シランプラズマの化学反応系における ネットワーク構造分析

Analysis of Network Structures for Chemical Reactions in Silane Plasmas

○水井 康公[1]，信藤 恭佑[1]，宮城 茂幸[1]，酒井 道[1] (1.滋賀県立大)

○Yasutaka Mizui[1], Kyosuke Nobuto[1], Shigeyuki Miyagi[1] and Osamu Sakai[1] (1.Univ of Shiga Pref)

E-mail:oh23ymizui@ec.usp.ac.jp

1. はじめに

ネットワーク分析とは，分析対象を点と線からなるネットワークとして表現し，その構造的な特徴を探る研究方法である．解析対象を問わないものの，利用される分野はいまだ限定的である [1,2]. 本研究では，化学反応系をネットワーク構造分析の対象とすることを提案し，シランプラズマ [3] の反応を有向グラフで表現することで可視化を行い，指標計算により反応ネットワークから粒子の特性を推定することを目的とする．

2. 解析手法

シランプラズマの化学反応を考慮した反応式に対して Table 1 に示す手順を適用し，各辺が方向をもつ有向グラフとして表現した．また 1 つの辺の重みを 1 として隣接行列を作成し，中心性指標の簡易 PageRank[4] を用いて評価を行った．

Table 1 One example of reaction step

reaction	$SiH_4 + H \rightarrow SiH_3 + H_2$
nodes	a:SiH_4, b:H, c:H_2, d:H_2
edges	EdgeA : From SiH_4 to SiH_3
	EdgeB : From SiH_4 to H_2
	EdgeC : From H to SiH_3
	EdgeD : From H to H_2

3. 解析結果

Figure1 に作成したネットワーク図を示し，粒子毎の簡易 PageRank を Figure2 に示す．青色のグラフが順方向の簡易 PageRank の値で他の粒子から受ける影響力の高さを示す．赤色のグラフがエッジの向きを逆転させた逆方向の簡易 PageRank の値で他の粒子へ与える影響力の高さを示す．

簡易 PageRank の値から，SiH_4，Si_2H_6 は他の粒子へ与える影響力が高い粒子であり，H，H_2 は他の粒子から受ける影響力が高い粒子であることが示された．講演では他の指標によるネットワーク構造特性についても報告する．

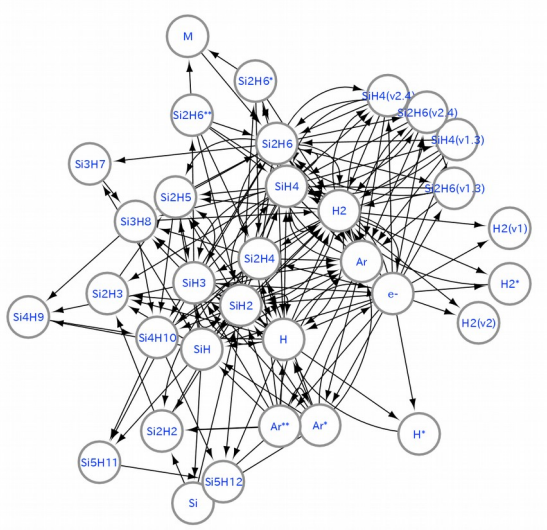

Figure 1 Network structure of silane chemical reactions. Names of species are shown at nodes and chemical reactions are shown at directed edges.

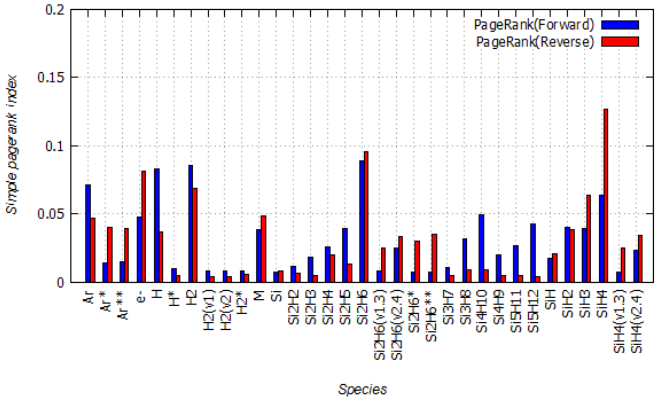

Figure 2 Result of centrality index for each species. Blue: simple PageRank (Forward) and red: simple PageRank (Reverse) centrality.

参考文献

[1] 金明哲 ,“R で学ぶデータサイエンスネットワーク分析”，共立出版 , 2009 年 .

[2] O. Sakai, K. Nobuto, S. Miyagi, and K. Tachibana, AIP Advances **5**, (2015) 107140-1-6

[3] M. J. Kushner, J. Appl. Phys **63**, (1988) 2532-2551

[4] A. N. Langville, C. D. Meyer, *Google's PageRank and Beyond* : *The Science of Search Engine Rankings* , (Princeton Univ. Pr, Oxford, 2006)

© 2017年 応用物理学会