が励起されることが示唆された。

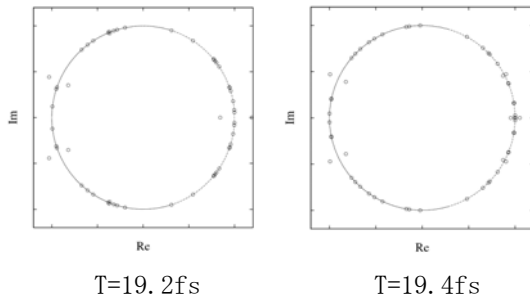


図5 モノドロミー行列の固有値分布

(5)以上のように、結晶格子構造の例としてグラフェンシートを取り上げ、離散ブリーザーの探索コードの構築及び、得られた数値解の解析を行い、その基本的な特性を評価することができた。これらの解析手法を他の幾何構造、たとえばカーボンナノチューブに適用することにより、さらに興味深い結果が得られることが期待される。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 8 件)

- [1] T. Shimada, D. Shirasaki, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani and T. Kitamura, Influence of nonlinear atomic interaction on excitation of intrinsic localized modes in carbon nanotubes, Physica D 239, (2010), pp. 407-413, 査読有.
- [2] 土井祐介・中谷彰宏, グラフェンシートにおける非線形局在モードの構造と安定性, 第 14 回分子動力学シンポジウム講演論文集, (2009), pp. 18-19, 査読無.
- [3] 土井祐介・中谷彰宏, 2 原子結晶構造中の離散ブリーザーの存在と安定性, 京都大学数理解析研究所講究録, 1645, (2009), pp. 66-71, 査読無.
- [4] Y. Doi and K. Yoshimura, Translational asymmetry controlled lattice and numerical method for moving discrete breather in four particle system, J. Phys. Soc. Jpn., 78, (2009), 034401, 査読有.
- [5] Y. Doi, A. Nakatani and K. Yoshimura, Modulational instability of zone boundary mode and band edge modes in nonlinear diatomic lattices, Phys. Rev. E, 79, (2009), 026603, 査読有.
- [6] 土井祐介・中谷彰宏, 原子配列の幾何形状に起因する非線形局在モードの励起に関する研究, 日本機械学会講演論文集(第 21 回計算力学講演会), No 08-33, (2008), pp. 452-453 (CD-ROM), 査読無.

- [7] 木下佑介・白崎大輔・土井祐介・中谷彰宏・北村隆行, カーボンナノチューブにおける非線形局在モードと原子間相互作用の非線形性の関係, 第 13 回分子動力学シンポジウム講演論文集, (2008), p. 27-29, 査読無.
- [8] 土井祐介・中谷彰宏, 結晶格子モデルにおける非線形局在モードの移動性についての検討, 第 13 回分子動力学シンポジウム講演論文集, (2008), p. 73-74, 査読無.

[学会発表] (計 16 件)

- [1] 土井祐介, 2 次元結晶における離散ブリーザーの構造とダイナミクス, 2009 年度機械工学における力学系理論の応用に関する研究会, 2010. 3. 28, 慶應義塾大学矢上キャンパス.
- [2] 土井祐介, 離散ブリーザーによる結晶の構造変化の検討, 京都大学数理解析研究所研究集会「非線形波動の数理と応用」, 2009. 10. 21, 京都大学理学研究科.
- [3] 土井祐介, 非線形 Klein-Gordon 型格子における離散ブリーザーの存在と安定性, 日本物理学会 2009 年秋季大会, 2009. 9. 26, 熊本大学黒髪キャンパス.
- [4] 土井祐介, グラフェンシートにおける非線形局在モードの構造と安定性, 日本材料学会第 14 回分子動力学シンポジウム, 2009. 5. 22, 愛媛県民文化会館.
- [5] 土井祐介, 2 原子非線形格子における Zone Boundary Mode と Band Edge Mode の変調不安定解析, 日本物理学会第 64 回年次大会, 2009. 3. 30, 立教大学.
- [6] 土井祐介, 1 次元格子系における移動型非線形局在モードの衝突のダイナミクス, 電気情報通信学会 非線形問題研究会(NLP), 2008. 12. 9, 石川県文教会館.
- [7] 土井祐介, 原子配列の幾何形状に起因する非線形局在モードの励起に関する研究, 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 2008. 11. 2, 琉球大学.
- [8] 土井祐介, カーボンナノチューブにおける非線形局在モードの励起構造の解析, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 2008. 9. 23, 岩手大学上田キャンパス.
- [9] 木下佑介, カーボンナノチューブにおける非線形局在モードと原子間相互作用の非線形性の関係, 日本材料学会第 13 回分子動力学シンポジウム, 2008. 5. 23, 鹿児島大学郡元キャンパス.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

土井 祐介 (DOI YUSUKE)

大阪大学・工学研究科・助教

研究者番号：10403172