

反応速度を考慮した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 by Consideration of Reaction Rate

°水井 康公¹, 塚本 隆太¹, 宮城 茂幸¹, 酒井 道¹ (1. 滋賀県立大工)

°Yasutaka Mizui¹, Ryuta Tsukamoto¹, Shigeyuki Miyagi¹ and Osamu Sakai¹ (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[1]。その分析手法により、シランプラズマの化学反応系[2]を対象とし、定常状態における全ての反応に対して可視化を行った。しかし、実際は、定常状態になる時間は反応によって異なるため、このグラフ化手法では説明できない可能性がある。そこで、本研究では、反応速度を考慮することで、定常状態のグラフに近づく前の過渡のグラフに対しても解析可能にすることを目的とする。

2. 分析手法

シランプラズマの化学反応を示した有向グラフ[3]を Figure 1 に示す。Figure 1 は、定常状態化における全ての反応に対しての有向グラフである。反応速度を考慮するにあたって以下のパラメータを定義する。

- ・滞在時間 t_r : 粒子が反応容器内にとどまっている時間
- ・時定数 τ : 速度反応係数 k と粒子の密度の逆数

(例) $A + B \rightarrow C + D$ の速度反応係数 k とした場合、粒子 A の速度反応方程式は、

$$[A] = [A]_0 e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (1)$$

となる。

ここで、時定数 $\tau = \frac{1}{k[B]}$ [s] となる。

以上のパラメータを比較して、

$t_r \geq \tau$ の場合: 反応が起こる

$t_r < \tau$ の場合: 反応が起らない

としてネットワークに適用する。

3. 研究結果

Figure 2 に圧力 $p = 1$ [torr]、温度 $T = 458$ [K] のとき、二次反応までについて、それぞれ体積ごとの有向グラフを示す。密度は[2]より引用した。

体積が増えるごとに滞在時間が増加し、多くの反応まで広がることを示した。しかし、Figure 1 と比較すると、Figure 2 のグラフは、定常状態のグラフまでは反応が進まないことがわかる。

講演では、三次反応以降の反応の結果も含めた解析結果について説明する。

