

イオンエンジンのグリッド損耗評価コードの改良

中野正勝*

Improvements in the grid erosion evaluation code for ion engines

By

Masakatsu NAKANO*

Abstract: Improvements have been made to the 3-D ion beam simulation code to enhance the accuracy of the lifetime estimation of ion engine grid optics. The sputter erosion and coating due to the impacts of high-energy ions and neutrals produced by the elastic scattering and charge-exchange reactions were taken into account, and the change in grid surfaces was dynamically simulated. Comparative evaluation of this code with experiments was performed, yielding results that are in good agreement with the experiment data.

Key words: Simulation, Lifetime, Grid erosion, Ion engine

1. はじめに

イオンエンジンは、電力により生成したイオンを高速に噴射することで推進力を得る電気推進機で、高い比推力を特徴としている¹⁴⁾。イオンエンジンの構成要素の中で、イオン加速系は、印加した電圧差によりイオンを加速するもので、プラズマ生成部とともにイオンエンジンを構成する重要な要素である。この加速系の中で、最も電位の低い加速グリッドには、電荷交換衝突や弾性衝突で生成したイオンや中性粒子が衝突し、徐々に損耗が起こることが知られている。これは直流放電やマイクロ波放電などのプラズマ生成法を問わず起こる現象であり、イオンエンジンにおける寿命制限要因の一つである。

イオンエンジンの開発に際して、長時間試験のみによる耐久性評価は、長時間・高コストを必要とする。そのため、電極損耗機構のモデル化と計算機シミュレーションによる耐久性評価及び認定は、現実的かつ効率的なイオンエンジンの開発を行う上で必要不可欠のものである。

イオンエンジンの加速系を評価するコードは2次元軸対称のものから3次元のものまで多くが開発されている^{1,2,7,8,9,10,15)}。解析手法としては、加速系の電位分布を求め、その後にイオンの動きを追跡するもので、イオンを粒子として扱うか、イオンの流れをビームとして扱うかに大別されるものの、主流のイオンビームの流れを解析する手法としては確立した段階にある。一方で、グリッドの損耗評価まで行っているものは限られており、損耗原因としても電荷交換衝突に起因するイオンを中心としたものが大半で、高速中性粒子、弾性衝突、再付着など影響を含んだ解析はこれからである。また、グリッドの寿命評価についても、作動直後における損耗率からグリッドの形状変化を評価しているものが大半で、グリッドの形状変化を考慮した上での解析^{1,15)}は多くはない。

本研究では、従来から構築してきたコードを基とし、損耗をもたらす粒子として、電荷交換衝突によって生成したイオンと中性粒子、弾性衝突により散乱されたイオンと中性粒子を考慮し、これら粒子によりスパッタされたグリッ

* Tokyo Metropolitan College of Industrial Technology

ド材の再付着を含めることで、より忠実な物理モデルを構築するとともに、グリッド形状の変化を反映させて計算を行うことで、より精度が高く、イオンエンジンの開発に使用可能な耐久性能認定用シミュレーションコードを開発することを目標とする。

