

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 6 月 23 日現在

機関番号：32687

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2016

課題番号：15K17582

研究課題名(和文) ナノ粒子分散系のモデル化と制御 --実験のデザインに向けて--

研究課題名(英文) Modelling and controlling dispersion of nanoparticles -- Toward experimental design --

研究代表者

小林 幹 (Kobayashi, Miki)

立正大学・経済学部・専任講師

研究者番号：10547011

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,000,000円

研究成果の概要(和文)：溶媒中に存在する微粒子の運動、例えば水の上に浮かぶナノ粒子の運動、を制御することはナノテクノロジーの観点から重要である。しかしながら、溶媒中の微粒子は、それぞれの粒子間の相互作用や水分子との衝突により複雑に運動するので、その運動を完全に制御することは大変難しい。本研究ではそのような微粒子の複雑な運動の一因である熱揺らぎを制御する理論を構築した。そしてその理論を分子動力学でモデル化された粒子に適用し、揺らぎを制御することに成功した。

研究成果の概要(英文)：To control the motion of small particles in some solvent, for instance nano-particles floating on the water, is important from the view point of nanotechnology. However, the control is difficult because the motion is quite complex due to the interaction among each particle and the thermal fluctuation by collisions with solvent molecules. In this research, we have constructed a theory to control the thermal fluctuation and applied the theory to the motion of particles which is represented by molecular dynamical systems.

研究分野：応用数学

キーワード：力学系 制御理論

## 1. 研究開始当初の背景

溶媒中に存在する複数のナノ粒子（物質をナノメートルのオーダーの粒子にしたもの）は互いに強い引力相互作用により引かれ合い凝集する。凝集したナノ粒子を分散させること（分散度を上げること）は容易ではないが、実用上（例えば、化粧品やインクなど）は分散された状態が望まれることが多々ある。よって、溶媒中で凝集したナノ粒子（ナノフルイド）の分散度を上げるための方法を理論的な立場で構築し、その理論を実験に適用できるように整備し、より良い分散手法を提案することは非常に重要である。また、テクノロジーの種類によっては分散度が小さい状態（つまり、よりたくさんの粒子が凝集している状態）が望ましい場合もあるであろう。このことを鑑みると、ナノフルイドの分散度の大小を思いのまま制御できることが望ましいと思われる。そのため、本研究では分散度を完全に制御するための方法を構築する。

## 2. 研究の目的

溶媒中のナノ粒子（ナノフルイド）の分散度を制御することは学術のみならず産業としても大変重要である。それにも関わらず、ナノフルイドの分散化に関する多くの方法が経験に頼っており、理論らしい理論はほとんどない。本研究により、系統だった理論が構築されれば、より効率的にナノ粒子の分散化を行う事が可能となり、大学の研究室においてのみならず産業界においても大きな影響を与えることになると思われる。最近、望む機能を備えた材料をデザインするための研究が重要視されているが、本研究によって、望む粒子半径を持ったナノ粒子を作り出すという意味で一種の材料デザインの方法の理論的提案を与えられる可能性がある。

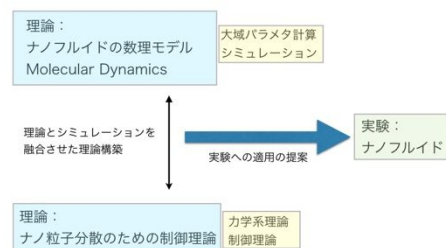
## 3. 研究の方法

この目的を実現するために、制御理論と力学系理論を融合させた新しい制御理論を構築し、それをナノ粒子の分散制御に適用する。具体的には、粒子に加わる熱揺らぎの効果をj用いて分散度合いを制御することを行う。すなわち、分散度を上げたければ粒子に加わる熱揺らぎの効果を大きくし、逆に分散度下げたければ熱揺らぎの効果を小さくする。注意すべきは、本方法は、温度を変化させて熱揺らぎを制御するという従来の方法とは異なり、制御理論の方法を用いてシステムに制御機構を組み込むことで粒子に与える熱揺らぎの効果を制御する。

まとめると、本研究は、ナノフルイドの分散を制御するための理論を構築し、その理論を用いて分散度を制御するための実験手法を提案することが目的である。そのための重要なアイデアは、熱揺らぎを用いて分散を制御することである。

