

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 9 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24560074

研究課題名(和文) 格子の対称性に着目した原子ダイナミクス of 新たな力学モデルの構築

研究課題名(英文) Constructing a new lattice model for atomic dynamics using symmetry of lattice

研究代表者

土井 祐介 (Doi, Yusuke)

大阪大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：10403172

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,100,000円

研究成果の概要(和文)：非線形格子系に出現するエネルギー局在モードの移動性を、格子系の複素ノーマルモード空間での回転対称性に対応する格子の対称性を実現することにより大きく高めた。この格子の構築法に関してFPU格子系に対する極めて効率的な探索を実現し、大自由度系での数値シミュレーションを行えるようになった。これにより対称格子系におけるエネルギー局在モードの構造およびダイナミクスが解析できるようになった。また、一般の格子系についても対応する対称格子系の構築法を確立した。

研究成果の概要(英文)：We obtain high mobility of intrinsic localized mode in anharmonic lattice by constructing a symmetric lattice which has rotational symmetry in the complex normal mode of the corresponding lattice. Highly efficient method for searching a symmetric lattice for FPU lattice is constructed. Therefore we can calculate dynamics of the large particle symmetric lattice. We investigate the structure of ILM and dynamics of ILM in the large symmetric lattices. Adding to this, we obtain a method for constructing symmetric lattices for general lattice systems.

研究分野：非線形格子力学

キーワード：非線形格子 離散ブリーザー 非線形局在モード

1. 研究開始当初の背景

固体の様々な物性、特に変形・破壊などの学特性は固体のミクロな力学、すなわち原子スケールでの構造、ダイナミクスが大きく反映されることが知られている。例えば固体の最も基本的な性質の一つである塑性変形はミクロなスケールでの欠陥構造である転位の移動と、不整合構造である結晶粒界との相互作用の観点から議論される。また、構造物の動的特性として最も基本的なものである固有振動は、結晶においてはフォノンモードとして体系化されており、種々の物性を決定づけるパラメータとなっている。変形理論においては、外力によってフォノンモードの一部が不安定化して、結晶構造の変形が開始するという考えによる格子不安定理論に基づいた解析が、近年大きな成果を上げている。

原子スケールでの結晶構造の変化は原子結合のつなぎ変わりで実現される。このつなぎ変わりによって転位や欠陥のような構造が結晶内を伝播していく。これらの構造の伝播過程を知ることは重要である。この目的のために離散転位動力学法や、X-FEM のようにミクロ構造を粗視化するアプローチも数多く存在する。しかしながら、ミクロ構造の伝播過程を素過程として捉えた場合、結晶格子という「離散的な構造」を伝播することにはエネルギー障壁が存在する}と考えられる。実際に NEB 法によってミクロ構造が 1 原子間隔分移動する場合の最小エネルギー経路は計算されており、このことからミクロ構造が移動するための障壁が格子間隔の周期を持った井戸型ポテンシャルであることが理解できる。

このような原子スケールのダイナミクスの理解には、経験的に与えられる相互作用ポテンシャルに従う運動方程式を時間発展させることによって原子の運動を追跡する分子動力学(Molecular Dynamics、MD)法が強力な解析手法である。上述の転位の運動や格子不安定解析も MD の枠組みにより大きな成果を挙げている。しかしながら MD 法で得られるデータは多数の粒子の時間発展データであり、そこからよりマクロな構造変化や力学特性に関係する理論体系を導くことには大きな困難がある、このギャップを埋める為の手法として方程式フリー法や、メタダイナミクス法など種々の方法論が提案されているものの、未だ統一的な手法を見出すには至っていない。

2. 研究の目的

前述の通り、原子スケールのダイナミクスである結晶中の転位の運動や微小き裂の進展についても原子間の結合のつなぎ変わりの連続で実現されるため、格子の離散性の影響を受ける。MD 法ではこのダイナミクスを

直接的に観測することが可能であるが、そこに潜むメカニズムについては MD とは別の方法論で解析する必要がある。このダイナミクスについて、数理モデルにおける ILM の伝播のメカニズムを援用し、新しい理論を構築することを目指す。

本研究課題では格子に出現する転位、き裂、ILM などのコヒーレントな構造が格子間を伝播する場合のダイナミクスを複素ノーマルモード座標でのダイナミクスと捉え、新しい視点からの理解を試みる。これらの構造が系の離散性の影響を受けずに伝播する対称性の高い格子モデルを構築し、構造の伝播過程について非線形動力学理論に基づいた安定性、分岐解析を行い、MD シミュレーションと既存の変形理論の間を接続する新しい理論体系の構築を目指す。

