界面の密度変化を考慮した水面にプラズマ中の電子を入射させたとき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 considering density change of gas-liquid interface

首都大院システムデザイン　°秋山　直輝，中川　雄介，　内田　諭，　朽久保　文嘉
Tokyo Metropolitan University
°Naoki Akiyama, Yusuke Nakagawa, Satoshi Uchida, 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、液体の介在するプラズマの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]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挙動解析

電子と水との衝突過程は、衝突断面積を介した衝突確率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^{-17} sとした。計算において、あらかじ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。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、気体と水分子の電子衝突断面積のデータ[2]を用いた。

入射条件として、プラズマ中の電子は水面に対し垂直方向のベクトルを持つと仮定した。また、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。すべての電子が水和電子になるまで数値解析を行う。

3. 数値解析結果

3 eV の電子 5000 個によるシミュレーション結果を Fig.1 に示す。Fig.1 は、水面と平行な方向 r と、水面と垂直な方向 z に対する水和電子の生成分布を表している。平均電子侵入深さは 3.46 nm となっていた。Fig.2 は、想定した気液界面の水分子の密度変化[3]を表している。Fig.3 は、気液界面の密度変化を導入する前後の z 方向に対する水和電子数を表している。また、導入前後で、どちらも 3 eV の電子 100000 個を水面に対し垂直に入射させた。密度変化導入前は$z = 2$を入射位置と仮定し、$z < 2$の時、電子は水面上方に放出されると仮定した。密度変化導入前の水和電子生成数は 25283 個、導入後は 33900 個となっていた。

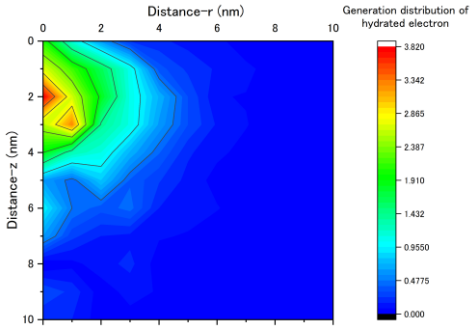

Fig.1 Spacial distribution of hydrated electron by incident electrons(3 eV)

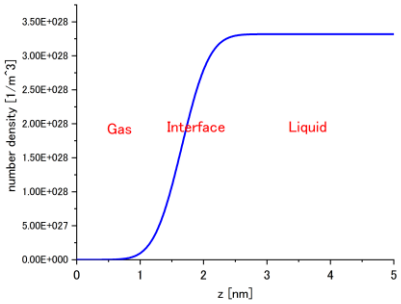

Fig.2 Density change of gas-liquid interface

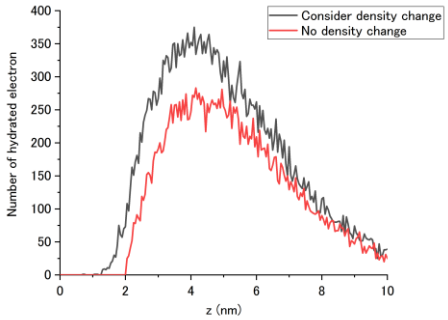

Fig.3 Number of hydrated electrons generated considering density change of gas-liquid interface

文献

[1] V.Cobut,et al., Radiat. Phys. Chem. **51**, 229 (1998).
[2] S. Kawaguchi, K. Satoh J.Plasma Fusion Res. 93, 74-82 (2017)
[3] G. Kikugawa, S. Takagi, Y. Matsumoto Nihon Kikai Gakkai Ronbunshu, B Hen/Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Part B. **73**, 118 (2007)