

令和 5 年 6 月 5 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19K12003

研究課題名（和文）結晶構造における非線形ダイナミクスの新しい視点からの理解

研究課題名（英文）Study on Nonlinear Dynamics in Crystal Structure from a New Viewpoint

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

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：格子モデルにおける非線形ダイナミクスとして非線形ノーマルモードおよび非線形局在モードなどの非線形周期解に着目し数値シミュレーションおよび理論解析を実施した。分子動力学法と反復法を連結した周期解探索手法により、結晶格子モデルにおける移動型非線形局在モードの数値解を構築した。また、非線形局在モードの生成メカニズムの一つである特定のフォノンモードの不安定性と格子の対称性の関係を理論的に解析し、格子の対称性が高い場合においてもが不安定化することによるエネルギー局在化が可能であることを示した。さらに、格子の対称性の物性理論への適用として、3次の非線形性を持つ格子系においても対称性を有する格子が構築した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

結晶格子やメタマテリアルなどの周期構造体における非線形ダイナミクスの解析は、摂動法による解析的アプローチと大自由度時間発展シミュレーションのデータの統計的処理による力学特性の解析が行われてきた。しかし前者は弱非線形領域が解析対象であり、後者は統計的処理により重要な情報が埋もれてしまう。本研究では非線形性が強い領域における大自由度系の個々の要素のダイナミクスの追跡の重要性を、非線形周期解の解析により示した。非線形相互作用のパラメータや形状の調整によって、非線形周期解および関連する輸送特性を制御することが可能であることを示し、非線形メタマテリアルへの応用の可能性を示した。

研究成果の概要（英文）：Numerical simulations and theoretical analyses are performed focusing on nonlinear periodic solutions such as nonlinear normal modes and intrinsic localized modes as nonlinear dynamics in lattice models. We developed a numerical solution for moving intrinsic localized modes in a crystal lattice model using a periodic solution search method that combines molecular dynamics and iterative methods. We also theoretically investigate the relationship between zone boundary mode (ZBM) instability and lattice symmetry, which is one of the generation mechanisms of nonlinear localized modes, and show that energy localization due to ZBM destabilization is possible even when the lattice symmetry is high. Moreover, as an application of lattice symmetry to physical property theory, we constructed a lattice with symmetry even in a lattice system with third-order nonlinearity.

研究分野：非線形格子力学

キーワード：非線形局在モード 非線形波動 非線形振動 フォノン エネルギー輸送

1. 研究開始当初の背景

- (1) 原子振動の基礎研究から音響メタマテリアルの応用研究まで、力学モデルにおいては第一近似として相互作用を線形化することが幅広く行われてきた。しかし、微細スケールのダイナミクスにおいては微小な外力によっても大変位が生じ、材料が本質的に有する非線形性を考慮する必要がある。材料非線形、幾何非線形を陽に捉える非線形ダイナミクスは数理物理の分野で解析が進められてきた。非線形ダイナミクスにおいては振動モードの空間変調によるパターン形成や、エネルギー局在など多様なダイナミクスを生じ、結晶の構造変化のトリガーやエネルギー局在を用いたエネルギーハーベストなどへの応用が期待される。
- (2) 非線形ダイナミクスを解析する手段としての摂動理論は、その近似が成立する範囲内においては有用な情報を与えてくれるものの、強い非線形によるダイナミクスに基づく議論を行いたい場合にはその適用に限界がある。一方で、非線形相互作用を陽に取り込んだ原子モデルによる分子動力学シミュレーションでは、大自由度の系を扱うためにデータ処理が統計的になり、注目したい非線形ダイナミクスがデータに埋もれて見えなくなってしまう可能性がある。したがって、大自由度非線形系のダイナミクスを新しい視点からの解析手法が求められている。
- (3) 数理モデルにおける動力学解析において、非線形相互作用にはエネルギー局在構造の滑らかな移動に関係する隠れた対称性が存在することが明らかになってきた。この対称性を特定の結合強度を持つ長距離非線形相互作用を導入することにより実現されることが示された。この対称性の概念を一般化することによって現実の材料におけるエネルギー輸送特性と関連付けた議論を行うことが期待できる。

