23P-2F-05

# プラズマ活性水溶液の化学反応ネットワーク解析
# Chemical reaction network analysis of plasma-activated solution

新家有紗、川口悟、村上朝之
Arisa SHINKE, Satoru KAWAGUCHI and Tomoyuki MURAKAMI

成蹊大学
Seikei University

## 1. 背景

プラズマ化学モデリング研究においては、考慮する化学種や反応式の増加にともない、化学種間関係・反応ネットワークの構造が複雑化することから、その反応系の理解が困難になる傾向がある。そこで、化学種をノード(点)、反応過程をエッジ(枝)と捉えることによって、化学反応式をグラフ化し、数学的に化学種間の関係構造を解析する（グラフ理論）試みが行われている[1]。

## 2. 目的

低温大気圧プラズマを照射することで活性化される液体（プラズマ活性水溶液）を念頭に置き、液相化学反応ネットワークの解析を行う。ここでは、グラフ理論を用いて反応ネットワークの特徴を可視化および解析する。

## 3. 解析方法

大気成分（窒素・酸素・炭素）が飽和した液体（大気飽和水）に対してNaClを添加した水溶液を対象として、98化学種と526反応を考慮した。図 1に反応式 $O + O_2 \rightarrow O_3$ を例としたグラフ化の概念図を示す。ここで $O, O_2, O_3$ はノードと呼ばれ、O と $O_2$ から $O_3$（反応式の左辺から右辺）に向けてエッジを描くことができる（有向グラフ）。また、各ノードが持つエッジ数を次数と呼び、有向グラフにおいては出次数（化学式の左辺・エッジが出ていく側・反応物側）と入次数（化学式右辺・エッジが入る側・生成物側）を区別することができる。これより、O と $O_2$ の出次数はそれぞれ 1、$O_3$ の入次数は 2 となる。また、エッジに対しては、各化学反応式の反応速度定数が大きいほど大きな重みを課すことができる。

## 4. 結果と考察

図 2 に次数中心性[1,2]を考慮した液相化学反応ネットワークダイヤグラム（同心円形状）を示す。次数が大きい化学種ほどそのノードサイズは大きく、ダイヤグラムのより中心に位置する。また、より太く描かれたエッジは、その反応頻度がより高いことを示す。同図より、ネットワークの中心付近位置を占める化学種 OH, $H^+$, $OH^-$, $O_2^-$, $Cl^-$ 等は多くの反応過程に寄与し、その反応頻度が大きい（反応性が高い）傾向が示唆される。一方、ネットワークの外縁部に位置する化学種は次数が低く、その反応頻度も小さいことが示され、これらがネットワーク全体に与える影響は小さいことが示唆される。

## 5. 結論

大気飽和水に対して NaCl を添加した水溶液における液相化学反応ネットワークの可視化と解析を行った。ここでは次数中心性に注目し、化学種の反応系における役割に関する知見を得た。

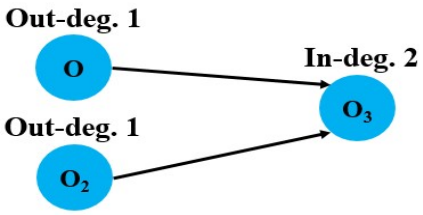


図 1　化学反応式グラフ化の概念図

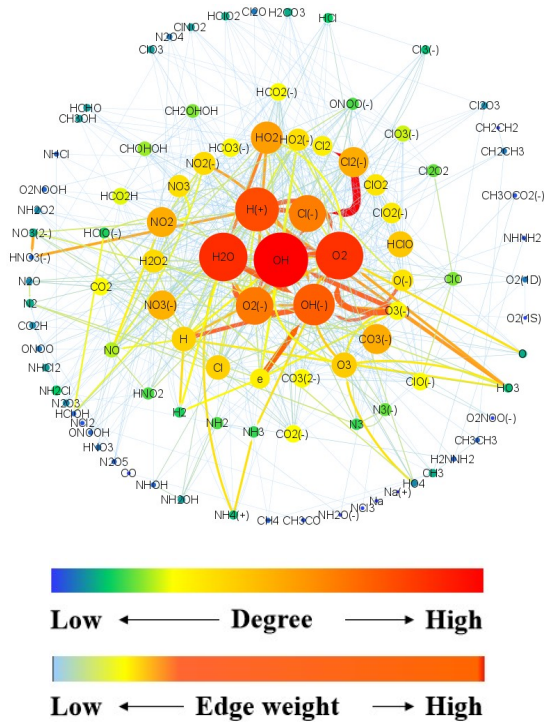


図 2　次数中心性を考慮した
液相化学反応ネットワークダイヤグラム

参考文献

[1] O. Sakai et al., AIP Advances 5, 107140 (2015)
[2] T. Murakami and O. Sakai, Plasma Sources Science and Technology 29, 115018 (2020)