

溶存酸素を考慮したグロー放電電解のシミュレーション

Simulation of Glow Discharge Electrolysis Considering Dissolved Oxygen in Liquid

首都大理工 [○] 朽久保 文嘉, 内田 諭

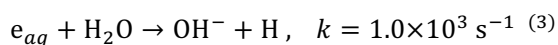
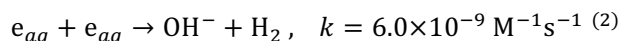
Tokyo Metropolitan Univ., [○] Fumiyoshi Tochikubo, Satoshi Uchida

E-mail: tochi@tmu.ac.jp

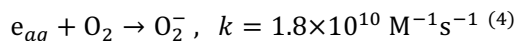
直流グロー放電の一方の金属電極を液体電極（電解液）とした形態は、電気分解における一方の電極を金属から放電プラズマに置き換えたものに相当する。このような形態は Glow Discharge Electrolysis（グロー放電電解）と呼ばれる⁽¹⁾。グロー放電電解では、グロー放電から液面へ入射する荷電粒子、あるいは気相に生成されたラジカルと液体界面の相互作用により液中反応が誘起される。従って、気液界面の現象解明が重要である。本研究の目的は、グロー放電電解（液体電極を有する大気圧直流グロー放電）において、気中と液中での荷電粒子や中性化学種の輸送を明らかにすることであり、具体的には NaCl 水溶液を液体電極とする大気圧 He 直流グロー放電のシミュレーションを行った。この時、気体は He と水蒸気の混合ガスとして扱い、液中での反応過程において重要と考えられる溶存酸素を考慮した。

シミュレーションは大気圧直流グロー放電と液体から構成される系について、径方向の均一性を仮定した一次元モデルにより構成される。ガス部、液体部の厚みはそれぞれ 1 mm である。ガス中では、荷電粒子や中性化学種に対する密度連続式、電子のエネルギー保存式を、液中ではアニオンやカチオン、化学種に対する密度連続式を計算し、ポアソンの式で全体の電位分布や電界を同時に求めている。計算は、グロー放電から液面へ電子が入射する極性について行った。

液面で入射した電子は直ちに水和電子になるものと仮定した。従って、水和電子の反応が界面における起点となる。溶存酸素を考慮しない場合、水和電子は水分子との反応によって OH⁻ を生成するので液面近傍はアルカリ性になる。



大気下での溶存酸素濃度は 8 mg/L ($1.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) であり、水和電子と溶存酸素による以下の O₂⁻ 生成が支配的になるものと予測した。しかし界面近傍の水和電子濃度が高いために、結果的には OH⁻ 生成と同程度となった。即ち、界面近傍のミクロンレベルの領域の濃度が極めて重要である。



参考文献

- (1) A. Hickling and M. D. Ingram, J. Electroanal. Chem. **8** (1964) 65.
- (2) K. H. Schmidt and D. M. Bartels, Chem. Phys. **190** (1995) 145.
- (3) H. A. Schwarz, J. Phys. Chem. **96** (1992) 8937.
- (4) A. J. Elliot et al., J. Chem. Soc., Faraday Trans. **86**, (1990) 1539