

自己評価報告書

平成23年5月9日現在

機関番号：17102

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2008～2012

課題番号：20111003

研究課題名（和文） 自己組織化における構造形成原理と外生雑音の機能的役割

研究課題名（英文） The functional role of structure formation principle and outside noise in self-organization

研究代表者

甲斐 昌一 (KAI SHOICHI)

九州大学・大学院工学研究院・教授

研究者番号：20112295

研究分野：応用物理、非線形物理

科研費の分科・細目：(1)分科) ナノ・マイクロ科学 細目) ナノ材料・ナノバイオサイエンス
(2)分科) 材料化学 細目) 機能材料・デバイス

キーワード：自己組織化・創発ノイズ・階層性・揺動定理・確率共鳴・ナノ構造・VLS プロセス・分子動力学法

1. 研究計画の概要

非平衡開放系は階層性と創発性の基本であり、普遍性の高い研究課題である。最近、このような系に見られる自己組織化現象で内部揺らぎや外部雑音が重要な役割を果たすことが見いだされた。生まれる構造と生じる物性・機能は互いに密接に関連し、そのため形成原理や雑音の役割の解明は、期待する新機能をもった分子ナノシステム的设计プログラムと密接に結びつき、重要である。

本研究では、物理・生体系における自己組織化階層構造の構築原理を確立し、雑音の機能的役割を明らかにする。あわせて、その発展として分子ナノシステムでの自己組織化現象における雑音の機能性と制御原理、ならびに創発機構の解明を図る。

2. 研究の進捗状況

(1) 基板上におかれた金属触媒液滴により結晶成長を促進することで、ナノワイヤー上の単結晶構造を形成する Vapor-liquid-solid(VLS)法は実験的に広く用いられている。我々は領域内の実験グループと共同研究によりその形成メカニズムを明らかにした。モデル系についての分子動力学シミュレーションにより、液滴による結晶促進効果の本質が液-固界面での界面張力低減による臨界核形成率の著しい増加に起因することを突き止めた。これは、安定的なワイヤー形状を形成するための最適供給圧が存在することを示唆する重要な結果になっている。

(2) 近年、巨大分子ネットワークの回路特性が活発に研究されており、神経回路の応用な

どで重要である。そのような微細回路で発現するクーロンブロッケイドについて時間発展型モンテカルロシミュレーションを行い、その電流電圧特性を研究した。まず、大きな電圧での漸近解を解析的に求め、シミュレーションや実験との比較を通じてその解の有用性を明らかにした。また、回路構造が電流電圧特性に反映する実験事実を踏まえ、様々な回路構造についてシミュレーションを行い、物性の回路幅依存性や構造依存性などの知見を得た。

(3) 非平衡開放系のマクロ揺らぎであるソフトモード乱流を対象とし、輸送現象に対する揺らぎ定理を通して、その統計力学的性質を明らかにした。揺らぎ定理の成否が粗視化スケールによって変化し、短い時間スケールでは揺らぎ定理が成り立たないことがわかった。つまり階層性によって統計力学的性質が変わることが明らかとなった。

3. 現在までの達成度

<区分>

②おおむね順調に進展している。

領域内の異なった研究グループ・他班との共同研究は順調に進行しており、中間評価でも高い評価を受けた。またそれとは別に領域全体の哲学的・理念的な研究課題である創発現象と雑音の役割に関する研究も平行して、我々研究グループ独自の物理学的学理として進行している。その自己評価としては下記のようなになる。

(1) 領域内の化学グループに新しい概念を持ち込んだ共同研究は予想以上の進展を進め、学際的・融合的研究成果として大きな成果を

あげた。これは期待以上であり、この課題に関しては100%以上の成果と考えている。

(2) 我々の本来の学理探求については、揺らぎ定理の課題がほぼ計画通りに進行しており、5年のうち3年終了した時点で70%の進行状況と評価している。一方、外生雑音の役割や学理については、研究の主点を(1)の融合研究に集中したため現在約25%程度の達成状態である。

