

学位論文 博士（工学）

分子シミュレーションを用いた
グラフトナノ粒子の自己集合挙動の解明
およびその応用に関する研究

2024 (令和 6) 年度

佐藤 碧海

主 論 文 要 旨

No.1

報告番号	㊦ 乙 第	号	氏 名	佐藤 碧海
主 論 文 題 名： 分子シミュレーションを用いたグラフトナノ粒子の自己集合挙動の解明 およびその応用に関する研究				
(内容の要旨) 本研究は散逸粒子動力学法(DPD)と粗視化分子動力学(MD)法を用いてグラフトナノ粒子(GNP)の自己集合構造とその物性についてまとめたものである。 第1章では、グラフトナノ粒子の有用性と現在の応用先について説明した。その後、自己集合構造が未だ解明されていない閉じ込め系について着目し、新たな応用先としてナノセンサと誘電材料について研究を行うことを示した。 第2章では DPD 法と粗視化 MD 法についてその歴史と各手法のアルゴリズムについて説明した。 第3章では閉じ込め系における GNP の自己集合構造を調査した。はじめに、ナノ粒子表面にグラフトするポリマーの性質を変更し、閉じ込め径毎に構造を分類した。また、閉じ込め壁面の性質を変更し、その影響についても明らかにした。 軸方向の圧力と、ナノチューブの半径とナノ粒子半径の比である L の定性的な状態図を作成し、通常の NP の自己集合構造との比較を行った。強い閉じ込め下($L \leq 1.5$)においてはポリマーや壁面の性質に関係なく一定の構造が形成された。一方でナノチューブ径が大きく、粒子配置の自由度が高い場合においては、僅かな圧力範囲において2つの特徴距離を有する構造が形成された。 第4章では GNP 二量体の粒子間距離とセンシングの標的分子の捕捉精度について調査を行った。GNP のポリマー長さ、グラフト密度に比例して粒子間距離が増加することを明らかにした。また、センサに最適な 1 nm 以内の粒子間距離に GNP を維持する条件についても明らかにした。センシングの標的分子を加えた際の捕捉率と複数の GNP が存在する系における二量体形成について検討を行い、実験における最適な GNP 構造を提案した。 第5章では GNP を添加したポリマーナノコンポジット材料における周波数毎の誘電特性について調査した。GNP の添加による誘電正接の低下を確認した。また、誘電正接の低減に影響のあるパラメータを明らかにした。 第6章では本研究の結言として、研究全体の総括を行った。				

Thesis Abstract

No. _____

Registration Number	☒ "KOU" ☐ "OTSU" No. _____ *Office use only	Name	Takumi Sato
Thesis Title Study on the self-assembly behaviors of grafted nanoparticles and its application using molecular simulation			
Thesis Summary This dissertation discusses the self-assembly structure and properties of grafted nanoparticles (GNPs) using dissipative particle dynamics (DPD) and coarse-grained molecular dynamics (MD) simulations. In Chapter 1, the potential applications and advantages of grafted nanoparticles are introduced. A particular focus is placed on confined systems, where the self-assembly behavior has yet to be fully explored. New applications, including nanosensors and dielectric materials, are highlighted. In Chapter 2, the development of DPD and coarse-grained MD methods is outlined, providing a detailed description of the algorithms employed in each approach. In Chapter 3, the self-assembly behavior of GNPs in confined environments is examined. The properties of the polymers grafted onto the nanoparticle surfaces were varied, and the resulting structures were categorized based on the confinement diameter. Additionally, the effects of modifying the properties of the confinement walls were studied. A qualitative phase diagram of axial pressure and L, the ratio of nanotube radius to nanoparticle radius, was created and compared with the self-assembly behavior of conventional nanoparticles (NPs). Under strong confinement ($L \leq 1.5$), a stable structure formed regardless of the polymer or wall properties. Conversely, in larger nanotube diameters where particles had more freedom to move, a structure with two characteristic distances emerged over a narrow pressure range. In Chapter 4, the interparticle distance of GNP dimers and their effectiveness in sensing target molecules is examined. It was found that the interparticle distance increases with polymer length and grafting density. Conditions required to maintain an optimal 1 nm interparticle distance for sensor performance were identified. Additionally, the capture rate of target molecules and dimer formation in the presence of multiple GNPs were studied, leading to the proposal of an optimal GNP structure for experimental settings. In Chapter 5, the dielectric properties of polymer nanocomposite materials doped with GNPs are examined at various frequencies. The addition of GNPs was confirmed to reduce the dielectric loss tangent. The parameters affecting the reduction in dielectric loss were identified. In Chapter 6, a summary of the study is presented as a conclusion of this research.			