2. 研究の目的

- (1) 材料の原子スケールでのエネルギー局在現象、音響メタマテリアルの非線形ダイナミクスについて、格子モデルに基づく力学モデルの構築、モデルに基づくダイナミクスの統一的理解を目的としてミクロスケール非線形性は材料・音響メタマテリアルのフォノンモードおよびエネルギー局在構造にどのような影響を与えるか、を設定する。
- (2) 少数自由度から大自由度までの様々な自由度における非線形ダイナミクスとして周期解に着目する。分子動力学シミュレーションと反復法を結合した周期解探索コードを構築し、移動型の非線形局在構造の数値解を探索する。
- (3) 非線形格子系が持つ隠れた対称性に着目して解析を行う。格子の対称性が原子間の相互作用ポテンシャルの形状とどの容易な関係にあるかを明らかにする。さらに、格子の対称性による非線形ダイナミクスの変容、それによるフォノン散乱の抑制、弾道的エネルギー輸送、エネルギー輸送特性の変化などの材料物性への影響を解析する。

3. 研究の方法

- (1) 結晶格子における非線形ダイナミクスの解析ツールとして、分子動力学法と周期解探索アルゴリズム、安定性解析、摂動解析などの非線形動力学解析手法とを結合した非線形動力学解析ツールを構築した。分子動力学ソルバーとしては汎用パッケージであるLAMMPSを用いた。非線形動力学解析部分はPythonによる構築をベースとして、パフォーマンスが要求される部分についてはFortranを用いて実装した。
- (2) 非線形周期解として非線形ノーマルモードと非線形局在モードを探索した。得られた非線形周期解から、系の非線形性のパラメータ形状及び大きさが周期解の振動数、空間形状にどのような影響を与えるかを解析した。
- (3) 数理モデルにおけるウムクラップフリー格子の構築手法に基づいて、より一般的な格子系においてウムクラップ過程が抑制することが可能であるかを検討した。エネルギー輸送に関する分子動力学シミュレーションを行い、弾道的エネルギー輸送が実現可能であるかを検討した。分子動力学シミュレーションの各粒子の軌道データからスペクトル解析を行い、非線形ノーマルモードによるエネルギー輸送機構のメカニズムを解析した。

