19p-S8-4

プラズマからのイオン照射による液体へのエネルギー伝搬

Energy Propagation in Liquid Water by Ion Irradiation from Plasma

首都大院理工, ○皆川 優大, 白井 直機, 内田 諭, 朽久保 文嘉

Tokyo Metro. Univ., ○Yudai Minagawa, Naoki Shirai, Satoshi Uchida, Fmiyoshi Tochikubo

E-mail: minagawa-yudai@ed.tmu.ac.jp

［概要］

医療・環境・材料などのあらゆる分野で、液体を対象としたプラズマ応用研究が先行する中、プラズマで生成した粒子（ラジカルやイオンなど）が液体に衝突した際の影響については未だに不明な点が多い。本研究の目的は、プラズマからの照射イオンが液体水分子に衝突したときの物理的影響を分子シミュレーションにより解析することである。プラズマから照射される粒子として 10 eV、100 eV のエネルギーを持った酸素イオン O^+ が液体に衝突したときの液体の挙動及びイオンの侵入深さ等について報告した[1]。今回は液体中の水分子の運動エネルギーを大きさごとに色分けし、イオン衝突後のエネルギー伝搬の様相を可視化した結果について報告する。

［解析方法］

ピコ秒オーダーでの個々の分子の挙動を追跡するために古典分子動力学法を用いてシミュレーションを行った。液体温度を 300K にして、液体表面から 30 Å 上方にある酸素イオン O^+ を液体に照射した。液体水分子 2000 個すべてに対して個々の並進エネルギー及び回転エネルギーを計算し、双方の平均をとった値が 0.1 eV 未満の場合は青、0.1 − 0.2 eV は緑、0.2 − 0.3 eV は黄、0.3 − 0.4 eV は赤、0.4 eV 以上はマゼンダに色分けを行った。

［計算結果］

100eV のイオンを照射後の液体水分子のエネルギーの状態を図 1 に示す。イオン照射前では、液体中の 9 割以上の水分子は 0.1 eV 未満で、残りの数十個程度は 0.1 − 0.2 eV のエネルギーを持つ。300K に保たれた液体中では周囲の分子と互いにエネルギーのやり取りを繰り返して、0.01 ps オーダーで 0.2 eV の閾値を上下した（青と緑色の粒子が頻繁に入れ替わった）。イオン照射から 0.3 ps 後には、半径 10 Å 程度の範囲に 0.4 eV 以上のエネルギーを保有した水分子が存在した。徐々に一つ当たりに保有するエネルギーが減少し、照射から 0.8 ps 後では 0.3 eV 以上のエネルギーを持った水分子は液体中には見られなかった。液体表面付近では、0.1 − 0.2 eV のエネルギーを持つ粒子が増大した。0.4 eV の比較的高いエネルギーの水分子から気相中に放出され、低いエネルギーの粒子は遅れて放出される様子が観測された。イオン照射から 1 ps 後には液体の温度が 407 K に上昇した。並進エネルギーの最大値は 2.35 eV、回転エネルギーの最大値は 3.84 eV となっており、水分子の水素原子の質量が軽いため、イオン衝突後には液体中のポテンシャルが乱れ回転が起こりやすい状態になることが示された。

謝辞　本研究は科学研究費補助金・新学術領域研究（No.21110007）の支援を受けて行われた。

参考文献等　[1] Y. Minagawa, N. Shirai, S. Uchida and F. Tochikubo: Jpn. J. Appl. Phys. 53 (2014) 010210

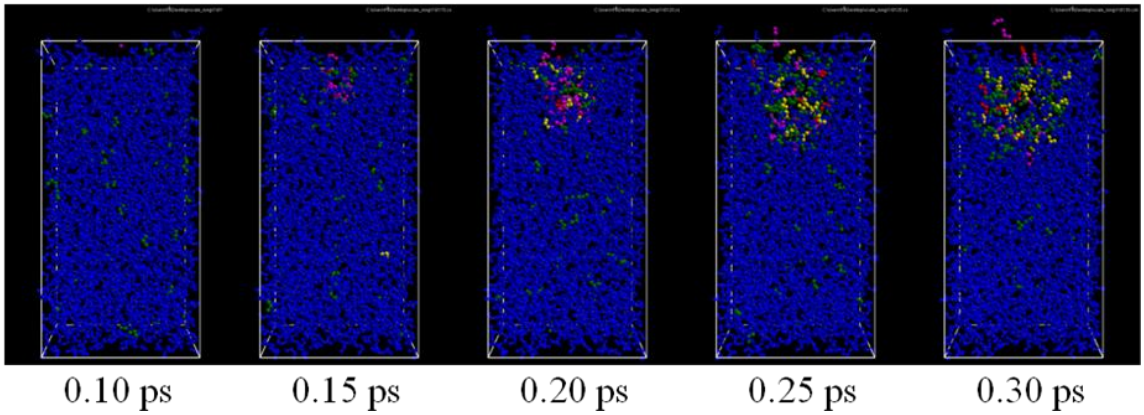


図 1. イオン(100 eV)照射後の液体水分子のエネルギー状態

© 2014 年　応用物理学会