

メタンプラズマにおける化学反応解析のための有向グラフを用いたネットワーク構造解析 (Ⅲ)

Analysis of Network Structures of Directed Graphs for Chemical Reactions in Methane Plasma (III)

信藤 恭祐¹、水井 康公¹、宮城茂幸¹、[○]酒井 道¹ (1. 滋賀県立大工)

Kyosuke Nobuto¹, Yasutaka Mizui¹, Shigeyuki Miyagi, [○]Osamu Sakai¹ (1. Univ. Shiga Pref.)

E-mail: sakai.o@usp.ac.jp

1. はじめに

プラズマ中の化学反応は、低温・高速プロセスの実現等、他の化学反応系よりも優れた特徴により工業的に幅広く応用されている。ナノ粒子・ナノ構造形成においても、カーボン (C) 系 (カーボンナノチューブ、ダイヤモンド薄膜等) の合成過程等に重要であるが、その反応系が複雑であるため、反応系解析には数 10~数 100 にもおよぶ反応速度式の連立微分方程式を解くことが求められている[1, 2]。そこで、我々は、より簡易に反応系全体を見通す目的で、粒子を頂点・化学反応を枝で表現した有向グラフによるネットワーク解析を提案した[3]。今回、我々は理論検討と数値計算を進め、ネットワーク解析で導出される中心性指標と速度反応論の関係、ならびに得られる数値計算結果とグラフ構造の比較を行ったので報告する。

2. 理論検討および数値計算手法の概要

理論検討として、粒子種密度の生成・消滅を表す反応速度論の連立式と、反応による粒子種間の推移を示す隣接行列による表現[3]の比較を行った。また、数値計算として、参考文献[1]に示された反応に加え、参考文献[2]に示された電子衝突解離に関する反応を加えて有向グラフを描いて (図 1 に 1 例)、中心性指標 (簡易 pagerank 値等[4]) の導出等を行った。

3. 理論検討および数値計算結果

反応速度論の連立式と隣接行列表現の比較により、本ネットワーク解析による簡易 pagerank 値は、粒子密度が均一な場合の粒子種増減量を表現していることがわかった。また、図 1 に示すラジカル粒子系 (荷電粒子種を除く) の数値計算より、C 原子は、 $\text{CH}_4 \cdot \text{CH}_3$ 粒子を含む反応循環系を経て、 $\text{C}_2\text{H}_4 \cdot \text{C}_2\text{H}_2$ となった後は重合反応段階に移り、カーボン系ナノ粒子形成に結びつくことが示唆された。

参考文献 [1] K. Tachibana *et al.*, J. Phys. D **17**, 1727 (1984). [2] E. Gogolides *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **34**, 261 (1995). [3] O. Sakai *et al.*, AIP Advances **5**, 107140 (2015). [4] K. Nobuto *et al.* (in preparation).

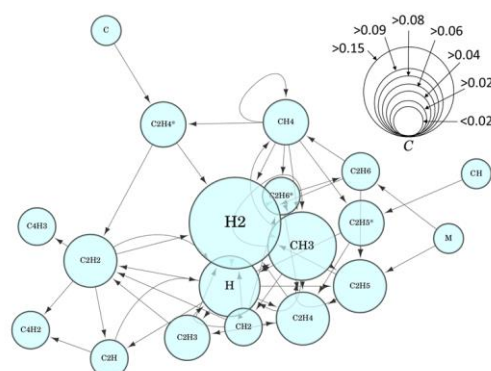


Fig. 1. Chemical network of radical species in CH_4 plasma with simplified pagerank index (C).

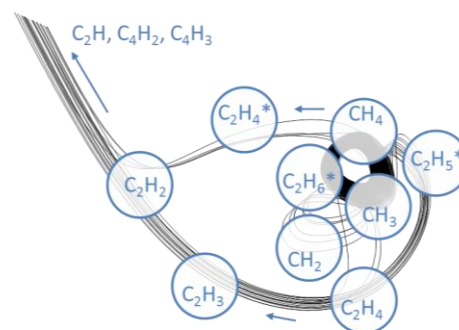


Fig. 2. Numerical results on motions of 20 C atoms starting from CH_4 .