# 科学研究費助成事業

# 研究成果報告書



平成 26 年 6 月 2 日現在

機関番号: 1 4 4 0 1
研究種目: 挑戦的萌芽研究
研究期間: 2012 ~ 2013
課題番号:24656126
研究課題名(和文)群論に基づく自己集合化・自己組織化パターン形成の分子流動シミュレーション
研究課題名(英文)Molecular fluid simulation for self-organized/self-assembled pattern formation by ap plying group theory
研究代表者
川野 聡恭 ( Kawano, Satoyuki )
大阪大学・基礎工学研究科・教授
研究者番号:00250837
交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 3,100,000円、(間接経費) 930,000円

研究成果の概要(和文):基板表面に形成される分子の自己組織化・自己集合化パターン形成のメカニズム解明に向け て,原子間力顕微鏡による分子像の観察と数理モデルの構築を行った.マイカやグラファイト表面においてDNA断片の 自己集合化パターンが成長する過程を観察し,その時系列データの取得に成功した.基板表面と吸着分子の相互作用を 考慮し,DNAを粗視化した分子動力学シミュレーションを行うとともに,さらに長時間の現象を再現するために反応拡 散モデルを提案した.表面構造の対称性について,群の既約表現に対応する関数を反応項に考慮したシミュレーション を行った結果,パターン形成に対する表面構造の影響を考察するためのパラメータが見出された.

研究成果の概要(英文): To clarify a pattern formation mechanism resulting from self-organization or selfassembly of molecules, we have performed experimental observations, theoretical developments, and molecula r dynamics simulations. We successfully visualized self-assembled patterns of DNA fragments on mica and hi ghly oriented pyrolytic graphite surfaces by atomic force microscopy. In addition to a coarse-grained mole cular dynamics simulation, a reaction-diffusion model is applied to represent slow growths of the self-ass embled patterns, in which symmetries of surfaces can be implemented by symmetric functions resulting from irreducible representations of group theory. Consequently, various self-assembled patterns which depend on surface conditions could be simulated in the practical temporal and spatial scales in comparison with exp eriments. Some parameters sensitive to the surface conditions were found out.

研究分野:工学

科研費の分科・細目: 機械工学・流体工学

キーワード: 分子流体力学 自己組織化 自己集合化 対称性 群論 分子流動シミュレーション

# 1. 研究開始当初の背景

近年の MEMS/NEMS 技術の発展に伴い, 複雑なマイクロ・ナノデバイスや新機能材料 の研究開発が盛んに行われている.特に、ナ ノ粒子や分子の流動を能動制御しながら基 板表面に自己集合化または自己組織化させ ることで新奇な機能を発現させることが可 能となってきた.しかしながら,電解質溶液 における複雑な流動現象や基板表面近傍に おける吸着・脱離過程や自己組織化・自己集 合化に対する基板材料の依存性については 未解明な部分が多い.現状の技術をさらに確 実なものとするためには、溶液におけるイオ ンや分子の振る舞いを正確に理解し、その流 動を制御するための方法論の確立が望まれ る.我々は、以前よりイオンおよび分子の視 点から、それらの流体中における運動につい て実験と理論の両面からアプローチしてき た実績があり、本研究ではさらに、基板表面 の存在を加味した自己集合化・自己組織化と いった工学的にも注目される現象に着目す る.現象を分子スケールで扱う際には、時空 間スケールが限られることから、実現象のス ケールを定量的に評価することはきわめて 困難とされるが、そのような問題を克服する ための一手法を提案する.たとえば,我々の 先行研究において、無限に存在し得る系の構 造に対してその対称性を考慮するとき,群論 を適用することでその取り得る数を数え上 げる方法を示している (K. Doi et al., Phys. Rev. E 84 (2011), pp.011805 (8pages)).本研究では, そのような理論的背景を応用し、図1の模式 図に示すような、基板表面の対称性がその上 に形成される分子の自己集合化パターンに 及ぼす影響について調べる. 分子動力学法 (MD) を用いた現象解明のアプローチと限 界を示し、さらに、反応拡散モデルによる広 域・長時間のシミュレーションを行う.特に, 反応拡散モデルにおいて, 基板表面の対称性 を有する構造を加味し,分子がそのような表 面と相互作用しながら自己集合化する場合 について議論する.また,DNA 断片を用いて, マイカや高配向性熱分解グラファイト (Highly oriented pyrolytic graphite: HOPG)表面 において自己集合化ネットワーク構造を形 成させ,実際の解析結果と比較・検証する.

