

文章编号:1000-8055(2009)08-1911-06

# 电荷交换离子对栅极系统束流影响的数值研究

钟凌伟, 刘 宇, 王海兴, 汤海滨, 任军学  
(北京航空航天大学 宇航学院, 北京 100191)

**摘 要:** 采用二维网格质点法(PIC)计算离子在离子发动机栅极系统中的运动,通过在模型中添加离子和中性粒子电荷交换的 Monte Carlo 碰撞模块,得到了电荷交换离子在栅极周围的分布及电荷交换离子的运动规律. 计算结果表明:考虑电荷交换离子后,屏栅极电流较不考虑电荷交换离子情况时增大了 1.42%,所受影响不大,加速栅极电流由 0 增大到主束流电流的 1.41%. 模拟结果表明:加速栅极下游较远处产生的电荷交换离子,是造成加速栅极下游面腐蚀及加速栅极电流的主要原因.

**关 键 词:** 离子发动机; 栅极系统; 电荷交换离子; 网格质点法; Monte Carlo 碰撞

**中图分类号:** V439

**文献标识码:** A

## Numerical study the influences of charge exchange ions on optical system ion beam

ZHONG Ling-wei, LIU Yu, WANG Hai-xing,  
TANG Hai-bin, REN Jun-xue  
(School of Astronautics,

Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China)

**Abstract:** Based on particle-in-cell (PIC) and Monte Carlo collision (MCC) method, a two-dimensional numerical model was adopted to investigate the distribution and kinetic characteristics of the charge exchange (CEX) ions in the optical system of ion thruster. The simulation results show that, the screen grid current is increased by 1.42 percent when the CEX ions are considered. On the other hand, the accelerator grid current increases from zero to 1.41 percent of the main beam current. It is indicated from the simulation results that the CEX ions originated in the far downstream region of the optics are the main reason of the accelerator grid current and the erosion on the downstream face of the accelerator grid.

**Key words:** ion thruster; optical system; charge exchange (CEX) ions;  
particle-in-cell (PIC); Monte Carlo collision (MCC)

离子发动机是静电型电推进的一种. 在离子发动机电离室内,阴极发射出的电子轰击推进剂原子,产生带正电荷的离子,离子经栅极系统的静电场加速而高速喷出,产生推力.

受电场等因素的限制,离子发动机的推力通常较小. 因而,要完成一定的任务,离子发动机需

要更长的工作时间. 这就要求离子发动机有更长的工作寿命,一般要达到上万小时.

栅极系统是决定离子发动机寿命的一个重要因素,其失效形式主要有三种:屏栅极和加速栅极短路,栅极结构失效以及栅极系统下游等离子体中的电子回流. 其中,栅极结构失效主要由电荷

收稿日期:2008-11-18; 修订日期:2009-03-30

基金项目:真空低温技术与物理国家级重点实验室基金(9140C5504020704); 国家自然科学基金(10805004)

作者简介:钟凌伟(1980-),男,河北易县人,博士生,主要从事空间推进研究. E-mail:zhonglw@sa.buaa.edu.cn

交换离子溅射腐蚀加速栅极造成<sup>[1]</sup>.

本文以离子发动机栅极系统为研究对象,通过编程计算得到束流离子及电荷交换离子在栅极系统间的运动规律.目的是为了研究电荷交换离子对栅极系统的影响,进而为离子发动机栅极系统的设计提供参考.

1 数值模型

1.1 计算域和工况

基于栅极孔的对称性,本文选取栅极上一对栅极孔的二分之一进行模拟,计算域如图 1 所示.

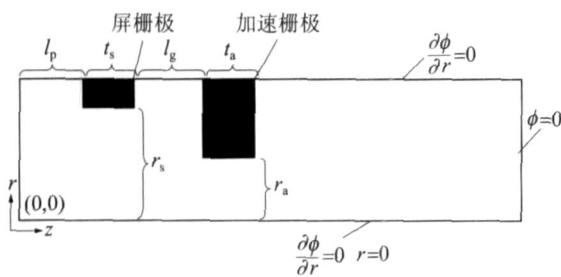


图 1 计算区域示意图  
Fig.1 Schematic of the computational domain

图 1 中给出了几何参数的符号表示,同时给出了部分边界条件.上、下边界为 Newmann 型边界条件,离子越过这两个边界时镜像返回计算域;左、右边界为 Dirichlet 边界条件,离子从左边界进入计算域,越过右边界时将其删除.栅极为等电势体,同时为吸收边界,即将撞击到栅极的离子删除.

