

低温プラズマ中で成長する化学反応ネットワーク

Growing chemical reaction networks in low-temperature plasmas

成蹊大学¹ ○南 智貴¹、村上 朝之¹

Seikei University,¹ ○Tomoki Minami¹, Tomoyuki Murakami²

E-mail: tomo-murakami@st.seikei.ac.jp

1. 序論

大気圧下でのプラズマは、反応が複雑に絡み合い、活性種が次々と生成される。ここでの反応制御には系の理解が重要となる。グラフ理論に基づく解析は、プラズマ化学の複雑さを可視化する手段として非常に有用である [1, 2, 3]。また、ネットワークの成長には、システムを安定化させる機構が内在する。バラバシ・アルバートモデル [4] では、リンク数の多いノードへの優先接続が安定化の要因となると示唆している。本研究では、 $\text{He}+\text{O}_2+\text{N}_2$ プラズマにおける学術的解釈の手段として、成長するネットワークを記述する統計的解析を活用する手法を提案する。

2. 解析手法

$\text{He}+\text{O}_2+\text{N}_2$ プラズマを対象とした反応系 (41 化学種, 351 反応過程) を解析対象とする。化学反応式-グラフ変換の手法は文献 [1, 2, 3] に詳しい。本研究で提案する反応ネットワークの成長は、 $\text{He}+\text{O}_2+\text{N}_2$ プラズマの発生起源となる化学種 ($\text{He}, \text{O}_2, \text{N}_2, \text{e}$) を起点として始まる。既存ノード (反応物) から探索された生成物候補に、より多くの反応に寄与し、より頻繁に起こる可能性が高い化学種を既存のネットワークと接続する。この成長過程を可視化することで、新たな反応を引き起こす優先的な結合を紐解く。

3. 結果

図1はプラズマ中の化学反応ネットワークを可視化したもので、成長の試行回数を示す Step 数と対応づけている。ノードの大きさ・色はノードの持つリンク数 (次数) を、エッジの太さ・色は正規化した反応速度定数を表す。また、成長ステップごとにおける各化学種の次数の変動を図2に示す。250 ステップまでは電子の反応エッジが集中し、時間とともに酸素や酸素原子がネットワーク中心へと移り変わる。プラズマの発生初期は、電子が主役となり電子衝突を通じて電離や励起を起こし、活性種を生成する。プラズマ中の反応ネットワークを成長させることで、系を支配する種の変動が明らかになる。

4. 結論

本研究で提案する反応ネットワークを成長させる手法により、低温プラズマ中の反応ネットワークが、どのような反応を優先して成長していくのか、どのような構造を形成のかについて理解できる。

本研究は一部科研費 Grant No. JP19K03813, JP20KK0089, JP23H01404 の助成を受けた

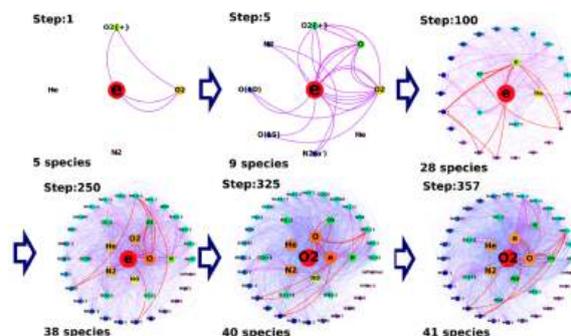


図1: 化学反応ネットワークの成長プロセスの可視化

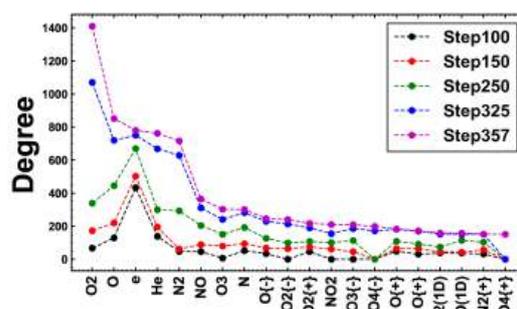


図2: 各ステップ数における化学種と次数の関係性

参考文献

- [1] O. Sakai, et al. AIP Adv. 5, 107140 (2015)
- [2] T. Murakami, et al. Plasma Sources Sci. Technol. 29, 115018 (2020)
- [3] O. Sakai, et al. Jpn J Appl Phys 61,070101 (2022)
- [4] Albert, R. Emergence of Scaling in Random Networks. Science 286, 509-512 (1999)