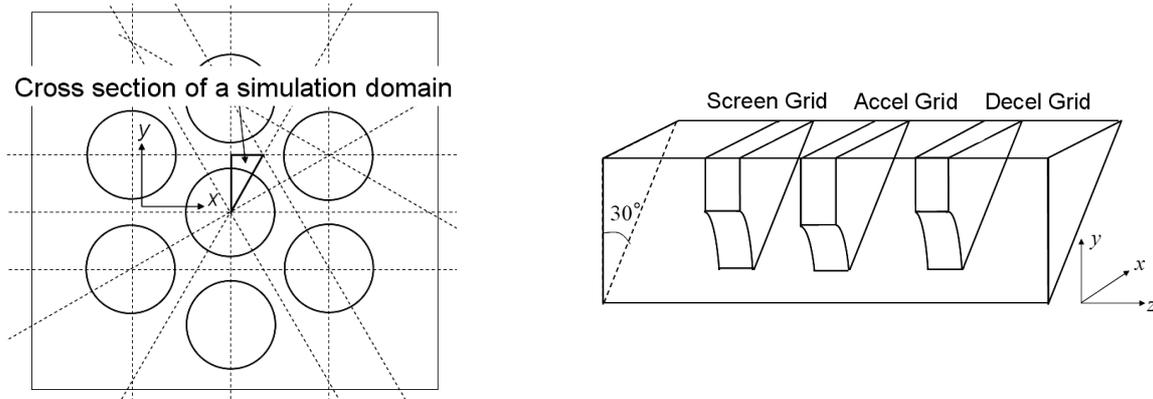


図 1 解析領域（直角三角柱の領域）

2. 計算モデル

2.1. 計算の流れ

グリッド損耗は高速な粒子がグリッドに衝突して原子を叩き出すスパッタによって起こることが知られている。通常、放電室から流出するイオンは、指向性よく加速されておりグリッドに衝突することはない。しかしながら、放電室から漏れ出る中性粒子と加速途中のイオンが衝突することで、グリッドに衝突する粒子が生成される。これらの衝突のうち、衝突断面積等を考慮すると、電荷交換衝突と弾性衝突が支配的であり、電荷交換衝突の場合には衝突により生成した遅いイオンと速い中性粒子が、弾性衝突の場合には散乱されたイオンと衝突によりエネルギーを獲得した中性粒子がそれぞれグリッドに衝突してスパッタを起こす可能性がある。一方で、スパッタされたグリッドの表面原子は、加速系の外に排出されるか、グリッドに付着する。付着による堆積効果でグリッドは厚みを増すため、スパッタによるグリッドの損耗だけではなく、再付着によるグリッドの増大も考慮しなくてはならない。

計算の流れは以下の通りである。なお、損耗によりグリッド形状が変化するため、様々な形状に対応しやすい有限要素法を用いる。

- 1) ある時間のグリッド系に対応したメッシュを切る。中性粒子分布を求めておく。
- 2) 主流のイオンビームを走らせ電荷密度を求める。同時に電子の電荷密度も求める。
- 3) 電位分布をポアソン方程式から求める。
- 4) 2),3)を繰り返し、電位分布を収束させる。
- 5) 主流のイオンビーム、電荷交換衝突、弾性衝突で生成したイオンビームと中性粒子の軌道を追跡する。
- 6) グリッドに衝突する粒子の流束とエネルギーから損耗率を計算する。
- 7) スパッタされたグリッド原子の軌道を追跡し、グリッドへの堆積率を求める。
- 8) 損耗率ならびに堆積率から一定時間後のグリッド形状を求め 1)に戻る。

2.2. 計算領域

イオンエンジンは多数のグリッド孔が配置されており、隣接するグリッド孔間でプラズマ密度やイオンシースに違いがなければ、対称性を利用することにより、最小で30度の直角三角柱の領域（図1参照）を解析すればよい。一方、Wangらによれば、プラズマ密度が薄くイオンビームが極度に収束するグリッド周辺部を扱うには、グリッド周辺部の孔とプラズマシースの非対称性を考慮するべく複数のグリッド孔を含む解析領域が必要になる¹⁰⁾。したがって、任意の解析形状を扱えるよう有限要素法を用いたコードの構築が有利となる。本コードでは有限要素法を用いており、メ

ッシュは入力データとして与えるので解析領域は任意に与えることが可能であるが、計算コストを抑えるべく30度の直角三角柱領域で与えた。

電位計算における境界条件として、上流境界はプラズマ電位、グリッド表面はそれぞれのグリッド電位、それ以外は電位勾配が0となる基本境界条件を与えた。なお、スクリーングリッドから上流境界までの長さは、ビーム放出面の形成に影響を与えない長さを取れば十分であり、一方、下流境界は電荷交換イオンが上流に引き戻される場所、すなわち軸方向の電位勾配が0となる電位の丘まで取れば損耗量評価には十分である。そこで、上流境界までの距離を有効加速長 l_e の数倍程度とし、下流境界までの長さは、加速グリッド下流において電位勾配が0になる場所を与えるKaufmanモデル⁵⁾より求めた長さ l_n

$$l_n = ((1+3R)^{0.5} - 4R^{1.5}) / (J_s / J_{scl})^{0.5} l_e$$

に余裕分を与えて決定する。ここで、 J_s / J_{scl} は空間電荷制限電流密度に対するビーム電流密度の比を表し、また、 ϕ_s 、 ϕ_a をスクリーングリッド電圧、加速グリッド電圧として $R = \phi_s / (\phi_s - \phi_a)$ である。ただし、これらの計算領域長が十分であるかは2次元軸対称コード¹⁵⁾で検証を加え、事前に決定する。なお、要素の大きさについては、放電室及び下流の中和プラズマ部分でデバイ長以下となるように与える。

