

プラズマから水面に入射した電子の モンテカルロシミュレーションによる挙動解析

Analysis of plasma-originated electron behavior in water by Monte Carlo simulation

首都大院システムデザイン ○秋山 直輝, 中川 雄介, 内田 論, 朽久保 文嘉

Tokyo Metropolitan University

○Naoki Akiyama, Yusuke Nakagawa, Satoshi Utida, Fumiyoshi Tochikubo

E-mail: akiyama-naoki@ed.tmu.ac.jp

1. はじめに

近年、気液界面プラズマや液中プラズマなどの液体と接するプラズマの諸現象及び応用に関する研究が急速に広がっている。プラズマから液中に電子を照射すると、運動エネルギーが十分に緩和された後、電子周囲に水分子が配位した水和電子となる。水和電子は液中プラズマにおけるラジカル生成の主要因の1つであるが、水和電子の生成過程についてはほとんど分かっていない。

本研究では、水和電子生成過程の解明を目的とし、プラズマから水面に入射した電子の挙動の数値解析を行う。解析手段として、高エネルギー電子線と水との相互作用解析[1][2]において実績があるモンテカルロシミュレーションを用いる。

2. モンテカルロ法を用いた電子線解析手法

電子と水との衝突過程は、衝突断面積を介した確率的過程と見ることができる。本解析では、衝突断面積から計算した衝突確率を 0~1 の乱数に対応させ、時間間隔 Δt 毎に衝突の有無及び衝突過程を判定した。複数の衝突過程を考慮し、衝突時の散乱角及び衝突の種類に応じたエネルギー損失を考慮した上で衝突後の速度ベクトルを決定した。 Δt は 10^{-18} sとした。計算においては、予め指定した初期エネルギーの電子を液相の水に入射させ、電子の軌跡を追跡した。従来の解析における電子線のエネルギーは 100 eV 以上であるのに対し、本解析では、低エネルギー領域で大きな衝突断面積を有する振動励起、回転励起、電子付着などの衝突過程を考慮する必要がある。考慮した衝突は弾性、電離、電子励起、電子付着、振動励起、回転励起の 6 種類で、気体の水分子と電子の衝突断面積のデータ[3]を用いた。

計算は、電子が水面と垂直方向に入射する条件で行った。電子のエネルギーが 0.2 eV を下回った時点で、水和したとして追跡を終了した。電子が水分子と電離衝突した際の二次電子放出を考慮し、二次電子を含めた全ての電子のエネルギーが水和電子(<0.2 eV)になるまで数値解析を行った。電子が水面上方に存在した場合その電子の数値計算を終了し、次の電子の解析を行った。以上の計算を複数回反復し、多数の電子が水面に入射した場合の水和電子分布を得た。

3. 数値解析結果

初期エネルギー 3 eV、及び 1 keV の電子 5000 個を液体水に入射させた際の、シミュレーション結果を Fig.1 及び Fig.2 に示す。Fig.1 と Fig.2 は、

電子を入射させた位置からの水面方向 r と、入射軸方向 z に対する水和電子の個数を表している。3 eV の電子の平均侵入深さは 3.42 nm であるのに対し、1 keV の電子の侵入深さは 20.38 nm であった。3 eV 電子のエネルギー損失過程は振動励起衝突、及び回転励起衝突が主である一方、1 keV 電子は主に電子衝突、及び電子励起衝突によってエネルギーを損失していた。1 keV 電子の電子増幅率(水和電子総数/入射電子数)は 24.9 となり、OH 生成効率(OH 総数/入射電子数)は 29.0 となった。一方 3 eV 電子の電子増幅率は 0.249 となった。3 eV の電子では OH を生成する衝突過程が起こらないため、OH の生成効率は 0 となった。3 eV の電子増幅率が 1 以下となっているのは、約 75 %の電子が水面上方に散乱されているためである。

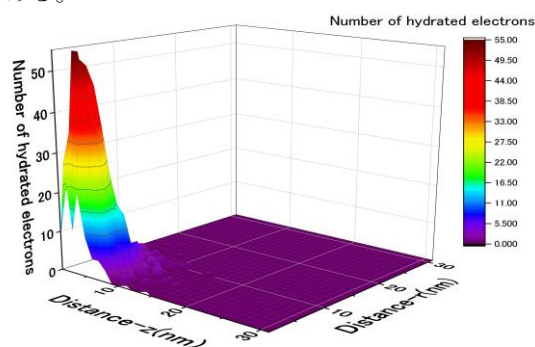


Fig. 1. Distribution of hydrated electrons (3 eV)

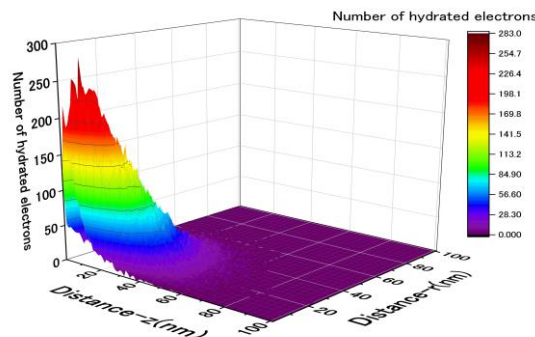


Fig.2 . Distribution of hydrated electrons (1 keV)

文献

- [1] V. Cobut, et al., Radiat. Phys. Chem. 51, 229 (1998).
- [2] V. Cobut, et al., Radiat. Phys. Chem. 51, 245 (1998).
- [3] S. Kawaguchi, K. Satoh J. Plasma Fusion Res. 93, 74-82 (2017)