

大気圧非平衡プラズマ中の単一液滴中の化学反応の数値解析

Numerical analysis of chemical reactions in a single droplet in atmospheric-pressure nonequilibrium plasma

都立大院 システムデザイン ○(M2)横田剛, 中川雄介, 内田諭, 朽久保文嘉

Tokyo Metropolitan Univ. °Go Yokota, Yusuke Nakagawa, Satoshi Uchida, Fumiyoshi Tochikubo

E-mail: yokota-go@ed.tmu.ac.jp

1. はじめに

近年、非平衡大気圧プラズマの多様な発生方法の開発に伴い、プラズマと液体の相互作用の解明及びその利用に関する研究が活発に行われている。プラズマ誘起液中反応の一次反応は界面近傍で起こるため、比表面積の大きい微小液滴の利用は有利である。本研究は、液滴における帯電過程、これに伴う液滴内反応など、微視的観点での物理的、化学的現象解明が目的である。本解析では、プラズマ中における液滴内外の電位分布と電界の解析、液滴内部の化学反応と荷電粒子の輸送を考慮した微視的モデルを用いて数値シミュレーションを行い、液滴内部の生成物について解析した。

2. 解析手法

本解析ではプラズマ中に存在する単一の液滴を考え、液滴同士の相互作用などは起こらないものとした。大気圧ヘリウムプラズマ中の単一液滴のプラズマ-液滴相互作用を、ポアソン方程式と連立した荷電/中性種の密度連続式によりモデル化した。対称性を考慮し、解析は極座標 (r, θ) の2次元で行った。 r 方向の解析領域は0.1 mm、液滴の半径は4 μm で、解析時間は約10 ms、プラズマ中の電子と He^+ の初期密度はどちらも 10^{11} cm^{-3} とした。プラズマ中の電界は大気圧直流ヘリウムグロー放電中の値として1000 V/cmを用いた[1]。外部電界は $-z$ 方向($\theta = \pi$)に一樣とした。

3. 結果と考察

Fig.1に15 μs 時の液滴内部の H^+ 、水和電子 e_{aq}^- の密度分布を示す。 H^+ 、 e_{aq}^- は電子と He^+ の入射によって生成された液中の荷電粒子である。Fig.1より H^+ と e_{aq}^- は液滴界面近傍に多く生成されており、プラズマ誘起液相反応の1次反応が液滴の界面から始まることが確認できた。 H^+ は He^+ の到達しやすい $\theta = 0 \sim \pi/2$ の部分に多く生成され、 e_{aq}^- はプラズマから電子の到達しやすい、 $\theta = \pi/2 \sim \pi$ 部分に多く生成されている。

Fig.2に10 ms時の液滴内部の H^+ 、 e_{aq}^- の密度分

布を示す。Fig.2から、15 μs 時と比べると時間経過による液滴界面反応生成物の増加と内部浸透が見られた。

謝辞

本研究はJSPS 科研費18H01207の助成を受けたものです。

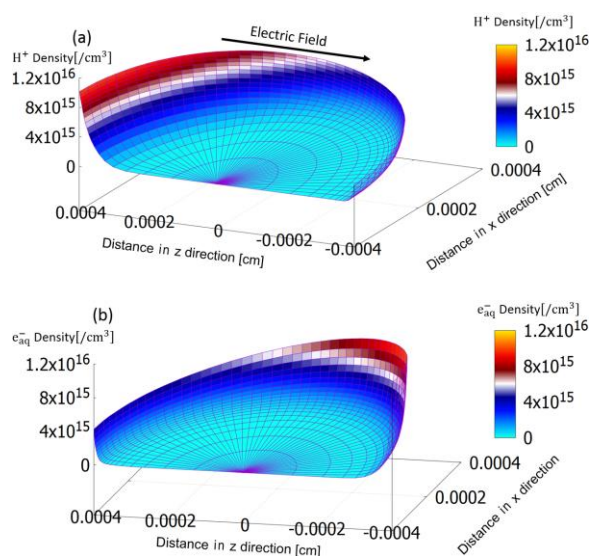


Fig. 1 15 μs 時の液滴内部での(a) H^+ 、(b) e_{aq}^- の密度分布

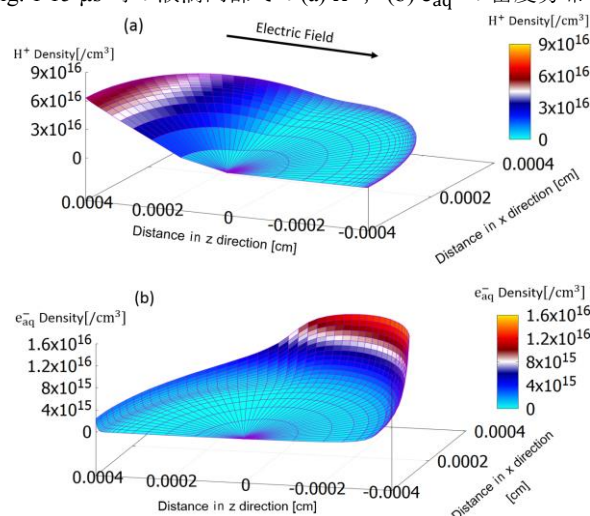


Fig.2 1.5 ms時の液滴内部での(a) H^+ 、(b) e_{aq}^- の密度分布

参考文献

[1] F. Tochikubo and T. Sirafuji, J. Plasma Fusion res Vol191, No5, (2015)307-313.