

論文審査の結果の要旨

氏名 小室 淳史

本論文は「大気圧ストリーマ放電の反応シミュレーションモデルの開発と活性種生成機構の解明」と題し、9章から成っている。

第1章は序論であり、研究の背景と目的を述べている。大気圧空气中で発生させる大気圧ストリーマ放電は他種多様な活性種を生成し、その反応を用いた様々な応用技術がある。しかしストリーマ放電の活性種を精度よく計算できるシミュレーションが存在せず、その開発が待たれている。このような背景のもと、本論文では、放電の進展および活性種の計測結果を精度よく再現できるシミュレーションの開発を行い、活性種の生成および反応機構を明らかにすることを目的としている。

第2章から第4章は、放電、化学反応、ガス流体のモデリング手法について述べている。放電のモデリングでは、支配方程式や差分法など一般的な説明から始まり、ストリーマ放電特有の問題についても述べている。ストリーマ放電では、時間・空間的に極めて急峻な勾配をもつストリーマ・ヘッドが存在する。そのため、1 ps、1 μm オーダーの時間空間刻みで1 μs 、1 cm オーダーの領域を計算する必要があり、計算コストが高い。また光電離計算が必要となり、これも計算コストを上げる。このようなストリーマ放電のシミュレーションを、高速かつ高精度に行う手法を説明している。化学反応のモデリングでは、200 近くにおよぶ反応リストを示し、さらに本シミュレーションの特徴である振動励起分子の緩和計算に関する計算手法について詳細に述べている。ガス流体のモデリングでは、一般的な説明に加え、時間空間的变化が急峻な現象の計算のために衝撃波のモデリングで開発された手法を参考にし、ストリーマ放電への適用を議論している。

第5章は、ストリーマ放電の進展過程のシミュレーションである。シミュレーション結果と、著者の研究室で行っているストリーマ放電の計測結果を比較し、ストリーマ放電の基本となる一次ストリーマと二次ストリーマのシミュレーションが観測結果とよく一致することを示している。ストリーマの電界強度を求め、一次ストリーマで 800 Td、二次ストリーマで 120 Td が得られている。

第6章は、ストリーマ放電による活性種の生成機構をシミュレーションで分析している。各種イオンやラジカルについて密度の時間空間変化を計算しているが、特に重要な O, N, OH ラジカルについては計算結果と先行研究の計測結果を比較し、良い一致を示している。O ラジカルや N ラジカルが主に二次ストリーマで生成されることや、OH ラジカルの生成が湿度の増加に対して飽和する現象もよく再現できており、これまで説明がつかなかったこれらの機構について、計算結果に基づいて明らかにしている。

第7章は、放電エネルギーの遷移過程について述べている。シミュレーション結果に

基づき、放電エネルギーの70%以上が N_2 分子の振動励起に消費され、残りのエネルギーで活性種が生成されることを示している。各活性種の生成反応に、エネルギーが何パーセントずつ振り向けられるかといった、活性種生成の効率化に有益なデータを提示している。ストリーマ放電では針電極近傍で温度が急激に高くなり、さらに湿度が高いほど温度が高いという現象がこれまでに観測されていたが、この現象もシミュレーションでは再現できており、その理由について議論している。

第8章は、放電パルス電圧波形制御である。パルス電圧波形によるストリーマ放電の制御技術の確立を目指し、パルス電圧波形の立ち上り速度がストリーマ放電に与える影響について、実験とシミュレーションの両面から研究を行っている。その結果、立ち上り速度が遅いほど二次ストリーマに対する一次ストリーマの消費エネルギーの比率が増え、両ストリーマが生成する活性種の種類が異なることから、パルス波形制御による活性種の種別生成技術の可能性に言及している。

第9章は総括で、本研究で得られた成果をまとめている。

以上要するに、本論文は大気圧ストリーマ放電のシミュレーションモデルを構築し、ストリーマの進展観測や活性種密度計測などの実験結果と比較し、実験結果を精度よく再現するシミュレーションの開発に成功するとともに、シミュレーション結果に基づいてこれまで不明な点が多かった活性種の生成および反応機構を明らかにした点で、先端エネルギー工学、特にプラズマ応用工学に貢献するところが大きい。

したがって、博士（科学）の学位を授与できると認める。

以上 1,839 字