

モンテカルロ法を用いたプラズマ由来電子による液中活性種生成の解析

Analysis of underwater radical production

by plasma-originated electrons using Monte Carlo method

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 Univ. [○]Naoki Akiyama, Yusuke Nakagawa, Satoshi Uchida,
and 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の解明及び応用に関する研究が急速に広がっている。プラズマから水面に電子照射すると、電子は水分子と相互作用し、液中に様々な活性種を生成する。しかし、プラズマ中の電子はエネルギーが小さく水中深くまで浸透しないため、生成される活性種は水面の近傍に限定され、光吸収などの実験的な検出方法で検出することが非常に難しい[1]。

本研究では、液中での活性種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。解析手段は、高エネルギー電子ビームと水との相互作用解析において実績のあるモンテカルロシミュレーションを用いる。

2. 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考えられる。本解析では、衝突断面積から計算した衝突確率を乱数に対応させ、 Δt s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。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[2]を用いた。

大気圧非平衡プラズマ中の電子を液面に入射することを想定し、Maxwell 分布の電子エネルギー分布関数に従う複数の電子を、速度ベクトルを考慮して水面に入射する。電子のエネルギーが0.2 eVを下回った時点で、電子は水と電子になるとし追跡を終了した。電離衝突により水分子から放出される電子についても解析対象とし、すべての電子の数値計算を行うまで解析を行った。解析の結果、水と電子、及び電子と水分子の衝突によって生成される活性種の生成分布を入手した。

3. 結果と考察

100,000 個の電子の平均エネルギーを1~10 eVまで変化させ水面に入射させた。Fig. 1 に平均の電離発生位置を示す。入射電子のエネルギーが変化しても電離は常に浅い位置で発生していたことが分かった。同じように入射電子のエネルギーを変化させた時の水と電子生成数とOH生成数をFig. 2に示す。平均エネルギーが3 eV程度の時に水と電子生成数が少なくなっ

ているが、水面で後方散乱することにより、電子が気相に移動しているためである。3 eVよりも低エネルギーの場合、入射後すぐに水と電子の生成数が多く、また、3 eV以上の時は電離衝突の回数が増え水と電子の生成数が増えると考えられる。Fig.2には、OHの生成数も示した。OHは電離、電子励起、電子付着衝突によって生成される。中でも、電離衝突によって生成されるOHの数が最も多い。電子励起衝突後の水分子の解離に関しては不明な点が多く、今回は全解離過程の約2割程度しか考慮できていない。入射電子の平均エネルギーが10 eV以下の場合、電子は主に電子励起衝突によってエネルギーを損失しているため、全解離過程を考慮すると、より多くのOHが生成され、電子励起衝突がOH生成に支配的な衝突過程となる可能性が高い。

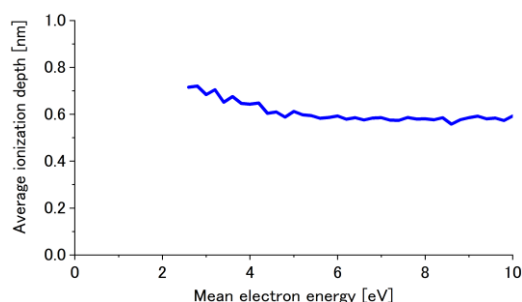


Fig. 1 Average ionization depth from the surface

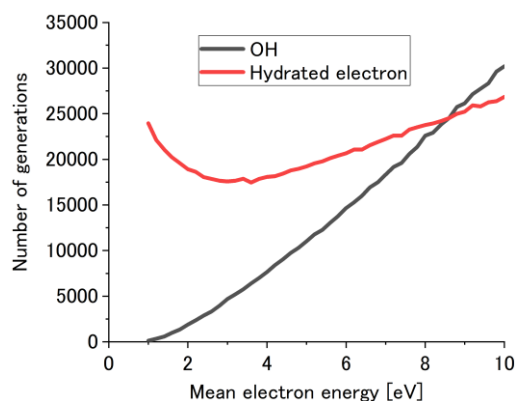


Fig. 2 Number of OH and hydrated electrons

参考文献

- [1] P. Rumbach, D. M. Bartels, R. M. Sankaran, D. B. Go, Nat. Commun. **6**, 7248 (2015).
- [2] S. Kawaguchi, K. Takahashi, K. Satoh, H. Itoh, Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 07LD03 (2016).