2. 研究の目的

本研究では、現象の時空間スケールに着目 し、DNA 分子を粗視化することにより広域か つ長時間の MD シミュレーションを実現する とともに、吸着後の反応と拡散による長時間 の緩和過程を考慮した解析を行い、自己集合 化構造の時間発展についてその詳細を調べ る.そのなかで、自己集合化パターン形成に おける系の対称性の影響を考慮した解析手 法について検討する.それにより、パターン 形成に対する基板表面の持つ対称性の影響 を調べることを可能にするとともに、解析時 間の高効率化を実現する.



図 1. 基板表面における吸着分子による自己組 織化(自己集合化)の模式図.

研究の方法

### 3.1. DNA 断片の自己集合化構造

50 塩基対の DNA 断片を HOPG 基板表面に 自己集合化させ、原子間力顕微鏡(AFM)に より観察を行う. HOPG は炭素原子のみから なり, 原子レベルで平坦な表面が得られるこ とから,自己集合化像の観察に適している. また、伝導性があることから更なる応用が期 待される. しかしながら, 一般に, DNA 分子 は水溶液中で負に帯電しており, HOPG 基板 表面はπ電子で覆われていることから,両者 の間には斥力が働き,吸着は起こらないとさ れる. そこで、DNA 断片を HOPG 表面に吸 着させるために,表面の電子をあらかじめカ ウンターイオンで遮蔽した後に,その上に DNA を自己集合化させることを提案する(雑 誌論文(1)). 本研究では, MgCl<sub>2</sub> 溶液を 40 µmol/L および 100 µmol/L に調製し, それぞ れ 10 μL の液滴を 2 枚の HOPG 基板で挟み, それらを電極として極板間距離を1mmに固 定して2Vの電圧を1h印加する.この操作 により,水溶液中の Mg<sup>2+</sup>と CL<sup>-</sup>が,カソード とアノードにそれぞれ分離される.両電極を 引き離した後, さらに 12h 放置する.これに より,カソード側では,表面に一様に Mg<sup>2+</sup> が分布し、HOPGのπ電子が遮蔽される.次 に, Mg<sup>2+</sup>で覆われた HOPG 表面に, 0.5 µmol/L に調製した DNA 水溶液の 10 µL を基板表面 に滴下し、一定時間置いた後、エアジェット で液滴を除去する. ここで, 40 µmol/L の MgCl<sub>2</sub>溶液で表面処理をした場合は, DNA 溶 液を滴下後 50,60 または 70 min 放置し,100 umol/L MgCl<sub>2</sub>を用いた場合は、液滴除去まで の放置時間を10,20 または30 min とする. そ の後, AFM のダイナミックフォースモードで 自己集合化像を観察する. なお, これら一連 の手順は、室温・大気圧化で行う.

