

京都大学教育研究振興財団助成事業
成 果 報 告 書

平成 30 年 4 月 2日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団

会 長 辻 井 昭 雄 様

所 属 部 局 工学研究科

職 名 助教

氏 名 木村 真之

| | | | | |
|---------------------------------|--|-------------|----------|--|
| 助 成 の 種 類 | 平成 29年度 ・ 研究活動推進助成 | | | |
| 申請時の科研費 研究 課 題 名 | 炭素原子鎖におけるエネルギー局在振動の基礎解析と応用へ向けた研究 | | | |
| 上記以外で助成金 を 充 当 した 研 究 内 容 | | | | |
| 助成金充当に関 わる共同研究者 | (所属・職名・氏名) | | | |
| 発表学会文献等 | (この研究成果を発表した学会・文献等) [国際会議発表] M. Kimura, NOLTA2017, Cancun, Mexico, B2L-A-1 (2017) | | | |
| 成 果 の 概 要 | 研究内容・研究成果・今後の見通しなどについて、簡略に、A4版・和文で作成し、添付して下さい。(タイトルは「成果の概要／報告者名」) | | | |
| 会 計 報 告 | 交付を受けた助成金額 | 1,000,000 円 | | |
| | 使用した助成金額 | 1,000,000 円 | | |
| | 返納すべき助成金額 | 0 円 | | |
| | 助成金の使途内訳 | 費 目 | 金 額 | |
| | | 設備備品費 | 129,600円 | |
| | | 消耗品費 | 150,300円 | |
| | | 旅費 | 650,500円 | |
| その他(学会参加費など) | | 69,600円 | | |
| 当財団の助成に つ い て | (今回の助成に対する感想、今後の助成に望むこと等お書き下さい。助成事業の参考にさせていただきます。) この度は、研究活動推進助成に採択いただき誠にありがとうございました。貴財団のご支援のおかげで、研究活動を中断すること無く行うことができ、H30年度の科研費にも無事に採択されました。これも貴財団のご支援あってのことと深く感謝しております。今後もこのような助成を続けていかれることを期待しております。 | | | |

平成 30 年 4 月 2 日

成果の概要/木村真之

平成 29 年度・研究活動推進助成
工学研究科 木村真之

本報告書では、平成 29 年度・研究活動推進助成を受けた研究テーマ「炭素原子鎖におけるエネルギー局在振動の基礎解析と応用へ向けた研究」の成果について述べる。

本研究テーマは、近年盛んに研究が行われるようになったフォノンエンジニアリング分野での応用を目指したものである。ナノ領域での熱制御を目指すフォノンエンジニアリングにおいて、究極の目的の 1 つは、物質を構成する原子や分子の振動の制御である。原子や分子の振動を正確に取り扱うためには、その微細さが故に量子力学が必要であるが、近似的には古典力学的にも十分取り扱えることが知られている。すなわち、結晶格子などの構造は、古典的な結合振動子として取り扱うことができる。申請者は、この結合振動子の特別な場合である、1 次元結合振動子を対象として数理的な研究を遂行してきた。とくに、振動エネルギーが空間的に局在して拡散しない現象、すなわちエネルギー局在振動の性質を詳しく調べてきた。

エネルギー局在振動は、その局在性を保ったまま系を移動できることが知られている。したがって、この局在振動を制御できれば、結合振動子においてエネルギーの流れを制御できることになる。もし、原子や分子を使って 1 次元の結合振動子と同じような構造が実現できれば、現実の世界でも同じようにエネルギーの流れ、すなわち熱流を制御できるはずである。実際、炭素原子を 1 次元的につなげた炭素原子鎖は実験的に実現されており、さらに、熱伝導の異常性などが数値シミュレーションによって指摘されている。

本研究では、炭素原子鎖をモデルとして、移動型のエネルギー局在振動を主に対象として研究を行う。炭素原子鎖モデルは 1 次元の非線形結合振動子としてモデル化できるが、従来と異なり、各原子が 3 次元的に移動できる。すなわち、1 次元結合振動子の軸方向以外の自由度を考慮せねばならない。この余分な自由度がエネルギー局在振動に及ぼす影響はこれまで余り調べられてこなかった。そこで、従来からよく知られている Fermi—Pasta—Ulam (FPU)格子を拡張した、Flexible-FPU 格子を提案し、エネルギー局在振動の性質を詳しく調べることにした。

これまでの研究において、Flexible-FPU 格子では、従来型の軸方向振動が局在する縦振動型局在振動 (L-ILM: Longitudinal Intrinsic Localized Mode) の他に、軸に直交した振動を主成分とする横振動型局在振動 (T-ILM: Transverse Intrinsic Localized Mode)、および軸周りに回転する回転型局在振動 (R-ILM: Rotating Intrinsic Localized Mode) の存在が明

らかになっている [Kimura *et al. Lett. on Mater.* **6** (2016) 22-26]. さらに, 安定性を詳しく調べた結果, 従来型の FPU 格子で安定であった局在振動も, Flexible-FPU 格子においては不安定化することも明らかになっている [Kimura *et al. NOLTA, IEICE* **8(2)** (2017) 153-161].

本研究では, 局在振動解の移動性に着目して検討を行った. 従来型の FPU 格子では, 格子の端点を加振すると, ある条件下で移動型局在振動が一定の間隔で生成されることが知られている. この現象が, Flexible-FPU 格子でも生じるかどうかを数値的に検討した. 結果, 上記の静止型局在振動解の安定性と異なり, 移動型局在振動は従来と同様に生成されることが明らかになった. 一方で, 移動型の横振動型, 回転型局在振動は, 現時点では, 単純な端点加振では生成できていない. 端点加振の振幅を時間的に変動させるなど, 従来法を拡張すれば回転型局在振動を生成することはできるが, 何れの方法においても横振動型の生成には成功していない. 理由は現在検討中である.

上記の研究の他, 移動型局在振動の数値的生成法に関する検討も行った. 静止型局在振動解の振幅分布を摂動する手法や, ガウス波束を離散化して用いる方法などを検討した. その結果, 変位成分として静止型局在振動解, 速度成分としてその解の固有ベクトルを用いる方法が, 最も寿命が長く速度の速い移動型局在振動を生成できることが明らかになった. さらに, 静止型局在振動解の包絡線を用いる手法を開発し, 上記の固有ベクトルを用いる手法と遜色ないことを確かめた. この手法の利点は静止型局在振動解の振幅分布が分かれば移動型局在振動を生成できることで, 今後, 移動型局在振動の数値的研究に生かしていきたいと考えている.

上記のように, 貴財団の助成により本研究を滞りなく遂行できました. ここに深く感謝いたします.

上記の研究成果は, 以下の国内外の学会で発表した.

- [1] 田中宗一郎, 木村真之, 土居伸二, "オンサイトポテンシャルを導入した柔軟な FPU 鎖における端点加振による移動型 ILM の生成に関する検討", 応用物理学会 秋季学術講演会, (CD-ROM), 福岡, 2017.9.5-8.
- [2] 木村真之, 土居伸二, "数値実験のための波束を用いた移動型非線形局在振動の生成法に関する一検討," 電子情報通信学会 信学技報, vol. 177, no. 226, pp. 51-54 (2017)
- [3] 田中宗一郎, 木村真之, 土居伸二, "柔軟な FPU 鎖の端点加振による移動型 ILM の周期的生成に関する数値的検討," 電子情報通信学会 信学技報, vol. 117, no. 272, pp. 89-93 (2017)