19p-F2-16

大気圧プラズマ照射により生成される液中活性種の反応拡散シミュレーション

Numerical simulation of chemical reactions and diffusion of reactive species in liquid generated by an atmospheric-pressure plasma

大阪大 [1]　○幾世 和将 [1]，浜口 智志 [1]

Osaka Univ. [1] ○Kazumasa Ikuse[1], Satoshi Hamaguchi[1]

E-mail: ikuse@ppl.eng.osaka-u.ac.jp

大気圧プラズマの応用範囲は非常に多岐にわたっており、近年、中でもバイオ・医療応用を目指した研究が盛んにおこなわれている。最近の研究結果から、プラズマから供給される活性酸素種（reactive oxygen species: ROS）や活性窒素種（reactive nitrogen species: RNS）が様々な効果を引き起こす鍵となる物質として注目されている。大気圧プラズマによって気相中に生成される化学種については先行研究が存在するが、しかしながらそれらの化学種は直接生体細胞へ作用するのではなく、まず生体表面に存在する液体（血液やリンパ液などの体液や、実験においては培養液など）へと供給され、液中における化学反応及び拡散の過程を経たのちに細胞へと到達する。そのため、気相中でのデータをそのまま用いることができず、液中での反応拡散を考慮しなければならないが、液中で時々刻々と濃度分布の変化する ROS/RNS を実験的に調べることは極めて困難である。そこで、シミュレーションというアプローチによってこれを調べた。

本研究では、溶液の初期状態を不純物を含まない水とし、プラズマから断続的に供給される活性種及びそれらの化学反応によって液中に生成される化学種の一次元反応拡散方程式(1)を数値的に解くことでシミュレーションを行った。

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 n_i}{\partial x^2} + \tilde{R}_i \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \qquad (1)$$

ここで、i は化学種の区別を示す添え字であり、n_i は化学種 i の液中濃度、t は時間、D_i は化学種 i の拡散係数、x は深さ方向に一次元の軸をとった距離である。また、$\tilde{R}_i$ は化学種 i についての反応速度式に基づく化学反応項である。本研究では、37 種類の化学種、111 の反応式について計算をおこなった。液面は大気圧プラズマに接しているとし、ヘンリーの法則に基づいて気液間での化学種のやり取りが行われるよう境界条件を設定した。

供給開始から10^{-2}秒の時点での濃度分布を Fig. 1 に示す。横軸は液面からの距離であり、縦軸は対数軸で表した各化学種の液中濃度である。供給する化学種は OH と NO のみとし、その供給量はそれぞれ $2.5 \times 10^{-5}\ mol \cdot cm^{-2} \cdot s^{-1}$ 及び $1.9 \times 10^{-7}\ mol \cdot cm^{-2} \cdot s^{-1}$ とした。OH は反応性が高いため、気液界面付近では高濃度で存在しているが、溶液内部ではその濃度は急速に低くなっている。しかしながら、その領域が溶液内での化学種の生成に強い影響を与えていることがわかる。また、比較的安定な H_2O_2 や HO_2、O_2^- などが主に溶液深くへと拡散しているため、実際のプロセスにおいては、まずこれらの化学種が細胞へ到達すると考えられる。

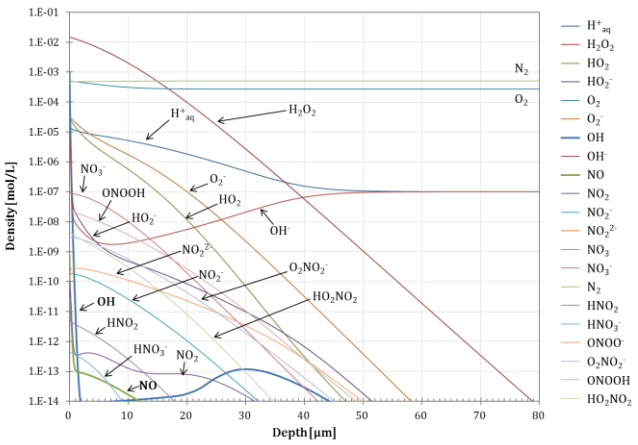

Fig. 1. The concentration distribution of reactive species.

© 2014 年　応用物理学会