4. 研究成果

- (1) 構築した結晶格子モデルにおける非線形周期解探索コードにより、3次元金属結晶モデルにおける移動型非線形局在モードの数値解の探索に成功した。特定のサイズの格子系で得られた移動型非線形局在モードの数値解を粒子数を増やした拡張格子系に初期解として埋め込み、分子動力学シミュレーションを行うことにより、移動型 ILM が比較的長時間局在性を維持したまま形を伝播する事を確かめた。一方で、移動型非線形局在モードが自ら周辺に放出した微小はさざなみと相互作用することによって、移動性が失われ、静止型非線形局在モードに遷移するが確かめられた。以上により、構築した非線形周期解探索手法の有効性が確かめられた。さらにフォノンモードが移動型非線形局在モードの安定性を決定づける要因となることを明らかにした。
- (2) 長距離非線形相互作用を考慮した長距離 Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPUT)格子系において、フォノンバンドの境界に位置する Zone Boundary Mode(ZBM)に対して、特定の波数の摂動に対する安定性を決定する条件を解析的に明らかにした。得られた式に対する考察から、長距離 FPUT 格子系の非線形相互作用の結合強度と摂動に対する安定性を記述する関数の関係を明らかにした。さらに、結合強度の適切に設定することで、ある範囲の波数の摂動に対して安定性・不安定性の発生を制御可能であることを示した。
- (3) 3次の非線形相互作用を持つ格子系において、格子の対称性の概念を適用し、複素ノーマルモード座標で書かれた運動方程式に対して正常散乱とウムクラップ散乱を分離した。さらに、ウムクラップ過程に対応する散乱項が 0 にするための長距離非線形相互作用の形状と結合強度のセットを 2 種類見出した。3 次の非線形相互作用に対して得られたウムクラップフリー格子においてエネルギー輸送の分子動力学シミュレーションを実施し、一つのモデルに対しては弾道的熱輸送が実現されるものの、もう一方については弾道的熱輸送が実現されないことを確認した。
- (4) 非線形局在モードの移動性についての基本的な性質を明らかにするため、Pairwise Interaction Symmetric Lattice(PISL)における非線形局在モードと背景のフォノンモードの相互作用について数値シミュレーションにより体系的に解析した。長時間の時間発展においては、非線形局在モードが格子間隔よりはるかに長い特性長さで、かつ非常に長周期の往復運動を行うことが明らかになった。PISL においては格子に離散性由来する格子間隔を周期とするポテンシャル障壁は消失している。その一方で今回見出した周期運動の移動距離は背景のフォノンモードの波数によって変化することから、移動型非線形局在モードに対する実効的なポテンシャル障壁が新たに出現することが示唆された。さらに、平均化ラグランジアンに基づく粗視化ダイナミクスの動力学モデルを構築した。これにより PISL においては移動型非線形局在モードが格子の離散性から受ける影響が消失するものの、ノーマルモードが実効的な周期ポテンシャル場を形成し、その軌道に影響を生じることを理論的に確かめた。
- (5) 研究期間を通して、格子モデルにおける非線形ダイナミクスとして非線形ノーマルモードおよび非線形局在モードなどの非線形周期解に着目し数値シミュレーションおよび理論解析を実施した。分子動力学法と反復法を連結した周期解探索手法により、結晶格子モデルにおける移動型非線形局在モードの数値解を構築しその移動ダイナミクスを解析した。非線形局在モードとフォノンモードとの相互作用により移動型非線形局在モードの移動性が低下することが示された。この移動性の維持するためには、長距離非線形相互作用による格子の対称性が重要であると考えられるため、非線形メタマテリアルなどの人工周期構造体において知見が利用できると考えられる。非線形局在モードの生成メカニズムの一つである ZBM の不安定性と格子の対称性の関係を理論的に解析し、格子の対称性が高い場合においても ZBM が不安定化することによるエネルギー局在化が可能であることを示した。さらに、格子の対称性の物性理論への適用として、3 次の非線形性を持つ格子系においても対称性を有する格子が構築可能であること、またそのような格子においてはフォノン熱伝導におけるウムクラップ過程が抑制され、弾道的エネルギー輸送が可能である場合があることを確かめた。

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 1件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Yoshimura Kazuyuki, Kato Go, Doi Yusuke	4. 巻 446
2. 論文標題 A symmetry of potential function and non-relaxation theorems of heat flux in nonlinear lattice	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physica D: Nonlinear Phenomena	6. 最初と最後の頁 133638 ~ 133638
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physd.2022.133638	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 Takayanagi Jun, Doi Yusuke, Nakatani Akihiro	4. 巻 14
2. 論文標題 Modeling of a lattice model for nonlinear wave propagation in phononic crystals	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE	6. 最初と最後の頁 475 ~ 490
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1587/nolta.14.475	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
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 -

1. 著者名 DOI Yusuke, KOMIYA Takuya, NAGASHIMA So, NAKATANI Akihiro	4. 巻 70
2. 論文標題 Search of Nonlinear Energy Localized Structure in BCC Crystals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Society of Materials Science, Japan	6. 最初と最後の頁 330 ~ 335
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2472/jsms.70.330	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Archilla Juan F. R., Doi Yusuke, Kimura Masayuki	4. 巻 100
2. 論文標題 Pterobreathers in a model for a layered crystal with realistic potentials: Exact moving breathers in a moving frame	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 22206
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.100.022206	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 該当する

