

東京大学 大学院新領域創成科学研究科
基盤科学研究系 先端エネルギー工学専攻
2011年3月修了 修士論文要旨

振動励起分子を考慮したストリーマ放電シミュレーション

学生証番号 47-096066 氏名 小室 淳史
(指導教員 小野 亮 准教授)

Key Words : streamer discharge, simulation, vibrationally excited molecule, humidity

空気中で発生させる非熱平衡プラズマは、環境汚染ガス処理、オゾンナイザ、表面処理、殺菌、浄水など様々なところで利用されており、空気中で容易に生成できることから、多くの応用が期待されている。非熱平衡プラズマはコロナ放電やバリア放電など、パルス幅100ナノ秒以下のパルス放電で生成され、電子エネルギーが高くガス温度が低い特徴がある。空気中でパルス放電が発生すると、放電空間には1-10eVのエネルギーを持つ電子が発生する。この電子が空気中の酸素、窒素、水分子と衝突反応を起こし、O,N,OH,Hといった化学的に活性なラジカル（活性種）を生成する。電子のエネルギーはガス温度に換算すると1-10万度に匹敵するが、電子によるガス分子の加熱は放電パルスよりも長い時定数を要するので、ガス分子はそれほど加熱されることなく放電が終了する。このようにして、電子温度が高くガス温度が低い非熱平衡プラズマが生成され、ガスの過熱に無駄にエネルギーを消費されることなく、効率よく多量のラジカルを生成することが出来る。すなわち、少ないエネルギーで効率よく、化学活性度の高いプラズマを生成できる。パルス放電が終了した後、このラジカルの化学反応により、ガス処理や表面処理などの目的を達成する。

本研究室では非熱平衡プラズマのガス処理効率やエネルギー効率の改善を目指し、大気圧プラズマの反応過程についての研究を行ってきた。しかし放電中の電子密度や温度等、計測困難なパラメータについては詳細が未だ解明されていない。このような非平衡プラズマ中の素過程や放電形成現象の計測が困難であることから考えると、物理現象を定式化して理論的または数値的に解析するモデリングが非熱平衡プラズマの機構や特性を理解するための足がかりとなる。ここでいうモデリングとは対象となるプラズマの系に対し、物理現象や化学現象に立脚したモデル化、定式化を行うことである。適切な数値計算手法を用いてこの計算を行えば、プラズマ内で起こる諸現象が再現されることになる。プラズマの反応機構を解明することによって、状況に合わせた最適なプラズマを発生させる事が出来、有害物質分解除去や材料プロセッシングなどの諸所のプラズマ技術におけるエネルギーの高効率化、製造手順の簡易化などが可能となる。このような背景のもと、本論文では非熱平衡プラズマの一種であるストリーマコロナ放電に着目し、放電のモデリングを行う。特に、現在まで十分に考慮されてこなかった振動励起分子の影響をモデルに組み込むことによって、より現象を忠実に再現したモデルを構築することを目的とした。

研究の結果、振動励起分子の0次元シミュレーションにより、本研究室で以前計測した放電後のO₂(v=6)分子の密度時間変化を定量的に再現することに成功した。また、振動エネルギー緩和現象により放電後並進温度が上昇することを理論的に示すことに成功した。ストリーマ放電シミュレーションでは放電中の1次ストリーマ、2次ストリーマの発生から、放電後の温度変化までの一連の流れを、2次元の円筒モデルにおいてシミュレートすることに成功した。本シミュレーションによって得られた結果は、ストリーマヘッドの進展速度や放電発光の様子から本研究室にて得られている実験結果と定性的に一致するものである。本研究によって構築された数値モデルは、ストリーマ放電現象における諸現象の解明やラジカル生成量予測の一助となるものである。