2.3. 電位計算

電位分布は、イオンと電子の電荷密度をそれぞれ ρ_i 、 ρ_e で与えると、ポアソン方程式

$$\nabla^2 \phi = -(\rho_i - \rho_e) / \epsilon$$

から決定される。ここで、放電室及び下流の中和領域における電子密度については、電子温度 T_e のボルツマンの関係式で与えられるものとして、それぞれのプラズマ電位 ϕ_0 からの電位差を用いて以下で与える。

$$\rho_e = \rho_{e0} \exp((\phi - \phi_0) / k_B / T_e)$$

イオンの密度は主流のイオンビームの軌道を解くことにより求める。主流イオンビームの軌道は運動方程式

$$Mv \nabla v = -q \nabla \phi$$

を解くことにより決定される。ここで、 M はイオンの質量、 q はイオンの電荷である。各イオンビームが通過する要素において、イオンの電荷密度 ρ_i は、イオンビームの滞在時間を Δt とし、要素の体積を V とすると

$$\rho_i = \sum J_k \Delta t_k / V$$

から求めることができる。

2.4. 中性粒子密度

中性粒子の密度から求められる粒子間の衝突断面積は十分小さいため($K_n > 1$)、中性粒子間の衝突は無視し、自由分子流であるとして求める。中性粒子は上流境界より熱速度で流入させるものとし、イオンビームの流量と推進剤利用効率から求めた中性粒子の流束を満たすように密度を決定する。なお、イオンのうちスクリーングリッド上流面に衝突するものは中性粒子と変るので、スクリーングリッド上流面も中性粒子の発生源となる。なお、グリッド表面に達した中性粒子はグリッドの温度を与え、拡散反射されるものとした。

2.5. 電荷交換衝突及び弾性衝突

電荷交換衝突及び弾性衝突によって生じる電流 J_{cex} と J_{els} は以下のように求める。各要素における中性粒子の密度を n_n 、平均速度を v_n とし、 k 番目のイオンビームの速度を v_{ik} 、滞在時間を Δt_k とすると、衝突断面積をそれぞれ σ_{cex} 、 σ_{els} と表記すれば、要素を通過するイオンビームについて和を取ることで

$$J_{cex} = \sum J_k |v_{ik} - v_n| n_n \sigma_{cex} \Delta t_k$$

$$J_{els} = \sum J_k |v_{ik} - v_n| n_n \sigma_{els} \Delta t_k$$

となる。ここで、衝突により生成した電荷交換イオンビームは、その要素における中性粒子の平均速度を初速として走らせ、衝突によって電荷を失って中性粒子に変わった粒子は、衝突前のイオンの初速を持たせて走らせる。一方、弾性衝突における衝突後の速度はランダムに決定する。具体的には、衝突前のイオンビームと中性粒子の速度を v_i 、 v_n とすると、衝突後の両者の速度 v_i' 、中性粒子の速度 v_n' は、乱数 R_1, R_2 ($0 \leq R_1, R_2 \leq 1$)を用いて

$$\dot{v}_{ix} = (v_{ix} + v_{nx}) / 2 + (v_{ix} - v_{nx}) (1 - (1 - 2R_1)^2)^{0.5} \cos(2\pi R_2)$$

$$\dot{v}_{iy} = (v_{iy} + v_{ny}) / 2 + (v_{iy} - v_{ny}) (1 - (1 - 2R_1)^2)^{0.5} \sin(2\pi R_2)$$

$$\dot{v}_{iz} = (v_{iz} + v_{nz}) / 2 + (v_{iz} - v_{nz}) (1 - 2R_1)$$

$$\dot{v}_{nx} = (v_{ix} + v_{nx}) / 2 - (v_{ix} - v_{nx}) (1 - (1 - 2R_1)^2)^{0.5} \cos(2\pi R_2)$$

$$\dot{v}_{ny} = (v_{iy} + v_{ny}) / 2 - (v_{iy} - v_{ny}) (1 - (1 - 2R_1)^2)^{0.5} \sin(2\pi R_2)$$

