

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年 6月 8日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2010～2011

課題番号：22760066

研究課題名（和文）

結晶中での非線形エネルギー局在効果が創り出す動的構造変化の新モデルの構築

研究課題名（英文）

Study on modeling of dynamical change of atomic structure due to nonlinear localization

研究代表者

土井 祐介 (DOI YUSUKE)

大阪大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号：10403172

研究成果の概要（和文）：結晶中のミクロスケールに出現する振動モードとしての非線形局在モードについてその構造および安定性を解析、する分子動力学一周期解探索連結コードおよび分子動力学安定性解析連結コードを構築し、その妥当性を確かめた。それらのコードを用いて、グラフェンにおける非線形局在モードの構造・安定性解析を行い、不安定化直後の原子の振る舞いを詳細に解析し、非線形ダイナミクスによる結晶構造変化の可能性を示した。

研究成果の概要（英文）：We construct the numerical method in which molecular dynamics simulation is combined with numerical iteration method for searching periodic solutions and with linear stability analysis of the periodic solutions in order to investigate the structure and stability of intrinsic localized modes excited in crystals. We investigate the structure and stability of intrinsic localized modes systematically. The results indicate that the possibility of the change of the structure of crystals due to nonlinear energy localizations.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,500,000	450,000	1,950,000
2011年度	1,300,000	390,000	1,690,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,800,000	840,000	3,640,000

研究分野：計算力学

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：分子動力学，非線形格子力学，非線形局在モード

## 1. 研究開始当初の背景

数理物理の分野で注目されてきた非線形局在モード(Intrinsic Localized Mode, ILM)/離散ブリーザー(Discrete Breather, DB)は数理モデルによる解析のみならず、現実の物理系における存在についての解析の重要性が明らかになりつつあった。そのような背景のもと、結晶格子における振動モードとしてのILMの励起は原子スケールのダイナミクス

との関連もあり重要であると考えた。

## 2. 研究の目的

本研究の目的は、結晶格子中でのミクロスケールの構造変化のダイナミクスについて、力学系理論、非線形動力学理論の方法論を用いて解析し、新しい力学モデルを構築することである。特に非線形結晶モデルにおいて出現する特異な振動モードである非線形局在モ

ード (Intrinsic Localized Mode, ILM) / 離散ブリーザー (Discrete Breather, DB) と呼ばれるエネルギー局在構造の果たす役割に着目し、分子動力学シミュレーションと非線形動力学理論による安定性解析・分岐解析を融合して、結晶構造変化の初期段階における原子の集団的なダイナミクスを解析する。

### 3. 研究の方法

#### (1) MD・非線形解析連結ソルバーの構築

MD シミュレーションと周期解探索、安定性解析等の非線形動力学解析を連結した解析システムの構築を行なう。具体的にはグラフェンシート、カーボンナノチューブの炭素原子のダイナミクスを経験的ポテンシャルを用いた MD シミュレーションで追跡し、得られた時系列データを相空間での軌道と捉え、Newton-Raphson 法による周期解の探索、フロケ理論による周期解の安定性解析、モノドロミー行列の解析による局在構造の分岐解析を連結する。

#### (2) グラフェンでの ILM のダイナミクス解析

グラフェンシートおよびカーボンナノチューブにおける ILM の励起構造および安定性、不安定化直後のダイナミクスの数値シミュレーションを行う。さまざまな形状パラメータの系において周期解の探索を体系的に行い、励起する ILM の特性を詳細に解析する。さらに、ILM に対する安定性解析を行なうことによって、ILM によるエネルギー局在が不安定化することによって炭素-炭素結合がどのように組み変わるかを解析する。以上の解析結果を用いて、MD シミュレーションによって、ILM の励起、不安定化における原子のダイナミクスを追跡する。

### 4. 研究成果

(1) 原子スケールでの結晶構造中での ILM の構造探索のための分子動力学法-共役勾配法連結コードを開発した。多自由度系の相空間における周期解の探索のため、大多数の原子を凍結した状態から徐々に境界を拡大する手法を用いて、効率よく周期解を探索する方法を確立した。このコードを用いて MD シミュレーションによる時間発展で観測された ILM の詳細な構造を得ることに成功した。