3. 研究の方法

- (1) 結晶格子内の原子スケールでのコヒーレントな構造が構造内を伝播する場合、連続体での波動伝播などとは異なり、伝播のダイナミクスは離散構造の影響を強く受ける。例えば転位の伝播の場合、移動の障壁はパイエルスポテンシャルとして評価される。この移動過程のダイナミクスの詳細な解明のため、格子の離散構造を維持したままコヒーレントな構造の伝播性を高める系を構成する。1 次元の数理モデルである Fermi-Pasta-Ulam 格子系においては複素ノーマルモード座標での回転操作が、物理座標における並進変換に対応していることを用いて回転に対して不変な格子系を構成することが可能である。このアプローチを拡張し、より一般的に高次元の格子系や実際の物理系のモデルである MD モデルでの対称格子系の構成法を確立する。
- (2) 欠陥や転位が結晶格子を伝播するとき、構造が振動しながら格子間移動の実効的ポテンシャルを乗り越えると考えられる。また ILM については振動モードそのものが移動していく。時間的な周期振動は相空間において周期軌道を取る。振動が系を伝播する場合も周期軌道が少しずつシフトするトーラス軌道が観測されると考えられる。このような構造を数値的に求めるための手法を開発する。さらに、得られた構造についての体系的な時間発展シミュレーションを行い、コヒーレント構造のダイナミクスの理解を深める。
- (3) 現実の結晶をモデル化した MD の計算モデルは、数理モデルに比べてポテンシャル、構造ともに複雑である。これらのモデルでの対称格子の構築のために、MD によるコヒーレントな構造の伝播の直接シ

ミュレーションを行い、複素ノーマルモード空間での振る舞いを解析することによって、特徴量の抽出を行う。特にグラフェンの結晶モデルに着目し詳細な解析を行う。

4. 研究成果

- (1) 格子系においてコヒーレント構造が系から実効的に感じる周期的なポテンシャルの大きさを決定づける複素ノーマルモードにおける回転対称性に着目し、周期ポテンシャルを打ち消すポテンシャルの評価法を確立した。特に FPU モデル格子系においてはハミルトニアンのもつ対称性からより計算コストの小さい計算法を確立した事により粒子数が 10000 以上の様な大きな自由度を有する系においても対称格子の構築が可能になった。
- (2) 大自由度の FPU 格子系に対応する対称格子におけるコヒーレント構造のダイナミクスとして移動型 ILM の特性を調べた。静止形 ILM に対して擾乱を与えることにより移動型 ILM を生成するアプローチにおいて通常の FPU では擾乱で ILM が不規則な運動をする場合でも、対称格子系においては一定速度で ILM が走行することが確認された(図 1)。これは対称格子の ILM が擾乱に対して極めてロバストであることを示している。

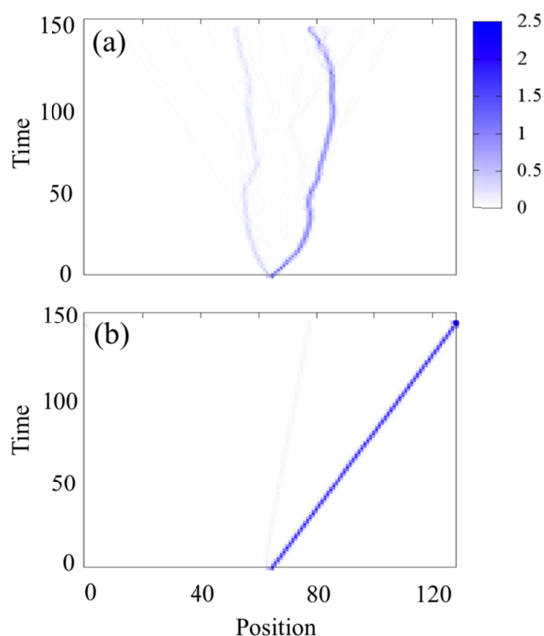
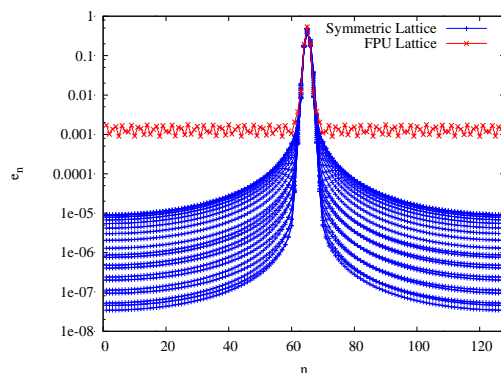


図 1 擾乱による移動型 ILM の生成
(a)FPU 格子、(b)対称格子

- (3) 反復法により大自由度 FPU 格子と対応する大自由度対称格子の移動型エネルギー局在構造を解析した結果、FPU 講師の場合、周期的ポテンシャルの影響による有

限サイズのテイルが全系に広がっている一方で、対称格子においてはこのようなテイ

ルは出現しないことが明らかになった(図 2)。このことにより ILM の移動性と局在構造の生成するテイルには関係が有



ることが明らかになった。

図 2 ILM の構造の違い

- (4) 一般的な格子系における対称格子の構成法について定式化し、FPU 格子系の場合に適用してその妥当性を検証した。

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 7 件)

土井祐介・石川省吾・中谷彰宏, 経験的ポテンシャルを用いたマグネシウム周期積層構造の振動モード解析, 第 17 回分子動力学シンポジウム講演論文集, P29(USB) (2012), 査読無