$$\dot{v}_{nz} = (v_{iz} + v_{nz}) / 2 - (v_{iz} - v_{nz}) (1 - 2R_1)$$

から計算される。これらのイオンビームと中性粒子は、計算領域の外に達するか、あるいは、グリッドに衝突するまで追跡される。

2.6. スパッタ, 再付着, グリッド形状更新

グリッドの損耗を引き起こすのは加速されたイオンと高速中性粒子である。グリッドに入射するイオンビームの電流を J とすれば、単位時間当たりのスパッタ量 \dot{m}_i は、スパッタ率を Y 、グリッドへの入射エネルギーを E 、入射角度を θ とすれば、

$$\dot{m}_i = J / e \times Y(E, \theta)$$

から与えられる。また、高速中性粒子の流束を Γ_n とすると単位時間当たりのスパッタ量は同様に

$$\dot{m}_n = \Gamma_n \times Y(E, \theta)$$

となる。スパッタ率については、文献値^{11,12,13}より与えるものとする。なお、これらのデータ^{11,13}は、イオンの入射角が $0 \sim 60$ 度の範囲で取得されているため、 60 度以上の入射角についてはデータを外挿して与えている。また、イオンの入射エネルギーがモリブデンでは 500 eV 以下、カーボン・カーボン複合材（以下、C/C）では 200 eV 以下が取得されていないため、例えば Mo では Yamamura の半経験式¹²より算出した値を用いて 500 eV 以下を算出している。一方、C/C では 200 eV 以下のスパッタ率はエネルギーに比例するものとして与えた。

グリッドへ入射するイオンならびに中性粒子によるスパッタ量が計算できれば、グリッドから放出されるグリッド材原子の流束を求めることが可能となる。グリッド上の特定の領域から放出されるグリッド材原子の流束を Γ_g とし、その領域に飛び込むイオンと中性粒子によるスパッタ量を \dot{m}_i 、 \dot{m}_n とすれば、

$$\Gamma_g = \dot{m}_i + \dot{m}_n$$

であるので、これらをグリッド材の表面から各方向に重み付けして放出し、軌道を追跡する。放出方向の重み付けには、スパッタ原子の放出方向成分まで含む微分スパッタ率が必要であるが、現状ではデータが不足しており、今後の充実が待たれる。

放出されたグリッド原子で再びグリッドに到達したものに再付着率 ϕ_s を掛けることで付着量が求まる。この際、到達量の $(1 - \phi_s)$ は再び放出されることとなるのでこれも同様に追跡する。スパッタされたグリッド材の数割は加速部外に排出されるので、この計算を数回繰り返せば付着量はほぼ一定値に落ち着く。再付着率のデータは数少ないが、Marker ら⁵によれば Carbon の場合は 0.78 であることが報告されている。

以上により、グリッド表面における損耗率、再付着率が求まったので、損耗率から再付着率を引いた正味の損耗率に適切な時間幅をかけることでグリッド表面の質量変化から体積変化、すなわち形状変化が計算できる。