4. 今後の研究の推進方策

(1) VLS法によるナノワイヤー形成について、外生雑音や付加的な非平衡条件などによる外力制御の可能性について、分子動力学シミュレーションを用いて検討する。

(2) 巨大分子ネットワークのクーロンブロッケイドに対する外生雑音の効果をモデルシミュレーションによって明らかにする。そのための基礎的知見として、ネットワーク構造の特徴付けと電流電圧特性の関係や、交流電圧に対する周波数応答についても明らかにする。

(3) 非平衡開放系のマクロ揺らぎであるソフトモード乱流について、揺らぎ定理を通して明らかにした統計力学的性質を一般化するために、一般化Langevin方程式による記述を試みる。

(4) 外生雑音の役割りについては、非平衡開放系に特徴的な時空相関をもつ雑音の役割りを、モデルシミュレーションによって明らかにする。

5. 代表的な研究成果

(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19件)

- ① F. Nugroho, Y. Hidaka, S. Kai, et al., Magnetic Field Dependence of Spatiotemporal Chaos in a Homeotropic Nematic System, J. Phys. Soc. Jpn., Vol.79, No.12, pp.123001-1-4, 2010, 査読有
- ② M. Suzuki, Y. Hidaka, S. Kai, et al., Numerical study on the difference in mechanism between vapor-solid and vapor-liquid-solid solidification processes, Phys. Rev. E, Vol. 82, pp. 11605-1-7, 2010, 査読有
- ③ Y. Hidaka, S. Kai, et al., A nonequilibrium temperature and fluctuation theorem for soft-mode turbulence, Physica D, Vol.239, pp.735-738, 2010, 査読有
- ④ R. Anugraha, Y. Hidaka, S. Kai, et al., Symmetry-Dependent Defect Structures in Soft-Mode Turbulence, Phys. Rev. E, Vol.80, No.4, pp.041701-1-4, 2009, 査読有
- ⑤ J.-H. Huh, S. Kai, et al., Noise-Controlled Pattern Formation and Threshold Shift for

Electroconvection in the Conduction and Dielectric Regimes, Phys. Rev. E, Vol. 80, 066304-1-19, 2009, 査読有

その他14件

[学会発表] (計63件)

- ① M. Suzuki, Y. Hidaka, S. Kai, et al., Theoretical study on VLS nanowire formation using molecular dynamics simulation, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies, 2010/12/17, Hawai'i Convention Center, Honolulu, Hawai'i, U.S.
- ② 日高芳樹, 鈴木将, 甲斐昌一, 他, 時空カオスの2重構造と揺らぎ定理, 基礎研究会2010非平衡系の物理-非平衡ゆらぎと集団挙動-, 2010/11/19, 京都大学基礎物理学研究所湯川記念館
- ③ 鳴海孝之, 日高芳樹, 鈴木将, 甲斐昌一, 多重ポテンシャルにおける確率共鳴, リズム現象の研究会V, 2010/5/28, お茶の水女子大学
- ④ 甲斐昌一, 階層と自己組織化, 2009年春季第56回応用物理学関係連合講演会, 2009/3/31, 筑波大学, (招待講演)
- ⑤ 甲斐昌一, 雑音が誘起する複雑現象と脳における確率共鳴, 平成20年度文部科学省「グローバルCOEプログラム」『現象数理学の形成と発展』キックオフフォーラム, 2009/3/7, 明治大学紫紺館, (招待講演)

その他58件

[図書] (計4件)

- ① 日高芳樹, 甲斐昌一, 液晶のパターンダイナミクス/滑りと摩擦の科学, 培風館, pp.1-92, 2009年
- ② 甲斐昌一, 自己組織化ハンドブック, NTS, pp. 8-10, 2009年
- ③ 日高芳樹, 自己組織化ハンドブック, NTS, pp.231-235, 2009年
- ④ 甲斐昌一, 未来を動かすソフトアクチュエータ-高分子・生体材料を中心とした研究開発-, シーエムシー出版, pp. 135-145, 2010年

[その他]

社会・国民への発信;市民講演

- ・ 甲斐昌一, 市民講演会「雑音の思いがけない役割」, 日本物理学会2010年秋季大会, 2010/9/23, 大阪府立大学中百舌鳥キャンパス, 堺市