〔学会発表〕 計20件 (うち招待講演 6件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 Y. Doi, R. Yoneda, A. Nakatani
2. 発表標題 Numerical Simulation of Unstable Dynamics of Zone Boundary Modes in Pairwise Interaction Symmetric Lattices
3. 学会等名 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 J. Takayanagi, Y. Doi, A. Nakatani
2. 発表標題 Modeling of Dynamics of Nonlinear Wave Propagation in Phononic Crystals
3. 学会等名 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 土井 祐介, 長井 謙次郎, 中谷 彰宏
2. 発表標題 フラットバンド性を有する力学系の非線形振動解析
3. 学会等名 日本機械学会2022年度年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 J. Takayanagi, Y. Doi, A. Nakatani
2. 発表標題 Modeling of dynamics of nonlinear wave propagation in phononic crystals
3. 学会等名 CMD29, the 29th in the series of General conferences of the Condensed Matter Division of the European Physical Society (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Doi
2. 発表標題 Standing and traveling discrete breathers in bcc crystals
3. 学会等名 CMD29, the 29th in the series of General conferences of the Condensed Matter Division of the European Physical Society (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Doi
2. 発表標題 Molecular dynamics simulation of discrete breathers in three-dimensional crystals
3. 学会等名 CMD 29 online series, LCM 2021 - Localised nonlinear excitations in condensed matter. Theory and experiments (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Doi, R. Wada, A. Nakatani
2. 発表標題 Dynamics of discrete breathers in normal modes in a symmetric lattice
3. 学会等名 The 13th CHAOS 2020 International Conference (CHAOS2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yu. A. Kosevich, A. P. Chetverikov, Y. Doi
2. 発表標題 Localization of negative-effective-mass electron by supersonic kink in 1D lattice
3. 学会等名 The 13th CHAOS 2020 International Conference (CHAOS2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 土井祐介, 中谷彰宏
2. 発表標題 金属結晶における非線形エネルギー局在構造の解析
3. 学会等名 日本機械学会2020年度年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 J. Archilla, Y. Doi, M. Kimura
2. 発表標題 A Tight-Binding Model for Charge Transport in Silicate Layers
3. 学会等名 2020 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 K. Yoshimura, Y. Doi, M. Ebisu
2. 発表標題 Heat Transport in Pairwise Interaction Symmetric Lattice
3. 学会等名 2020 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Y. Doi, R. Wada
2. 発表標題 Interaction of Discrete Breather and Normal Modes in Pairwise Interaction Symmetric Lattice
3. 学会等名 2020 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 土井祐介, 中谷彰宏
2. 発表標題 非線形エネルギー局在の移動性に対するポテンシャル形状の影響
3. 学会等名 日本機械学会2019年度年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 土井祐介, 吉村和之
2. 発表標題 Pairwise Interaction Symmetric Latticeの一意性と解析的表現
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Doi
2. 発表標題 Numerical Study on Discrete Breathers in 3D Crystals
3. 学会等名 Japanese-Spanish Symposium on Energy Localization in Nonlinear Lattices (JSLoc2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 志岐一輝, 土井祐介, 永島壮, 中谷彰宏
2. 発表標題 非調和ポテンシャルを考慮した材料モデルにおける波動の時空間スペクトル解析
3. 学会等名 第5回材料WEEK若手学生研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小宮拓也, 土井祐介, 永島壮, 中谷彰宏
2. 発表標題 3次元結晶におけるエネルギー局在モードの探索とその移動性の数値的検討
3. 学会等名 第5回材料WEEK若手学生研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 土井祐介, 吉村和之
2. 発表標題 離散ブリーザーの滑らかな移動性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研究集会「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 Y. Doi, S. Hashimoto, A. Nakatani
2. 発表標題 Estimation of Mobility of Discrete Breather in a Nonlinear Lattice with Long-Range Interaction
3. 学会等名 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 K. Shiki, Y. Doi, S. Nagashima, A. Nakatani
2. 発表標題 Spectrum Analysis on Kinks in FPU Lattice with Next-Nearest-Neighbor Interaction
3. 学会等名 2019 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2019) (国際学会)
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

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
---------	---------