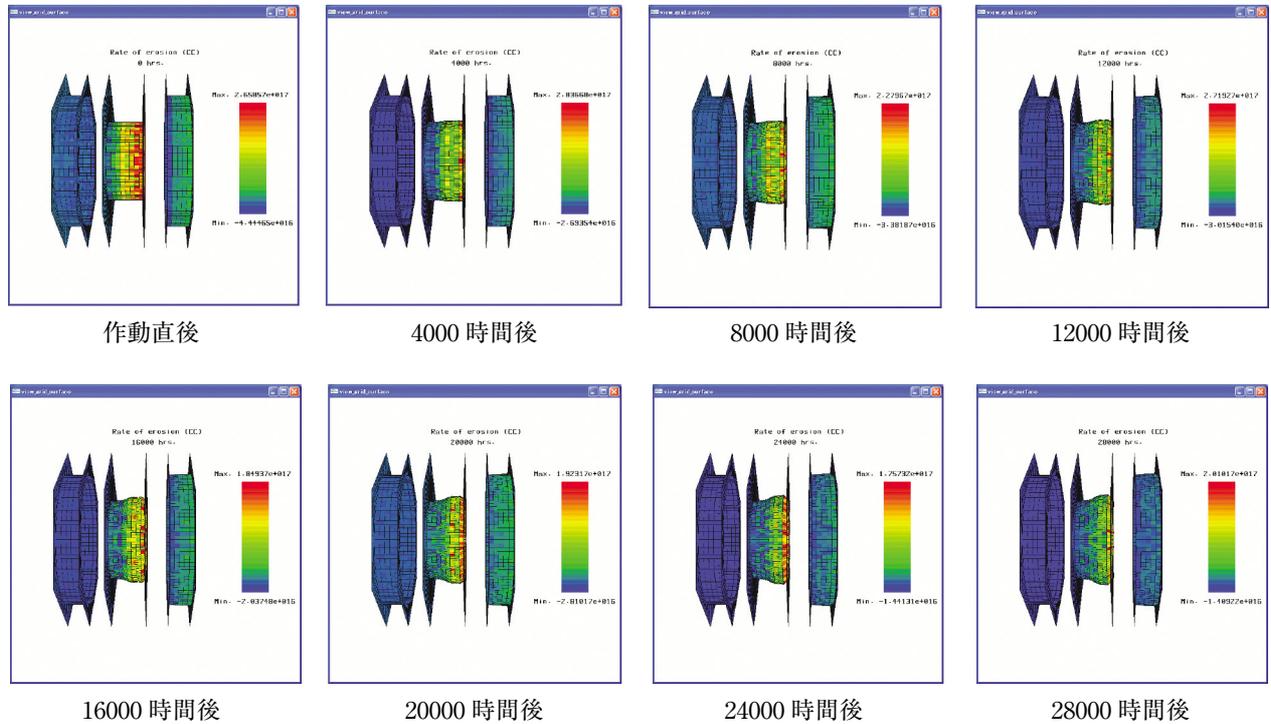


図2 グリッドの形状変化と損耗強度

3. 計算例

C/C グリッドを用いた加速系についてグリッド形状変化を計算した。なお、コードの試験用の計算のため、 $\mu 10$ グリッド^{3,4)}と寸法や作動条件が必ずしも同一ではないことを断っておく。スクリーングリッド、加速グリッド、減速グリッドの孔の直径は 3.0 mm, 1.8 mm, 3.0 mm, 各グリッドの幅を 0.5 mm, 0.8 mm, 0.5 mm, 間隔を 0.5 mm, 0.5 mm とし、スクリーングリッドの開口比を 0.67 とし、接点数 10543, 要素数 8940 のメッシュを用いた。メッシュ間隔は放電室及び中和領域でデバイ長以下になるようにした。

作動条件として $NP/H=0.9 \times 10^{-9} A/V^{1.5}$ (ここでは $l_e=(l_g^2+D_s^2/4)^{1/2}$ を用いた) とし、推進剤利用効率を 80% とした。スクリーングリッド電圧は 1200V, 加速グリッド電圧は -300 V, 放電室のプラズマ電位は 30 V スクリーングリッド電圧よりも高いものとした。放電室および下流の中和領域の電子温度は 6 eV とし、中性粒子、イオン、グリッドの各温度は 373 K とした。放電室に入射するイオンと中性粒子の速度は熱速度で与え、NP/H と推進剤利用効率から単位面積当たりのイオン及び中性粒子の流束を求め上流のプラズマ密度ならびに中性粒子密度を決定した。また、下流のプラズマ密度は、単位面積当たりのイオンの流束を無限遠のイオンの速度 $(2q\phi_s/M)^{0.5}$ で割り求めている。

電荷交換衝突断面積は $\sigma_{ce}=(17.35-2.34 \times \log(v))^2 \times 10^{-20} m^2$ を与え、弾性散乱は Hard Sphere モデルを用いた。上流境界より入射させる主流のイオンビームの本数は一様な間隔で 56651 本 (1 要素あたり 276 本が通過) を与え、スパッタ計算のために各要素から流出させる電荷交換イオンと高速中性粒子、弾性衝突イオンと衝突を受けた中性粒子の数は要素 1 個あたりそれぞれ 256 ペア (合計 1024 個) とした。これら粒子の要素における出発位置はランダムに決定し、乱数の生成にはメルセンヌツイスタを用いた。また、再付着の計算に用いる損耗粒子については、グリッド表面から法線方向に見る空間を 64 個の等立体角に分割し、それぞれの立体角方向に放出した。C/C のスパッタ率は文献¹¹⁾より与え、再付着率は文献⁶⁾より 0.78 とした。

