

令和 5 年 6 月 12 日現在

機関番号：15101

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19K03654

研究課題名（和文）非線形局在モードによるエネルギー輸送波散乱と格子熱伝導の研究

研究課題名（英文）Wave scattering by nonlinear localized mode and heat conduction in nonlinear lattice

研究代表者

吉村 和之（Yoshimura, Kazuyuki）

鳥取大学・工学研究科・教授

研究者番号：40396156

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：固体における熱抵抗の微視的メカニズムを、非線形格子モデルを用いて研究した。非線形格子のポテンシャルに関する2種類の対称性を定義し、それらの対称性を備える2つの特殊な非線形格子モデルを具体的に構成した。これらのモデルを用いた非平衡分子動力学シミュレーションにより、本研究で定義した対称性の存在が、熱抵抗の消失もしくは著しい低減の条件となることを明らかにした。また、熱エネルギーはフォノンにより輸送され、熱抵抗の原因の一つとして、非線形局在モードによるフォノン伝播の阻害が予想される。ここでは、対称性が非線形局在モードによるフォノン散乱に及ぼす影響を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

固体における熱輸送機構を、素過程である原子ダイナミクスに基づき理解することは、物理学における重要な課題の一つである。一方、工学においては、熱伝導を制御することで新機能・高機能材料や革新的デバイスの開発を目指す研究への関心が高まっている。その基礎学理としての熱輸送の微視的理解の重要性も増している。本研究では、熱抵抗の消失（もしくは著しい低減）の条件となるポテンシャル対称性を同定した。研究成果の一部は、熱抵抗に関する有名なPeirels仮説をダイナミクスに基づき検証した初めての結果であり、学術的意義が大きいと考えられる。また、本研究の知見は、熱伝導に優れた物質の設計にも役立つものと期待される。

研究成果の概要（英文）：The microscopic mechanism of thermal resistance in solids was studied using nonlinear lattice models. We defined two types of symmetries regarding the potentials of nonlinear lattices, and then constructed two particular nonlinear lattice models equipped with these symmetries. Non-equilibrium molecular dynamics simulations using these models revealed that the existence of the symmetries defined in this study is a condition for the disappearance or significant reduction of thermal resistance. Thermal energy is transported by phonons, and one of the causes of thermal resistance is expected to be the inhibition of phonon propagation by nonlinear localized modes. We clarified effects of the symmetries on phonon scattering by nonlinear localized modes.

研究分野：非線形物理

キーワード：非線形格子 熱伝導 局在モード

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

固体結晶における熱抵抗の微視的発生機構に関して、「フォノン間相互作用において Normal 過程のみ存在し Umklapp 過程が無い場合には熱抵抗が消失する」という Peirels 仮説が広く受け入れられてきた。しかしながら、仮説を正当化する理論や数値的検証は無かった。また、非線形格子モデルを用いた研究が多数なされているものの、熱抵抗の原因は十分に明らかにされていない状況であった。

一方、非線形格子系においては、空間的に局在した波動モード (Discrete Breather, DB) が存在し、定在波型と進行波型の 2 種類の DB が知られている。連続媒質と異なり、一般に格子系では離散性の為に波動が伝播しにくい傾向がある。進行波型 DB についても、不安定で伝播速度が減衰しやすい傾向が、我々の下記研究で見出されていた。

[A1] K. Yoshimura and Y. Doi, *Wave Motion*, **45** (2007) 83-99.

進行波型 DB の伝播を妨げる本質的要因について研究を進めた結果、格子ポテンシャル関数に対して定義されるある連続化された並進対称性の破れが原因であることを、我々は以下の研究で見出していた。

[A2] Y. Doi and K. Yoshimura, *Phys. Rev. Lett.*, **117** (2016) 014101.

熱伝導とはフォノンによるエネルギー輸送である。我々は、当該ポテンシャル対称性が、DB の伝播のみならず、フォノンの伝播や格子系の熱伝導性にも著しい影響を与えるのではないかと予想した。そこで、ポテンシャル対称性の観点より熱抵抗の原因に関する研究を進めることとした。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、1次元非線形格子とそのダイナミクスに基づき、固体結晶における熱抵抗の微視的発生機構に関する理解を得ることである。まず、熱抵抗消失の条件を、格子系のポテンシャル関数の対称性の観点より明らかにすることを試みる。また、熱抵抗が生じる場合については、その原因の一つとして DB によるフォノンの散乱が予想される。そこで、この散乱現象の特性の理解を目指す。

### 3. 研究の方法

ポテンシャル関数が対称性を有するような非線形格子モデルを具体的に構成する。その非線形格子モデルに熱浴を付した系を用いて、熱伝導の非平衡分子動力学シミュレーションを実行する。そのシミュレーション結果に基づき、熱抵抗消失の条件と対称性の関連を調査する。さらに、熱エネルギー輸送を担っている波動モードを同定し、それが非線形性により変調されたフォノンであるか否かを調査する。さらに、DB によるフォノンの散乱特性を数値的に調べ、当該散乱現象と熱抵抗との関連を論じる。

### 4. 研究成果

対称格子モデルの 1 つである Pairwise Interaction Symmetric Lattice (PISL) の存在が、論文[A1]で数値的には示されていた。ただし、モデルに含まれる多数のパラメータ値を数値計算により求める必要があった。今回、それらパラメータ値を決定し、PISL のハミルトニアンを解析的表式を得た。この研究成果をまとめた論文が、

[1] Y. Doi and K. Yoshimura, *Nonlinearity* **33** (2020) 5142-5175.