#### 3.2. DNA の粗視化モデル

DNA の自己集合化過程を明らかにするた

めに,分子動力学(MD)シミュレーション を行う.しかしながら,50塩基対のDNA断 片を原子スケールで扱いながら,それらが自 己集合化する過程を解析することは現実的 でないことから,粗視化モデルを構築するこ とを提案する(雑誌論文(1)).我々は,先行 研究においてDNAの粗視化モデルを開発し

(K. Doi et al., Phil. Trans. R. Soc. A 368 (2010), pp. 2615-2628.),物理化学特性の評価を行っ てきた経験から、それを基に今回のモデルを 考案する.3 塩基対を一粒子とし、それらを 線形バネで連結することで DNA 分子を模擬 する.17粒子を連結して50塩基対を模擬し、 その一粒子は6個の負電荷を持ち、線形バネ に加えて粒子間の相互作用を考慮するため に Coulomb ポテンシャルと Lennard-Jones ポ テンシャルを与えている.また, DNA 断片の 解離末端や粘着末端が結合して自己集合化 するとされることから, 末端の粒子には水素 結合を表す Morse ポテンシャルを与える. 質 点間の平衡距離, ばね定数および一粒子の流 体半径は先行研究の値を参考にし、平衡状態 において 50 塩基対 DNA の拡散係数を再現す るようにパラメータを決定する.実際の溶液 中では, DNA の負電荷と同数の陽イオンが含 まれているため、電気的中性が保たれている. ここでは,実験環境を考慮して Mg<sup>2+</sup>イオンを 付加することにより溶液の電気的中性を保 つこととする. 一方, HOPG 基板表面の π 電 子は、MgCl<sub>2</sub>溶液で前処理されることから Mg<sup>2+</sup>イオンにより遮蔽されているものとし, その表面と DNA 断片の間には分子間力が働 くものと仮定して Lennard–Jones ポテンシャ ルを与えている.上述の相互作用ポテンシャ ルにより粗視化粒子と Mg<sup>2+</sup>イオンの力場を 与え,溶媒の影響をランダム力として Langevin 方程式を解くことにより時間発展を 調べる.これにより,自己集合化パターン形 成の素過程と現象の時空間スケールが明ら かにされる. さらに、1 µs 程度のシミュレー ションを必要とするため、時間積分の効率化 を図る必要があることから、近距離力(r<sub>ii</sub> < 1.5 $\sigma_{ii}$ )に対しては 10 fs,長距離力 ( $r_{ii} \ge 1.5\sigma_{ii}$ ) に対しては 100 fs のタイムステップで解析を 行う(雑誌論文(1)). 初期条件として、半径 75 nm, 高さ10 nmの円柱状の中に, 粗視化 されたDNA断片をランダムに配置している. 表面近傍の濃度依存性を調べるため, DNA 断 片の数を N = 100 から 700 の場合について解 析を行う.

### 3.3. 二成分反応拡散モデル

MD 解析は分子スケールの素過程を調べる ためには有効であるが、一方で、粗視化した としても時空間スケールに制限があり、AFM 観察で見られるスケールに対応させるまで には至っていない.そこで、経験的手法では あるが、実測に対応する時空間スケールを扱 える手法として反応拡散モデルを用いた解 析についても試みる.ボトムアップ式の MD

解析とトップダウン式の反応拡散モデルを 両立させることにより実現象を解明するこ とが我々の目標である.先行研究において, 基板表面に対して,分子の吸着と脱離の二状 態を想定し、二次元平面上の反応と拡散によ ってパターンが形成されるメカニズムを議 論してきた(雑誌論文(2)). DNA 分子の拡散 係数から、空間の代表長さに対して代表時間 が見積もられる. それらを基に、シミュレー ションを行った結果,1 um×1 um の表面にお いて、1sの時間スケールでパターン形成が見 られることが示された. さらに、本研究では、 自己集合化パターンと基板表面の対称性を 調べるために, 表面構造を表す関数を与え, 分子と表面の相互作用を加味することを検 討する.たとえば,HOPG 表面は炭素原子の 六員環が敷き詰められた構造であり、6回の 回転対称性と並進対称性を持つ. このような 対称性を示す電子状態については、群の既約 表現を基にその関数を決めることができる. 吸着する分子の濃度を *u*(**r**,*t*), **r** ∈ [0,1] × [0,1],  $t \in [0,\infty)$ とし、溶液中に浮遊する分子の濃度 を $v(\mathbf{r},t)$ とするとき,平衡状態の濃度,拡散係 数、および系の代表長さで無次元化した二成 分反応拡散モデルを以下で表す:

 $\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u - a \sin \alpha u - b \sin \beta v + \phi(\mathbf{r})u + c, \quad (1)$ 

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \gamma \Delta v + a' \sin \alpha u - b' \sin \beta v + c', \qquad (2)$$

ここで、 $\alpha, \beta$ は正定数、a, b, c, a', b', c'は反応 速度定数を意味する正定数、 $\gamma$ は $u \geq v$ の拡 散係数の比 ( $\gamma = D_v / D_u$ )である.  $\phi$ は二次元 表面の対称性に依存する関数であり、群の既 約表現に従うものとする.式(1)右辺の $\phi u$ は、 uの時間発展に対する表面と分子の相互作用 の影響を意味する.たとえば、本研究で扱う 6 回回転対称性を有する周期構造であるよう な場合には、

$$\phi(r) = \zeta \sin^2(k_x x) \sin^2\left(-\frac{1}{2}k_x x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y y\right), \quad (3)$$
$$\times \sin^2\left(-\frac{1}{2}k_x x - \frac{\sqrt{3}}{2}k_y y\right)$$

とすることで、六員環の各頂点で $\phi$ の値が極大となることから、強い相互作用を示す吸着 点を与えることができる.ここで、 $\mathbf{k} = (k_x,k_y)$ は波数ベクトルで $k_x = k_y = 2n\pi$  (nは正整数) とする.境界条件は Neumann 条件とする.反応拡散方程式では、MD 解析のように分子間 相互作用の定量的な寄与を表すことは困難 であるが、物理的な意味を持つ項をモデルに 付加しながらシミュレーションすることが できる.ここでは、単独で現象の本質を解明 するまでには至らないとしても、実験と MD シミュレーションを同時に行うことで、巨視 的スケールの現象を演繹することを可能と するとともに、微視的現象の解明に向けたフ



図 2.100 µmol/L MgCl<sub>2</sub>水溶液で HOPG 表面を処理し, 0.5 µmol/L の 50 bp DNA 水溶液を滴下した後, (a) 10 min, (b) 20 min, および(c) 30 min 暴露したときの自己集合化構造の AFM 像とその断面プロフ アイル (雑誌論文(1): K. Doi et al., J. Chem. Phys. **139** (2013), pp.085102 (9pages).).

ィードバックを与えることが期待される.

### 4. 研究成果

### 4.1. 自己集合化構造の AFM 観察

図2は、100 µmol/L MgCl<sub>2</sub>水溶液を用いて HOPG 基板の表面を処理した後に, 0.5 µmol/L DNA水溶液を10 µL滴下した後の自己集合化 像である. DNA 溶液を滴下した後に液滴を除 去するまでの時間を変えた場合の結果を示 している. この場合は、10,20 および 30 min において明確な自己集合化パターンの違い が見られた.図2(a)に示すように、10 min 放 置した後に液滴を除去した場合は、基板表面 に斑点状の模様が見られるが、その高さは二 重鎖 DNA の直径に相当する 2 nm には至って いないことから、明確な吸着は見られない. 20 min 経過後は、特徴的な模様が現れており、 その高さは、おおよそ2nmと4nmにピーク が現れていることから, DNA 断片が結合しな ら束状に自己集合化していると考えられる (図 2(b)). さらに, 30 min が経過したとこ ろでは、パターンの幅と高さがともに拡大し ているように現れていることから、自己集合 化しながらその構造が成長していることが 推察される (図 2(c)). このような, HOPG 表 面における自己集合化構造の特徴について は,再現性も確認している.ここでは図を省 略するが, 40 μmol/L MgCl<sub>2</sub>水溶液を用いて前 処理した場合にも,50,60 および 70 min の経 過時間で明確な差が現れ,その特徴は 100  $\mu$ mol/L MgCl<sub>2</sub>の場合とおおむね一致している. 以上の実験結果から, HOPG 表面のπ電子は Mg<sup>2+</sup>イオンで遮蔽されているが、陽イオンに 対する濃度依存性があり,高濃度ほど遮蔽の 影響が大きいと考えられる. Mg<sup>2+</sup>の面密度が 高いほど、それに引かれる DNA 断片の数も 増えるため、高濃度の MgCl, 溶液で処理した HOPG 表面ほど短時間で DNA の自己集合化 像が得られると考えられる.また,時間が経 過するにつれてその構造は成長していると

