

液界面プラズマの実験・計算モデル

液界面プラズマの実験・計算モデル標準化調査専門委員会編

目次	
1. 緒言	3
2. 液界面プラズマ研究の進展	
2.1 液界面プラズマ研究 - 実験編	4
2.2 液界面プラズマ研究 - 計算編	8
3. 計算モデル用断面積データ	
3.1 H ₂ O vapour の電子衝突断面積と輸送係数・ラジカル等生成係数	11
4. プラズマの計測技術	
4.1 プラズマの光学的計測手法	17
4.2 分光測定技術	21
4.3 FT-IR による赤外吸収分光測定	25
5. 実験モデル	
5.1 パルス放電による水中難分解物質の分解	28
5.2 水面上放電プラズマを用いた水中難分解性有機物の分解	32
5.3 気液界面プラズマによる排ガス浄化	36
5.4 電圧極性をパラメータとした針—水面直流グロー放電の特性と有機フッ素化合物分解	40
6. 計算モデル	
6.1 水蒸気添加大気圧ヘリウムプラズマの計算機シミュレーション	44
6.2 気液界面を考慮したプラズマのモデリング	48
6.3 気泡中プラズマのシミュレーション	52
6.4 誘電体バリア放電と接する水面直下における電気二重層の挙動の印加波形依存性	56
6.5 水蒸気添加プラズマのシミュレーション	60
6.6 水面上アルゴンプラズマの一次元シミュレーション	63
7. 計算モデルのチュートリアル	
7.1 COMSOL による一次元アルゴンプラズマの計算例	67

液界面プラズマの実験・計算モデル標準化
調査専門委員会委員

委員長	安岡 康一	(東京工業大学)	委員	白藤 立	(大阪市立大学)
委員	伊藤 晴雄	(千葉工業大学)		高奈 秀匡	(東北大学)
	大久保 雅章	(大阪府立大学)		竹内 希	(東京工業大学)
	小田 昭紀	(千葉工業大学)		佟 立柱	(計測エンジニアリングシステム株式会社)
	小野 茂	(東京都市大学)		見市 知昭	(大阪工業大学)
	金澤 誠司	(大分大学)	幹事	池田 圭	(株式会社 アテナシス)
	佐藤 孝紀	(室蘭工業大学)			

1. 緒言

液中・溶液界面でのプラズマ生成と利用に関する研究は、近年加速度的に広がっており、我が国が世界をリードする分野である。例えばオゾン殺菌に代わる高度水処理、医療や住空間に必要な殺菌・滅菌、超微粒子を始めとする新材料創成や、有機物半導体デバイス制作など、極めて特徴的な応用研究が展開されている。プラズマ生成には、直流やパルス、交流からマイクロ波まで、極めて幅広い周波数が利用され、また用途に応じて反応容器形状や構造も多種多様に変化する。今後も新たなプラズマ生成法と利用形態が生み出されると考えられる。

このように数多くの先端研究がなされたが、研究の多様性から液中・溶液界面プラズマ発生と利用に関してデータの相互比較は困難になってきた。この点は計算機シミュレーションについても同様である。水や水界面現象をモデル化するには、膨大な数の化学種や反応式を考慮する必要があるが、簡単な水界面でのプラズマ発生方式に対しても必要な化学種の物性値や反応断面積などは十分整えられていない。大気圧低温非平衡プラズマシミュレーション、例えば誘電体バリア放電などの計算が約 10 年かけて構築され、現在では高度な計算技術と充実したデータベースが構築されている状況と比較すると、極めて遅れた状況にある。このため、基本となる溶液界面でのプラズマを設定し、実験・計算双方で国際的に比較検討できる統一基礎モデルの構築が必須の状況にある。

例えば気相・液相中のイオン、ラジカル、準安定原子の役割については重要性を認識しているものの、それらの生成機構や反応過程について十分理解されているとは言い難い。理由としては、1) 多くが大気開放系で多種多様なガスが混合し、2) 計測は非接触な方法に限定されて十分な空間分解能と定量的な精度が両立できず、3) プラズマと溶液界面で起きている現象が複雑で、4) 水の蒸発は相変化を伴う現象で計算が困難であり、さらに5) 多様なプラズマ形態があり相互にデータの比較や共有が不可能、といったことなどがあげられる。

そこで本調査専門委員会は、前身である「プラズマによる水処理・水高機能化と水界面における反応過程調査専門委員会」の活動結果を踏まえ、水界面プラズマの実験と計算（シミュレーション）の共通の研究土台を調査研究し、溶液界面プラズマに関する実験と計算の標準化指針を提案することを目的とした。本報告書の構成は以下の通りである。

- 1 章 緒言
- 2 章 液界面プラズマ研究の進展
- 3 章 計算モデル用断面積データ
- 4 章 プラズマの計測技術
- 5 章 実験モデル

6 章 計算モデル

7 章 計算モデルのチュートリアル

2 章では液界面プラズマ研究について、実験と計算の歴史をまとめた。続いて 3 章では計算に不可欠な断面積データをまとめた。4 章では実際のプラズマ特性の評価とデータの蓄積に不可欠な計測技術を示し、5 章 6 章では実験と計算のモデルについて示した。また 7 章ではこの分野の研究に新たに取り組まれる研究者にも配慮して計算の仕方を説明した。

液中・溶液界面プラズマ分野で活躍する第一線の研究者による本調査報告書は、学術的・技術的課題の把握と分析、プラズマ利用システムの統一的評価基準として今後の研究に役立ち、新たな研究基盤が形成されると期待される。(安岡)