グリッド形状の更新にあたり、時間刻みは $\Delta t=2000$ hrs とし、C/C の比重を 1.7 としグリッドの形状変化を求めた。グリッド形状の更新の時間刻みについては短いのが望ましいが、計算時間が増加するため効率的な寿命評価の観点からはむやみに小さくすることは出来ない。本解析では、事前に、 $\Delta t=1000$ hrs, $\Delta t=2000$ hrs, $\Delta t=4000$ hrs の場合に

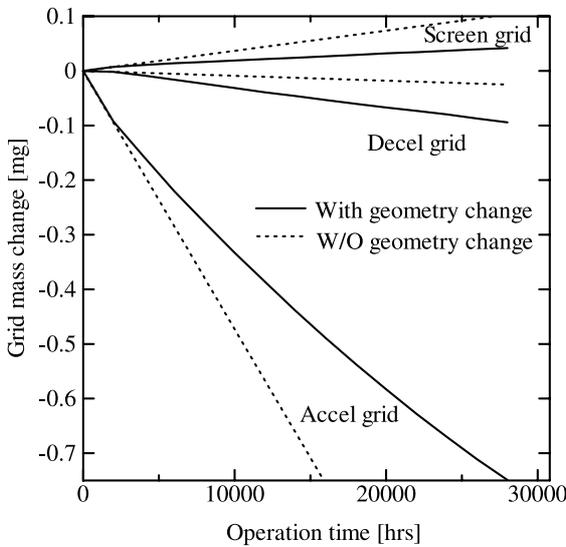


図3 グリッド1孔の質量変化の計算値

の質量変化も実験データのエラーバーの範囲に収まる傾向を示した。

比較のために、作動直後のグリッド損耗率を用いてグリッドの質量変化を求めたものを点線で示す。スクリーングリッド質量、加速グリッド質量については、質量変化を約50%過大に評価している一方で、減速グリッドの質量変化は1/4程度と過小に評価した。すなわち、正確な寿命評価のためにはグリッド形状の変化を考慮した解析が必要であることが示された。また、計算によって得られた加速グリッド電流は作動直後が $0.81 \mu\text{A}$ であり、28000時間後には $0.66 \mu\text{A}$ であった。加速グリッド電流が時間の経過とともに減少するのは、図2に示されるように加速グリッドの孔径が大きくなったからである。船木らの実験では加速グリッド電流値は $0.5 \pm 0.05 \text{ mA}$ と報告されているが、本計算結果に孔数の約800個をかけると $0.65 \sim 0.53 \text{ mA}$ となり、シミュレーションにおける寸法の違いを考慮してもよい一致と言える。

4. 今後の課題

上述の計算例に示したように、計算により求められた加速グリッド形状、質量変化、加速グリッド電流値を実験値と比較することで、コードの妥当性の検証が可能である。ただし、実験値はグリッド全体で計測されているデータのため、単純な比較はできないことに注意する必要がある。

加えて、本コードが実験結果を実用上十分な時間内に再現できるよう、コードのチューニングアップの作業が必要である。具体的には、ポアソン方程式を高速に解くためのソルバの採用、コードの並列化などがある。また、メッシュサイズや境界の長さ、最低限必要な粒子数、グリッド形状更新の時間幅など、試行錯誤によって決定するパラメータもある。これらコードのチューニングアップ作業とともに、衝突確率、スパッタ率、再付着率などの物性値の整備、ならびにプラズマ密度、中性粒子密度（温度）などの入力値の精度向上も課題となる。

5. まとめ

イオンエンジンの寿命の決定要因の一つであるグリッド損耗を解析するためのコードを改良した。このコードは、スパッタリングとグリッド材の再付着によるグリッド形状の変化を扱うことが可能である。実験との比較の結果、加速グリッド電流、グリッド質量変化などについて妥当な結果を示すことが示された。また、グリッド形状の変化を考慮した評価が必要であることも示された。今後は、実験値との比較による計算結果の妥当性の検証と共にコードの高速化が必要となる。

ついてアクセル質量の減少量を求めた結果から、 $\Delta t = 1000 \text{ hrs}$ を基準にして $\Delta t = 2000 \text{ hrs}$ では約3%、 $\Delta t = 4000 \text{ hrs}$ では約10%の誤差（いずれも寿命を過小に評価する）があることから、計算時間も考慮して $\Delta t = 2000 \text{ hrs}$ を選んだ。各時間ステップにおける計算時間はパーソナルコンピュータ（AMD Athlon64 FX-62）を用いて20時間である。