言える.

# 4.2. 粗視化 MD シミュレーション

前節の実験結果を微視的スケールから解 析するために MD シミュレーションを行った. 図3は、N = 500 とした場合の時間発展の様 子である. t=0sでランダムに配置されてい る DNA 断片が時間の経過につれて末端間の 結合と Mg<sup>2+</sup>イオンを介した束状構造の形成 により自己集合化する様子がわかる.t=100 ns では、DNA 断片の一部が基板表面に吸着 し、浮遊している分子は安定な吸着サイトに 引かれて移動している. t=500 ns では、おお よそすべての分子が吸着しているが熱揺動 の影響を受けて、構造を緩和している. t = 2000 ns では、大きな動きは見られないが束状 構造が徐々に拡大していることがわかる. 、 のとき, DNA 分子の HOPG 表面に対する吸 着過程の時間スケールは~1 µs と考えられ, 引き続き時間スケールの長い拡散過程によ る構造変化が続くと考えられる.本 MD 解析 では、初期の吸着過程について解析すること に成功したが,一方で,実測に見られるよう



図 3. 粗視化 MD シミュレーション(N=500 の場合) の結果(雑誌論文(1): K. Doi et al., J. Chem. Phys. **139** (2013), pp.085102 (9pages)).

なさらに時空間スケールの大きい現象を説 明するまでには至っていない.一方で、実験 における DNA の自己集合化像と本 MD 解析 の結果をフラクタル次元  $D_f$ で評価したとこ ろ、粗視化 MD で N = 500 とした場合と実験 結果で明確なパターンが見られた場合は、 $D_f$ = 1.9 となることが確かめられた.これより、 両者の時空間スケールは異なるが、自己相似 的な関係にあると言える.本シミュレーショ ンのように、基板表面の対称性が考慮されて いない場合、時間発展に対する自己相似性は 見出されたが、自己集合化構造の空間的な対 称性は見られていない.

# <u>4.3. 二成分反応拡散モデル</u>

式(1)-(3)を用いて、対称性のある基板表面 における吸着分子の自己集合化について調 べる. 初期配置として, u を各点でゼロ, v を[0,1]の一様乱数で与える.ここでは、例と して n=4 および 11 とした場合について述べ る.図4に示すように、パラメータを*a=a*'= 0.250, b = b' = 0.330, c = c' = 0.330,  $a = \beta = 5$ ,  $\gamma$ = 50, ζ = 1×10<sup>-8</sup>とした場合, 無次元時間 t = 60,000 において、 Øの影響を受けてパターン に対称的な構造が浮かび上がっている.一方, 図5に示すように, a=a'=0.250, b=b'=0.320,  $c = c' = 0.320, \alpha = \beta = 5, \gamma = 50, \zeta = 1 \times 10^{-7} \ge \Box$ た場合は、周期定常な振動が見られるが、パ ターンに*o*の影響は現れていない.図6は, *n* = 4 の場合における対角線上の u の時間発展 である.これより,図 6(a)では、ある点で成 長が始まるとその後も引き続き値が大きく なることが分かる. つまり, 発散する解とな る. また, モデルの特徴から, 段階的に積層 していく様子が見て取れる.一方,図 6(b)で は各点で周期的な振動が生じており、限られ た領域で濃度分布が伝播している様子が見 られる. ここでは, 発散する不安定解と周期 定常の安定解について見出すことができた. 現実の系では, DNA が基板表面に吸着した後 に構造が拡大していく様子が見られたこと から、本解析の不安定解が自己集合化構造の 成長に対応していると見ることができる. 一 方,周期的な振動解は,吸着<br />
・脱離が繰り返 される中で見られるパターンであり、 そのよ うな結果は実験では見られていない.現実に 見られる複雑なパターン形成は、安定・不安 定の狭間で起こると考えられるため、さらに パラメータを変化させることにより、特徴的 なパターンを見出すことが期待される. それ については今後の課題である.

