

# 水蒸気を含む空気プラズマにおけるOHラジカル生成に対するN+HO<sub>2</sub>の寄与 On the Contribution of N+HO<sub>2</sub> to Production of OH Radicals in the Air Plasma Involving Water Vapor

白藤立, 吳準席

Tatsuru Shirafuji and Jun-Seok Oh

大阪市立大学大学院工学研究科電子情報系専攻

Department of Physical Electronics and Informatics, Osaka City University

## 1. はじめに

近年, 液体が関与するプラズマの研究が盛んに行われている. 特に, 水溶液が関与する液面上や液中のプラズマでは, 水蒸気の解離を起源とする酸化能力の高いOHラジカルが生成され, 環境浄化などへの応用が期待されている.

このようなプラズマにおいて, 純粋な水蒸気だけが気相に存在する場合には, OHラジカルの生成に最も寄与する反応は水分子の電子衝突解離となる. しかし, 放電装置を簡便にしようとする, オープンエアーで装置を稼働させる場合が多い. この場合, 放電空間には水蒸気以外に窒素と酸素の混合気体である空気が存在することになる.

水蒸気を含んだ空気のプラズマの場合には, 窒素分子や酸素分子の解離生成物である窒素原子や酸素原子, 並びにそれらが関与した二次反応生成物が複雑に関与した反応が進行することになる. 本研究では, そのような反応場におけるOHラジカルの生成反応の寄与率を数値シミュレーションによって調べた.

## 2. 計算条件

今回の計算では, N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>Oの電子衝突解離をトリガーとする反応系を想定した. 考慮した反応数は138個, 化学種は31個である. 詳細計算条件については, ポスターで発表する.

電子衝突反応を基点として, 多数の二次反応が進行するが, ある化学種の生成に注目し, それに寄与する全反応のレートの比率を比較する. これにより, どの反応が支配的であるかを知ることができる. 今回は, 酸化力の強いOHラジカルが, 電子衝突以外の二次反応で生成される際に, どの反応がもっとも寄与率が大きいかを調べた.

## 3. 結果と考察

表1は, 今回考慮した反応のうち, OHラジ

表1. OH生成二次反応のレート係数, レート, 寄与率

Reactions	k cm <sup>3</sup> /s	Rate cm <sup>-3</sup> /s	Ratio %
N2A+H2O=>N2+H+OH	5.00E-14	6.88E+08	0.0
O1D+H2O=>OH+OH	2.75E-10	7.02E+11	0.0
O1D+H2O=>OH+OH	2.75E-10	7.02E+11	0.0
O3P+H2O=>OH+OH	4.48E-24	4.60E+07	0.0
O3P+H2O=>OH+OH	4.48E-24	4.60E+07	0.0
N+H2O=>NH+OH	1.77E-39	4.85E-07	0.0
H+H2O=>H2+OH	2.59E-26	1.23E+03	0.0
N+HO2=>NO+OH	2.20E-11	6.12E+17	77.7
O3P+H+M=>OH+M	1.09E-12	2.28E+12	0.0
O3P+HO2=>O2+OH	2.70E-11	2.82E+16	3.6
H+HO2=>OH+OH	7.20E-11	3.46E+14	0.0
H+HO2=>OH+OH	7.20E-11	3.46E+14	0.0
H+O3=>OH+O2	2.81E-11	7.00E+15	0.9
HO2+NO=>OH+NO2	9.03E-12	3.88E+16	4.9
HO2+O3=>OH+O2+O2	1.94E-15	2.41E+14	0.0
H2O2+O3P=>HO2+OH	1.52E-15	4.56E+11	0.0
NH+O2=>NO+OH	8.54E-15	7.15E+13	0.0
NH2+H2O=>NH3+OH	6.67E-35	2.40E-11	0.0
H2+O3P=>H+OH	6.82E-18	4.18E+07	0.0
H2O2+H=>H2O+OH	4.34E-14	6.01E+10	0.0
O2a1+HO2=>O2+O3P+OH	1.66E-11	1.01E+17	12.8
HNO2+O3P=>NO2+OH	1.09E-15	8.16E+11	0.0

カルの生成に寄与する二次反応を列挙したものである. これらの反応によってOHラジカルが生成するレートは, 反応レート係数だけではなく, そのとき(定常状態)の反応体の密度にも依存する. そのレートの計算結果の総和を100%とし, 各反応がOHラジカル生成にどれだけ寄与するかを計算した結果が右端に記されている. この結果より, N+HO2という反応が全体の77.7%を占めていることがわかる. この結果は, 純粋な水蒸気プラズマと比較すると, 空気中の窒素が関与することによって, 新たなOHラジカル生成のパスが出来ていることを示唆している. 電子衝突による生成レートと比較するとレートの絶対値は小さいかもしれないが, 放電領域から外れた場所では, こうした反応の寄与が想定される.