図2に計算結果の一例を示す。28000時間後まで、4000時間ごとのグリッド形状と損耗強度分布である。損耗率が最も高いのは加速グリッド下流内壁である。一方、再付着率が高いのはスクリーングリッドである。

図3に各グリッドの質量変化を実線で示す。スクリーングリッドの質量はわずかであるが増加し、減速グリッド、加速グリッドの順で質量の減少が大きくなる。これらの結果のうち、スクリーングリッドの質量増加と加速グリッドの質量減少の結果は、船木らの実験データ（文献3のFig.7）とも定性的によい一致を示しており、一方、減速グリッド

参 考 文 献

- [1] Emhoff, J., W. and Boyd, I. D., “NEXT Ion Optics Modeling of Total Thruster Performance,” 41st AIAA/ASME/SAE/ASEE joint Propulsion Conference & Exhibit, Tucson, Arizona, July 2005.
- [2] Farnell, C. C., Williams, J. D., and Wilbur, P. J., “NEXT Ion Optics Simulation Via ffx,” AIAA 2003-4869, 39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference, Huntsville, AL, July 2003.
- [3] Funaki, I., Kuninaka, H., Toki, K., Shimizu, Y., Nishiyama K. and Horiuchi, Y., “Verification Tests of Carbon-Carbon Composite Grids for Microwave Discharge Ion Thruster,” Journal of Propulsion and Power, Vol.18. No.1, pp.169-175.
- [4] Funaki, I., Kuninaka H. and Toki, K., “Plasma Characterization of a 10-cm Diameter Microwave Discharge Ion Thruster,” Journal of Propulsion and Power, Vol. 20, No. 4, pp.718-727.
- [5] Kaufman, R., “One-Dimensional Analysis of Ion Rockets,” NASA TN D-261, 1960.
- [6] Marker, C. L., Clemons, L. A., Banks, B. A., Miller, S., Snyder, A., Hung, C., Karniotis C. A. and Waters, D. L., “Transport of Sputtered Carbon During Ground-Based Life Testing of Ion Thrusters,” NASA/TM-2005-213798, June 2005.
- [7] Nakayama, Y. and Wilbur, P. J., “Numerical Simulation of Ion Beam Optics for Many-grid Systems,” AIAA Journal of Propulsion and Power, Vol. 19, No. 4, 2001, pp. 607.613.
- [8] Okawa, Y. and Takegahara, H., “Particle Simulation on Ion Beam Extraction Phenomena in an Ion Thruster,” 26th International Electric Propulsion Conference, IEPC 99-162, Oct. 1999.
- [9] Wang, J., Polk, J., Brophy J. and Katz, I., “Three-Dimensional Particle Simulations of Ion-Optics Plasma Flow and Grid Erosion,” Journal of Propulsion and Power, Vol. 19, No. 6, pp.1192-1199.
- [10] Wang, J., Caoy, Y., Kafafyy, R., Martinezz, R. and Williams, J., “Ion Impingement Limits of Sub-Scale Ion Optics: Comparison of Simulation and Experiment,” AIAA 2006-4999, 42nd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, 9-12 July 2006, Sacramento, California.
- [11] Williams, J. D., Johnson M. L. and Williams, D. D., “Differential Sputtering Behavior of Pyrolytic Graphite and Carbon-Carbon Composite Under Xenon Bombardment,” AIAA 2004-3788, 40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, 11-14 July 2004, Fort Lauderdale, Florida.
- [12] Yamamura, Y. and Tahara, H., “Energy Dependence of Ion-Induced Sputtering Yields from Monatomic Solids at Normal Incidence,” Atomic Data and Nuclear Tables, Vol.62, No.2, 1996, pp.149-253.
- [13] Zoerb, K. A., Williams, J. D., Williams D. D. and Yalin, A. P., “Differential Sputtering Yields of Refractory Metals by Xenon, Krypton, and Argon Ion Bombardment at Normal and Oblique Incidences,” IEPC-2005-293, 29th International Electric Propulsion Conference, Princeton University, October 31-November 4, 2005.
- [14] 栗木恭一, 荒川義博編, “電気推進ロケット入門,” 東京大学出版会, 2003.
- [15] 中野正勝, 荒川義博, “イオンエンジンのグリッド耐久性能計算”, 日本航空宇宙学会論文集 第48巻 555号, 2000年4月, pp.111-117.