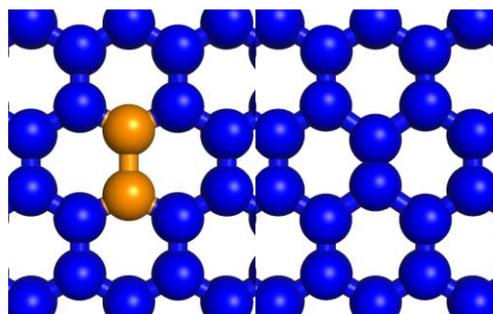
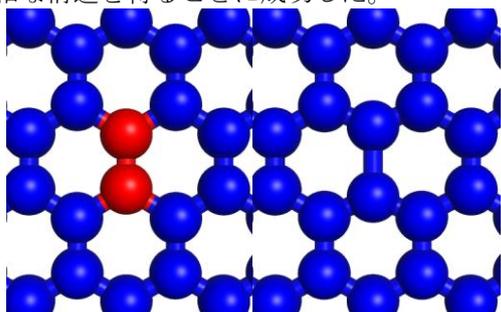


図1 数値解析によるグラフェンでの ILM の励起

(2) 数値解に対して、フロケ理論に基づいて時間発展の結果からモノドロミー行列を構成しその固有値解析から周期解の安定性を解析する計算コードを構築した。境界の大きさをパラメータとした体系的な解析を行うことにより、モノドロミー行列の固有値の分布の変化を確認し、計算コードの妥当性を確認した。

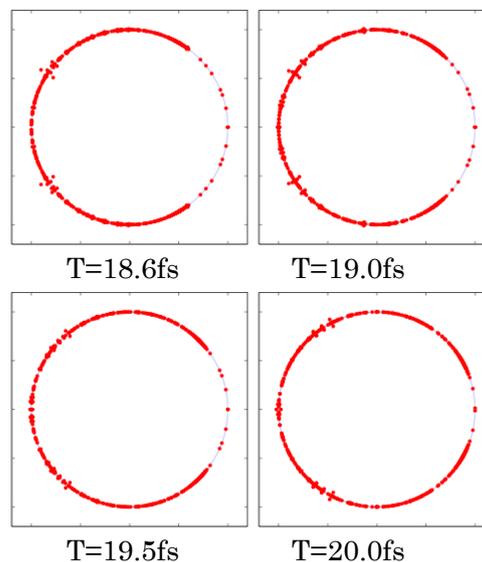


図2 安定性解析による固有値分布

(3) 安定性解析の結果より ILM の不安定化を誘起する不安定擾乱モードの構造が明らかになった。ILM に対して不安定擾乱モードを加えた条件で MD シミュレーションを行い、ILM の不安定化のダイナミクスについて解析を行った。

(4) 外部パラメータとしてひずみおよびせん断ひずみを系に導入した場合の ILM の構造および安定性の解析を行った。その結果、ひずみ量の変化によって ILM を不安定化させる不安定擾乱モードの形が変化することが確認された。

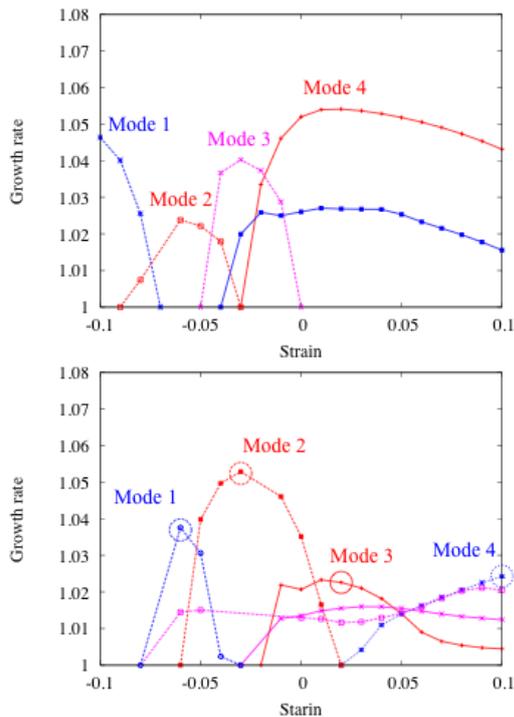


図2 ひずみによるILMの不安定成長率の変化

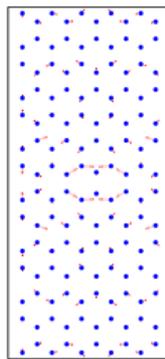


図3 不安定擾乱モードの構造

(5)曲率を与えたグラフェンにおける ILM の構造探索を体系的に行った。これにより ILM の構造及び安定性が曲率によって大きな変化を受けることを示唆する初期的な結果を得た。