## 4. 研究成果

研究成果のまとめ



本研究における最も重要なアイデアは、粒子に加わる熱揺らぎの効果をj用いて粒子の分散を制御することである。このアイデアを具現化するために、熱揺らぎを制御するた

めの制御理論と、その制御理論を基にした制御機構を取り入れたナノフルイドの数値モデルを構築した。そのための研究計画として、大きく分けて以下の2つの研究を行った。

(1) 制御理論を用いてナノ粒子分散に対する一般的な理論を構築した。ここでは、力学系理論と制御理論を融合させた。具体的には、カオス制御で用いられている遅れ時間フィードバック法を熱揺らぎの制御へ適用した。結果として、フィードバックに用いる遅れ時間を長くすればするほど粒子に加わる揺らぎが抑えられることを理論的に示した。これは、フィードバックに用いる遅れ時間をチューンすることで揺らぎを完全に制御できることを意味している。これにより、粒子に加わる揺らぎの大きさを制御することで粒子の分散を制御することができる。本研究は筑波大学の安東弘泰氏と共同で研究を行い、いくつかの学会発表と論文執筆を行った。

(2) ナノフルイド多体系のモデルを分子動力学の観点から構築した。その際、(1)で考えた分散を制御するための制御機構をモデルに取り込んだ。本研究では、第一歩として最もシンプルなモデルである空間1次元で粒子の形は円形を仮定した。制御機構をモデルに取り入れる際には、実際に実験を行う場合を想定し、実験家とも議論しながら、実験へ適用しやすい制御機構の構築も同時に行った。具体的には、すべての粒子に対して制御を行うのではなく、いかに少ない数の粒子のみに対して制御を行い、全体の分散度を制御するかの考察を行った。この考察を行うために、(1)の制御理論構築と(2)の数値モデルを相互に関連させながら研究を行った。

以上、(1)、(2)の研究では実際に実験系への適

用は行っていないが、ナノフルイドの分散を制御するための実験手法の提案を行うことは可能となった。引き続き、実験家と議論しながら本方法を実験へ適用するための研究を行っていく予定である。その際、実験器具における制約や観測ノイズなどを考慮した理論の修正と拡張を考慮しながら研究を進めていく予定である。

さらに、本方法はナノフルイドの分散だけでなく、様々なテクノロジーへ適用可能であると考えている。なぜならば、すべてのナノテクノロジーを構成している要素の大きさはナノオーダーなので揺らぎの効果を無視することができず、場合によっては揺らぎを抑えることでテクノロジーのパフォーマンスが向上することは十分考えられる。一方、近年では揺らぎを積極的に利用してナノテクノロジーのパフォーマンスを向上させるという考えも存在する。その場合でも揺らぎの大きさを最適な値に制御することが必須となり、本研究で得られた結果が適用できると思われる。今後、様々な応用を視野に入れて本研究をさらに広げていく。特に、近年様々なテクノロジーで用いられている動的ネットワークへ適用していくことを考えている。

## 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5件)

H. Ando, K. Takehara, M.U. Kobayashi  
「Delay sober up drinkers: Control of diffusion in random walkers」Physical Review E, 査読有, accepted.

M.U. Kobayashi and H. Ando, 「時間遅れフィードバックを用いた拡散制御」, 自動制御連合講演会会議録, 査読無, 59巻 ThB4-4 (2016).

H. Ando and M.U. Kobayashi, 「時間遅れフィードバックによる他粒子系の拡散

制御」,自動制御連合講演会会議録, 査読無, 59 巻 SaA2-5 (2016).

M.U. Kobayashi and Y. Saiki, 「Network Analyses of Chaotic Systems」, Proceedings of NOLTA 2016, 査読有, p. 1187 (2016).

H. Ando and M.U. Kobayashi, 「A Feedback Control of Fluctuations in Simple Molecular Dynamics」, Proceedings of the 4<sup>th</sup> IFAC Conference on Analysis and Control of Chaotic Systems, 査読有, 4 巻, p. 262 (2015).

〔学会発表〕(計 4 件)

M.U. Kobayashi, 「Control Diffusion of Random Walkers」 Dynamics Days 2017 (2017) Silver Spring, MD, US.

小林 幹, 「時間遅れフィードバックを用いた拡散制御」自動制御連合講演会 (2016) 北九州国際会議場(北九州).

M.U. Kobayashi, 「Network Analyses of Chaotic Systems」NOLTA 2016 (2016)New Welcity Yugawara, Atami.

小林 幹, 「制御理論のナノシステムへの適用」, 化学工学会 2016 春季大会 (2016), 関西大学(大阪).

〔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

小林 幹 (KOBAYASHI, Miki)  
立正大学・経済学部・専任講師  
研究者番号 : 10547011

(2)研究分担者

( )

研究者番号 :

(3)連携研究者

( )

研究者番号 :

(4)研究協力者

( )