Y. Doi and A. Nakatani, Modulational instability of a zone boundary mode and band edge modes in two-dimensional nonlinear lattices, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, Vol.81, 124402 (2012)

DOI: 10.1143/JPSJ.81.124402

土井祐介・中谷彰宏, マグネシウム積層構造体における非線形振動とその不安定化, 第 18 回分子動力学シンポジウム講演論文集, (2013), P40(USB), 査読無

土井祐介・中谷彰宏, マグネシウム積層構造の非線形フォノンモード解析, 日本機械学会講演論文集(第 26 回計算力学講演会), (2013), 1537, 査読無

東山直樹・土井祐介・中谷彰宏, 音響メタマテリアルの大振幅振動における動力学特性解析, 第 19 回分子動力学シンポジウム講演論文集, (2014), P30(USB), 査読無

土井祐介・東山直樹・中谷彰宏, 音響メタマテリアルの力学モデルにおける非線形ダイナミクスの数値的検討, 第 58 回日本学術会議材料工学連合講演会講演論文集, (2014), p.450, 査読無

土井祐介・中谷彰宏, 結晶中のエネルギー

一局在構造の伝ば特性の数値解析, 日本機械学会講演論文集(第 27 回計算力学講演会), 2133 (2014), 査読無

[学会発表](計 16 件)

Y. Doi and A. Nakatani, Modulational instability and chaotic breathers in two dimensional Fermi-Pasta-Ulam lattices, 19th International Symposium on Nonlinear Acoustics (ISNA19), 2012.5.21, 早稲田大学(東京都)

土井祐介・中谷彰宏, 原子モデルによるマグネシウム積層構造の有限振動特性解析, 日本金属学会講演概要(2013 年春期講演大会(第 152 回)), 2013.3.29, 東京工業大学(東京都)

土井祐介・中谷彰宏, マグネシウム積層構造体における非線形振動とその不安定化, 第 18 回分子動力学シンポジウム講演論文集, 2013.5.17 東京工業大学(東京都).

Y. Doi and A. Nakatani, Stability of nonlinear vibration modes in periodic structure of magnesium, International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials (ISAM4 2013), 2013.7.24 東京大学生産技術研究所(東京都)

Y. Doi and A. Nakatani, Numerical study of nonlinear vibrations in layered structure in magnesium, 2013 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, 2013.9.11, サンタフェ(アメリカ合衆国)

土井祐介・中谷彰宏, マグネシウム積層構造の非線形フォノンモード解析, 第 26 回計算力学講演会, 2013.11.3, 佐賀大学(佐賀県佐賀市)

土井祐介, Nonlinear Energy Localization Modes in Crystals: Discrete Breather, 第 25 回相変化研究会シンポジウム, 2013.11.28, ホテル鳳凰(宮城県仙台市)

Y. Doi, Nonlinear excitations in graphene, Workshop on nonlinear excitations in discrete lattices, 2014.4.1, 金沢大学角間キャンパス(石川県金沢市)

東山直樹・土井祐介・中谷彰宏, 音響メタマテリアルの大振幅振動における動力学特性解析, 第 19 回分子動力学シンポジウム, 2014.5.16, 福岡大学(福岡県福岡市)

Y. Doi and A. Nakatani, Stability of discrete breather on atomic scale in deformed carbon structures, IUTAM Symposium 2014 Complexity of Nonlinear Waves 2014.9.8, タリン(エストニア)

Y. Doi and K. Yoshimura, Constructing a lattice model supporting highly mobile discrete breathers, 2014 International

Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2014), 2014.9.17, ルツェルン(スイス)

N. Higashiyama, Y. Doi and A. Nakatani, Nonlinear dynamics of a quasi-one-dimensional model of acoustic metamaterials, 2014 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2014), , 2014.9.17, ルツェルン(スイス)

Y. Doi, Nonlinear atomic localization in crystals, 15th Workshop on Fine Particle Plasmas (WFPP15), 2014. 10.16, 核融合科学研究所(岐阜県多治見市)

土井祐介・東山直樹・中谷彰宏, 音響メタマテリアルの力学モデルにおける非線形ダイナミクスの数値的検討, 第 58 回日本学術会議材料工学連合講演会, 2014.10.28, 京都テルサ(京都府京都市)

土井祐介・中谷彰宏, 結晶中のエネルギー一局在構造の伝ば特性の数値解析, 第 27 回計算力学講演会, 2014.10.23, 岩手大学(岩手県盛岡市)

土井祐介・吉村和之, 対称格子における移動型非線形局在モードの構造, 日本物理学会第 70 回年次大会, 2015.3.21, 早稲田大学(東京都)

[図書](計 1 件)

K. Yoshimura, Y. Doi, M. Kimura, Localized modes in nonlinear discrete systems. In M. Ohtsu and T. Yatsui(Eds.), Progress in Nanophotonics III, Springer (2014) (分担執筆)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

土井 祐介 (DOI, Yusuke)

大阪大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号: 10403172