



研究課題名 機械学習によるナノ粒子流の制御と一分子識別技術への応用

大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授 かわの さとゆき
川野 聡恭

研究課題番号：18H05242 研究者番号：00250837

キーワード：分子流体力学、ナノ粒子、一分子計測、機械学習、MEMS/NEMS

【研究の背景・目的】

超微細加工技術の進展に伴い、電極付きマイクロ・ナノ流路内の分子運動をイオン電流等として捉え、時空間ビッグデータのAI解析をも見据えた新しい高速一分子識別の試みが活発化している。しかし、実用化は道半ばで、ブラウン運動、電流計測速度および収率に関連する対象分子の局所/大域的流動制御が本質的な技術障壁とされる。本研究は、イオン、原子、分子および荷電微粒子の電磁場下における特殊流動を統合的に究明し、分子流動科学の利導と機能発現に繋げる新学術構築を目指す。すなわち、従来の流体力学体系に「熱揺動と大偏差原理」「電気泳動、熱泳動および光圧」「機械学習による最適設計と制御」に関する知識と技術を融合する。具体的には、図1に示すように、対電極群が付加された流体デバイスによる一分子識別に関し、in situ 電流計測、シミュレーションおよびベイズ推定を高速・高精度化し、分子流体力学、ナノテクノロジーおよびAIの援用によるゲノム医療の基盤技術創成に資する。

【研究の方法】

未知未踏の分子流動現象を「知る」「創る」「測る」「操る」「惟る(推定する)」ことを戦略カテゴリーとし、それぞれの予測・制御技術および可視化計測技法を系統的かつ統合的に深化させる。これらと縦横する3課題：揺らぎの個性に基づく分子識別(Theme 1)、液相における極性粒子流のトンネル電流計測とEHD(Electrohydrodynamics)制御(Theme 2)、局所レーザー照射による分子マニピュレーション(Theme 3)を重点サブテーマとして研究を進める。Theme 1では、揺動散逸定理の前提を超える拡張型

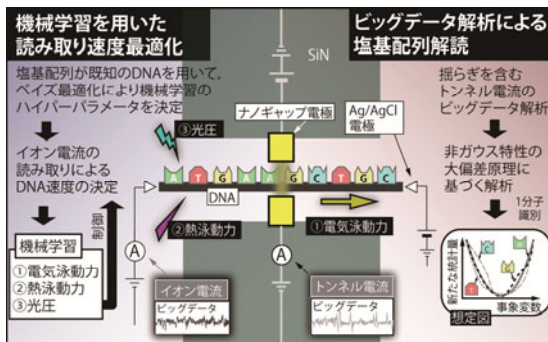


図1 機械学習により最適化されるナノ粒子(花粉アレルゲン、ウイルスおよびDNA)を想定識別用流体デバイスと研究構想の概略図

力学量を定義し、再現性のあるレア・確率事象の評価と制御法を大偏差原理に基づき構築する。Theme 2では、ベイズ最適化の導入により、EHD流れのin situ フィードバック制御や流路設計法を確立する。また、分子流を起源とするイオン電流とナノギャップ電極間の量子力学的効果であるトンネル電流計測を高速化し、広域流動場と局所イオン濃度場の同時流動計測技術に挑戦する。Theme 3では、局所レーザー照射による光圧(Gaussian Beam理論等に基づく高周波電場)とそれに伴う熱泳動力(温度勾配に沿う力：微粒子や溶媒性状により正あるいは負の力が観測され、理論的には未解決課題)を駆動源とした分子操作技術を、機械学習スキームとともに確立する。研究期間後半から3課題の融合を加速し、最終的に一分子識別デバイスとナノポアDNAシークエンサーの創製・実証試験を目指す。

【期待される成果と意義】

本研究で拓くMolero-Fluid Science and Informaticsは、電子、イオン、原子、分子、微粒子の流動と物性を統合的に究明し、創発性の利導や新機能発現に繋げる未踏学術分野である。マイクロ・ナノ流体工学を基軸とした量子エレクトロニクス、生命科学、非平衡統計力学および情報科学との融合学術創成とともに、先導的な挑戦課題として、ナノ電極群を実装したMEMS流体デバイスによる一分子識別技術の確立が期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- C. Kawaguchi, T. Noda, M. Tsutsui, M. Taniguchi, S. Kawano, T. Kawai, Electrical Detection of Single Pollen Allergen Particles Using Electrode-Embedded Microchannels, *J. Phys.: Condens. Matter*, 24, 164202, 2012.
- I. Hanasaki, N. Yukimoto, S. Uehara, H. Shintaku, S. Kawano, Linearisation of λ DNA Molecules by Instantaneous Variation of the Trapping Electrode Voltage Inside a Micro-Channel, *J. Phys. D*, 48, 135402, 2015.

【研究期間と研究経費】

平成30年度-34年度
119,000千円

【ホームページ等】

<http://bnf.me.es.osaka-u.ac.jp/>