として学術論文誌に掲載された。さらに、熱伝導の非平衡分子動力学シミュレーションを行い、PISL では熱抵抗  $\kappa = 0$  であることを発見した。この結果は、国際会議 NOLTA2020 で発表した。

[2] K. Yoshimura, Y. Doi, and M. Ebisu, *Proc. of the 2020 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2020)* 181-184.

PISL が備えるポテンシャル対称性が、熱抵抗消失の条件の一つである可能性を示す結果である。ただし、現時点では、完全に熱抵抗が消失するか否かは未解明であり、今後の更なる研究が必要である。

PISL とは異なる型のポテンシャル対称性を有する対称格子モデルとして Umklapp-Free Lattice (UFL) を構成した。UFL は、フォノン間相互作用について Normal 過程のみ存在し Umklapp 過程が無いという条件を満たす具体的な非線形格子モデルである。したがって、本モデルの発見により、熱抵抗に関する Peirels 仮説を、非平衡分子動力学シミュレーションにより直接検証することが可能となった。GPU を用いた大規模数値計算により、UFL では熱抵抗が消失すること、すなわち、UFL の対称性は熱抵抗消失の十分条件となることを示した。これは、Peirels 仮説をダイナミクスに基づき検証した初めての結果でもある。この研究成果をまとめた論文が、

[3] K. Yoshimura, Y. Doi and T. Kitamura, *Phys. Rev. E*, **105** (2022) 024140.

として学術論文誌に掲載された。

PISL に関して、ある区間内の任意の波数に対する単一モード平面波の厳密解を求めた。この結果は、国際会議 NOLTA2019 で発表した。

[4] K. Yoshimura and Y. Doi, *Proc. of the 2019 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2019)* 399-402.

これらの平面波は、非線形性により変調を受けたフォノンであり、PISL における熱エネルギー輸送波であることを数値的に同定した。また、同様の手法で、UFL における単一モード平面波の厳密解を得ることができた。UFL の平面波も熱エネルギー輸送波であることを確認し論文[4]で示した。

PISL と UFL について、DB によるフォノンの散乱特性を数値的に調べた。DB にフォノンを入射した時の透過率と反射率を数値的に詳細に調べた。PISL では、フォノンがほぼ完全に透過すること、および、対称性の破れに伴い透過率が減少することを明らかにした。DB によるフォノン散乱と熱抵抗の関連を示唆する結果である。UFL については、フォノンが殆ど DB を透過しないことを明らかにした。本結果は、国際会議 NOLTA2022 で発表した。

[5] K. Yoshimura and Y. Hirata, *Proc. of the 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2022)* 515-518.

以上に加え、当初計画外の成果として、Fermi-Pasta-Ulam 格子に対して、対称単一パルス型および多パルス型の DB 解の存在証明を与えた。この研究成果をまとめた論文が、

[6] K. Yoshimura and Y. Doi, *Jour. Diff. Eq.*, **298** (2021) 560-608.

として学術論文誌に掲載された。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3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 Yoshimura Kazuyuki, Doi Yusuke	4. 巻 298
2. 論文標題 Existence of odd, even, and multi-pulse discrete breathers in infinite Fermi-Pasta-Ulam lattices	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Differential Equations	6. 最初と最後の頁 560 ~ 608
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jde.2021.07.003	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 Yoshimura Kazuyuki, Doi Yusuke, Kitamura Tomoya	4. 巻 105
2. 論文標題 Heat transport in nonlinear lattices free from the umklapp process	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 24140
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.105.024140	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 Doi Yusuke, Yoshimura Kazuyuki	4. 巻 33
2. 論文標題 Construction of nonlinear lattice with potential symmetry for smooth propagation of discrete breather	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nonlinearity	6. 最初と最後の頁 5142 ~ 5175
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6544/ab9498	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7件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 吉村 和之, 土井 祐介, 北村 智哉
2. 発表標題 Umklapp 過程の無い非線形格子モデルの構成と熱伝導特性
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kazuyuki Yoshimura, Yusuke Doi, Tomoya Kitamura
2. 発表標題 Construction of nonlinear lattice free from the Umklapp process and heat transport
3. 学会等名 LCM 2021 - Localised nonlinear excitations in condensed matter. Theory and experiments (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshimura Kazuyuki, Doi Yusuke, Ebisu Masao
2. 発表標題 Heat transport in pairwise interaction symmetric lattices
3. 学会等名 The 2020 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉村 和之, 土井 祐介, 北村 智哉
2. 発表標題 Umklapp過程の無い非線形格子モデルの構成と熱伝導特性
3. 学会等名 日本応用数理学会 第17回 研究部会連合発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kazuyuki Yoshimura
2. 発表標題 Exact Solutions of Infinite Lattices with Long-Range Nonlinear Interactions
3. 学会等名 The 2019 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉村 和之
2. 発表標題 長距離相互作用 1 次元非線形格子の厳密解と不変部分空間
3. 学会等名 京都大学数理解析研究所 RIMS共同研究（公開型）「非線形波動現象の数理とその応用」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 土井 祐介
2. 発表標題 離散ブリーザーの滑らかな移動を実現する対称格子の構築
3. 学会等名 京都大学数理解析研究所 RIMS共同研究（公開型）「非線形波動現象の数理とその応用」
4. 発表年 2019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
研究 分 担 者	土井 祐介  (Doi Yusuke)  (10403172)	大阪大学・大学院工学研究科・准教授   (14401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------