栅极几何参数、工作电压以及电离室等离子体参数等如表 1 所示.

1.2 粒子模拟

本文采用网格质点法<sup>[2]</sup>模拟离子在栅极系统间的运动,即将离子看作点粒子并对计算域进行网格划分,通过计算域边界条件和离子携带电量计算网格节点的电势和电场,再通过网格节点上的电场强度计算离子的运动.在每一个时间步内,一定数目的离子从计算域左边界进入计算区域,此数目由发动机的束流密度决定.同时,在每个时间步内,每个离子经历如下四个步骤:通过面积权重法将离子所带电量向所在网格的节点进行插值,得到网格节点上的电荷密度;利用网格节点上的电荷密度计算出网格节点上的电势和电场;再次利用面积权重法将网格节点上的电场向网格内的离子插值,得到离子所受到的力;用牛顿时第二

定律实现离子的运动.重复这四个步骤,一直到计算域内的离子数目稳定为止.

表 1 几何尺寸与工作参数  
Table 1 Geometric dimensions and operating parameters

| 参 数                                             | 数值   |
|-------------------------------------------------|------|
| 计算域左边界至屏栅极上游面距离 $l_p$ / mm                      | 0.7  |
| 屏栅极厚度 $t_s$ / mm                                | 0.5  |
| 栅极间距 $l_g$ / mm                                 | 0.9  |
| 加速栅极厚度 $t_a$ / mm                               | 0.75 |
| 屏栅极孔半径 $r_s$ / mm                               | 1.1  |
| 加速栅极孔半径 $r_a$ / mm                              | 0.65 |
| 屏栅极电压 $V_s$ / V                                 | 1200 |
| 加速栅极电压 $V_a$ / V                                | -500 |
| 电离室等离子体悬浮电势 $V_p$ / V                           | 30   |
| 电离室等离子体温度 $T$ / K                               | 500  |
| 电离室等离子体密度 $n_0$ / $10^{17} \text{ m}^{-3}$      | 2.0  |
| 电离室电子能量 $T_{e0}$ / eV                           | 4.5  |
| 加速栅极下游等离子体电子能量 $T_{\infty}$ / eV                | 1.5  |
| 加速栅极下游等离子体电子密度 $n_e$ / $10^{15} \text{ m}^{-3}$ | 1.5  |

离子在栅极系统中运动时,忽略束流自感磁场的影响.因此,电势可以通过求解静电场 Poisson 方程得到

$$\nabla^2 \Phi = - \frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_e) \tag{1}$$

式中  $\Phi$  为电势,  $e$  为电子电量,  $\epsilon_0$  为真空介电常数,  $n_i$  为离子数密度,  $n_e$  为电子数密度.

电场强度  $E$  由下式给出:

$$E = - \nabla \Phi \tag{2}$$

假设等离子体中的电子为恒温的无碰撞流,屏栅极上游以及加速栅极下游的电子数密度服从 Boltzmann 分布<sup>[3]</sup>.

在等离子体粒子模拟中,计算域的网格尺寸应满足如下条件<sup>[4]</sup>,即

$$\Delta z \leq \lambda_b, \quad \Delta r \leq \lambda_b \tag{3}$$

式中  $\Delta z$  为网格的轴向尺寸,  $\Delta r$  为网格的径向尺寸,  $\lambda_b$  为等离子体德拜长度,其表达式为

$$\lambda_b = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T_{e0}}{n e^2}} \tag{4}$$

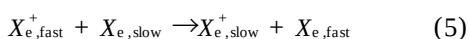
式中  $k$  为 Boltzmann 常数.本模拟中,采用结构化网格,且  $\Delta z = \Delta r \approx \lambda_b$ .