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)

1. Y. Doi, A. Nakatani, Numerical study on unstable perturbation of intrinsic localized modes in graphene, Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, Vol.6, pp.70-81 (2012), 査読あり.
2. Y. Doi, A. Nakatani, Intrinsic localized mode as in-plane vibration in

two-dimensional Fermi-Pasta-Ulam lattices, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, Vol.1, pp.67-76 (2012), 査読あり.

3. 土井祐介, 中谷彰宏, ひずみを付加した結晶における非線形局在振動の安定性の解析, 日本機械学会講演論文集(第 24 回計算力学講演会(CMD2011)), No.11-3, pp.281-282,(2011), 査読なし
4. Y. Doi, A. Nakatani, Structure and stability of nonlinear vibration mode in graphene sheet, Procedia Engineering, Vol.10, pp.3393-3398 (2011), 査読なし.
5. 土井祐介, 中谷彰宏, 有限温度下における非線形エネルギー局在構造の安定性の解析, 第 1 回マルチスケール材料モデリングシンポジウム講演論文集, P58(USB) (2011), 査読なし.
6. 土井祐介, 中谷彰宏, 非線形エネルギー局在による結晶構造の変化の研究, 日本機械学会講演論文集(第 23 回計算力学講演会), No.10, 1030(CD-ROM) (2010), 査読なし.
7. 土井祐介, 中谷彰宏, グラフェンシートにおける炭素結合の大振幅振動の不安定化, 計算工学講演会講演論文集, No.15, pp.637-638, 査読なし.

[学会発表] (計 18 件)

1. 土井祐介・中谷彰宏・吉村和之, 離散ブリーザーの移動性に着目した対称格子の構成法, 日本物理学会第 67 回年次大会 (2012.3.24, 関西学院大学).
2. 土井祐介・中谷彰宏, グラフェンにおける非線形局在モードの数値シミュレーション, 日本応用数理学会 2012 年 研究部会連合発表会 (2012.3.9, 九州大学).
3. Y. Doi and A. Nakatani, Intrinsic Localized Modes in Strained Graphene Sheet, 2011 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA Workshop in Kyoto) (2011.11.30, Kyoto).
4. 土井祐介・中谷彰宏, ひずみを付加した結晶における非線形局在振動の安定性の解析, 第 24 回計算力学講演会, (2011.10.8, 岡山).
5. Y. Doi and A. Nakatani, Linear stability analysis of intrinsic localized modes in graphene, 2011 World Congress on Advances in Structural Engineering and Mechanics (ASEM'11+) (2011.9.21, Seoul, Korea).
6. Y. Doi and A. Nakatani, Intrinsic Localized Modes in Strained Graphene Sheet, 2011 International Symposium on Nonlinear Theory and its

- Applications (NOLTA2011) (2011.9.7, Kobe).
7. Y. Doi and A. Nakatani, Dynamical stability of intrinsic localized modes in graphene sheets, International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials (ISAM4) (2011.7.21, Tokyo).
  8. Y. Doi and A. Nakatani, Structure and stability of nonlinear vibration mode in graphene sheet, In Proc. of the 11th International Conference on the Mechanical Behavior of Materials (2011.6.7, Lake Como, Italy).
  9. 土井祐介・中谷彰宏, 有限温度下における非線形エネルギー局在構造の安定性の解析, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(2011.5.23, 大阪大学).
  10. 土井祐介・中谷彰宏, 非線形エネルギー局在による結晶構造の変化の研究, 第23回計算力学講演会 (2010.9.24, 北見工大).
  11. 土井祐介・中谷彰宏, グラフェンシートにおける炭素結合の大振幅振動の不安定化, 計算工学講演会(2010.5.28, 九州大学).

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年月日：  
国内外の別：

○取得状況 (計0件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年月日：  
国内外の別：

[その他]

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

土井 祐介 (DOI YUSUKE)