### <u>4.3.まとめ</u>

本研究では、DNA の自己集合化パターン形 成のメカニズムに着目し、AFM 観察を行うと ともに、その過程における対称的な原子配列 を持つ基板表面の影響について議論した.粗 視化モデルによる MD 解析では、分子スケー ルの吸着過程は、~1 µs 程度で起こりその後 に分子が束状構造を形成しながら自己集合



図 4. 二成分反応拡モデルによるシミュレーション結果(学会発表(12)). (a), (b)はそれぞれ n = 4および n = 11の場合であり, いずれも無次元時間 t = 60,000の時点における u(x,y)である. パラメータは, a = a' = 0.250, b = b' = 0.330, c = c' = 0.330,  $a = \beta = 5$ ,  $\gamma = 50$ ,  $\zeta = 1 \times 10^{-8}$ .



図 6. y = x に沿った u(x,y)の時間発展(学会発表 (12)). (a), (b)はそれぞれ図 4(a)および図 5(a)の条 件に対応している. (a)は時間とともに発散する 解であり, (b)は周期定常の安定解である.

化することが示された.現実の系ではさらに 長い時間をかけて拡散により構造が緩和さ れていることが実験的に確かめられた. そこ で、二成分反応拡散モデルを用いて長時間の パターン形成について調べ、そこでは基板表 面の持つ対称性を表す関数を用いて表面と 吸着分子の相互作用を考慮することを提案 した.その結果,基板表面にある吸着点の影 響を強く受けた自己集合化構造を示しなが ら発散に向かう解と周期的に振動する安定 解が見出された.実際の自己集合化現象にお いては、分子が供給される限り構造が拡大す ることから、発散する解が現実に対応するも のと考えられるが、さらにパラメータ依存性 について調べることは今後の課題として残 されている.

#### 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2件)

 <u>Kentaro Doi</u>, Hiroshi Takeuchi, Ryosuke Nii, Shingo Akamatsu, Toshiya Kakizaki, and <u>Satoyuki Kawano</u>, Self-Assembly of 50 bp Poly(dA)·Poly(dT) DNA on Highly Oriented Pyrolytic Graphite via Atomic Force Microscopy Observation and Molecular Dynamics Simulation, The Journal of Chemical Physics **139** (2013), pp.085102 (9 pages).

(2) <u>Kentaro Doi</u>, Yukihiro Toyokita, Shingo Akamatsu, and <u>Satoyuki Kawano</u>, Reaction-Diffusion Wave Model for Self-Assembled Network Formation of Poly(dA)·Poly(dT) DNA on Mica and HOPG Surfaces, Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, **17** (2014), pp. 661–677.

〔学会発表〕(計12件)

- (1) Kentaro Doi, Yukihiro Toyokita, and Satoyuki Kawano, Application of Reaction-Diffusion Wave to Self-Assembled of Network Structures DNA. The  $10^{\text{th}}$ Proceedings of the International Symposium on Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, 2012.4.11-14, Berlin, Germany.
- (2) Kaito Morita, <u>Kentaro Doi</u>, Sakon Rahong, Takeshi Yanagida, Tomoji Kawai, and <u>Satoyuki Kawano</u>, Molecular Dynamics Simulations for DNA Deformations Affected by Nanopillars with Applied Electric Voltages, The Proceedings of the 10<sup>th</sup> International Symposium on Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, 2012.4.11–14, Berlin, Germany.
- (3) Hiroshi Takeuchi, Ryosuke Nii, <u>Kentaro Doi</u>, and <u>Satoyuki Kawano</u>, Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations of Self-Assembled DNA on HOPG surfaces, The Proceedings of the 10<sup>th</sup> International Symposium on Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, 2012.4.11–14, Berlin, Germany.
- (4) 上原聡司, 土井謙太郎, 川野聡恭, せん 断力を受ける鎖状生体高分子の流動モデ ル, 日本機械学会 2012 年度年次大会, 2012.9.9–12, 金沢大学角間キャンパス.
- (5) 新居良介,竹内博,<u>土井謙太郎</u>,<u>川野聡</u> <u>赤</u>,陽イオンに覆われた HOPG 基板上で の DNA 自己集合化に関する分子動力学 解析,日本機械学会 2012 年度年次大会, 2012.9.9–12,金沢大学角間キャンパス.
- (6) 上原聡司,<u>川野聡恭</u>,壁面近傍における 単鎖 DNA 拡散現象の一分子イメージン グ,日本機械学会第4回マイクロ・ナノ 工学シンポジウム,2012.10.22-24,北九 州国際会議場.
- (7) <u>Kentaro Doi</u>, Ryosuke Nii, Hiroshi Takeuchi, and <u>Satoyuki Kawano</u>, Dynamics and Self-Assembled Pattern Formation of Short DNA Fragments, Tenth International

Conference on Flow Dynamics, 2013.11.25–27, Sendai, Japan.

- (8) Ryosuke Nii, Hiroshi Takeuchi, <u>Kentaro Doi</u>, and <u>Satoyuki Kawano</u>, Fractal Dimension of Self-Assembled 50 bp Poly(dA)·Poly(dT) DNA on HOPG Surface, The 15<sup>th</sup> International Conference on Biomedical Engineering, 2013.12.4–7, National University Singapore, Singapore.
- (9) Weixin Qian, <u>Kentaro Doi</u>, and <u>Satoyuki</u> <u>Kawano</u>, Langevin Dynamics Simulation of Single-Stranded DNA Translocation through Nanopore in External Non-Uniform Electric Field, The 15<sup>th</sup> International Conference on Biomedical Engineering, 2013.12.4–7, National University Singapore, Singapore.
- (10)銭偉欣,森田介斗,<u>土井謙太郎</u>,<u>川野聡</u> <u>赤</u>,ナノ流路における DNA の電気泳動 に関する粗視化分子動力学解析,日本機 械学会 2013 年度年次大会,2013.9.8-11, 岡山大学津島キャンパス.
- (11)<u>土井謙太郎</u>,新居良介,竹内博,松岡理 人,<u>川野聡恭</u>,Poly(dA)·Poly(dT)DNA 断 片による自己集合化ネットワーク形成の ダイナミクス,日本機械学会第 91 期流体 工学部門講演会,2013.11.9–10,九州大学 伊都キャンパス.
- (12)<u>土井謙太郎</u>,新居良介,<u>川野聡恭</u>,対称 性を有する表面におけるパターン形成の 反応拡散モデル,日本機械学会関西支部 第89期定時総会講演会,2014.3.18–19,大 阪府立大学中百舌鳥キャンパス.

〔その他〕 ホームページ等 http://bnf.me.es.osaka-u.ac.jp

6.研究組織
 (1)研究代表者
 川野 聡恭(KAWANO SATOYUKI)
 大阪大学・基礎工学研究科・教授
 研究者番号:00250837

(2)研究分担者

土井 謙太郎(DOI KENTARO)大阪大学・基礎工学研究科・准教授研究者番号: 20378798