本文的模拟离子为氩离子,离子从左边界进

向随机位置进入模拟区域. 此边界上离子的轴向速度满足 Bohm 判据<sup>[5]</sup>, 径向速度满足 Maxwellian 分布. 在程序中, 离子初始位置以及离子速度方向分别通过 0~1 之间均匀分布的随机数实现. 程序采用电脑内部时间作为随机数种子, 避免产生相同的随机数. 离子信息用单链表存储, 由于不存在内存资源的浪费, 因而可显著提高程序的存储效率与计算效率<sup>[6]</sup>.

### 1.3 电荷交换离子的模拟

在离子发动机工作过程中, 进入电离室的推进剂有一部分未电离, 其中的一些中性粒子会通过栅极孔逸出发动机. 如果是地面试验, 真空舱内有残存的中性气体. 离子束流中的高速离子和以热速度运动的中性粒子之间会发生电荷交换碰撞, 产生速度很慢的电荷交换离子和速度很快的中性粒子, 其过程如下式所示:



本文中, 用 Monte Carlo 碰撞法描述电荷交换离子的产生过程. 在每个时间步内, 将 Monte Carlo 碰撞模块加入到粒子运动模块之后进行. 这样, 产生的电荷交换离子即可以参与下一时间步的电场计算和离子运动过程. 电荷交换碰撞的实质是快速离子和慢速中性粒子间电荷的转移, 在程序中, 将慢速中性粒子的速度赋给快速离子来实现这一过程. 因为模拟区域较小, 假定中性粒子的密度为常数. 中性粒子的速度分量通过其热速度大小和随机数程序给出.

计算域中任一网格中产生电荷交换离子的数目由下式决定:

$$N_{cex} = N_i n_n v_r \sigma_{cex} \Delta t \quad (6)$$

式中  $N_{cex}$  为网格中产生的电荷交换离子数目;  $N_i$  为网格中的主束流离子数目;  $n_n$  是网格中中性粒子密度;  $v_r$  为主束流离子与中性粒子的相对速度, 因为主束流离子速度远大于中性粒子速度, 因此, 本文采用主束流离子速度代替  $v_r$ ;  $\Delta t$  为时间步长;  $\sigma_{cex}$  为电荷交换碰撞截面, 其表达式为<sup>[7]</sup>

$$\sigma_{cex} = (a - b \ln v_r)^2 \times 10^{-20} \quad (7)$$

式中  $a$  和  $b$  均为常数, 其中  $a = -0.8821$ ,  $b = 15.1262$ . 式中  $v_r$  同样用主束流离子速度代替.

由于离子的存储采用单链表结构, 某个离子在链表中的位置将随时间改变. 要计算某网格中的电荷交换碰撞, 需要从链表中找到属于此网格的离子, 然后判断其是否发生碰撞. 当碰撞数达

到此网格中的电荷交换离子数目  $N_{cex}$  时, 进行下一个网格的碰撞计算. 当遍历一次链表电荷交换碰撞次数未达到  $N_{cex}$  时, 再次遍历链表, 直到电荷交换碰撞次数等于  $N_{cex}$ .

## 2 计算结果及分析

在每个时间步内, 由右边界出射的离子、撞击到栅极的离子之和与从左边界入射离子数目相等时, 计算域内的离子数目不再有明显的变化, 此时认为栅极系统达到了稳定工作状态.

不考虑电荷交换离子, 只施加栅极电压和栅极达到稳定工作状态时的电势分布对比如图 2 所示, 图中上半部分为仅施加栅极电压时的电势分布.

由图 2 可知, 栅极系统施加电压是决定计算域内的电势分布的主要因素. 同时, 离子的空间分布也对电势分布有着重要影响. 由于离子空间电荷的影响, 加速栅极上游的电势等值线整体向下游移动. 电势等值线形状也有相应的变化, 如屏栅极上游的电势等值线变为近似圆弧型. 在加速栅极下游, 没有离子时, 电势等值线近似垂直于上、下边界. 存在离子分布时, 电势等值线整体向上游移动的同时变为曲线, 等值线靠近栅极孔中心轴线位置处向上游弯曲, 这是因为栅极系统对离子的聚焦使得加速栅极下游栅极孔轴线附近聚集了大量带正电荷的离子, 相同轴向位置处径向距离小的地方比径向距离大的地方电势要高.

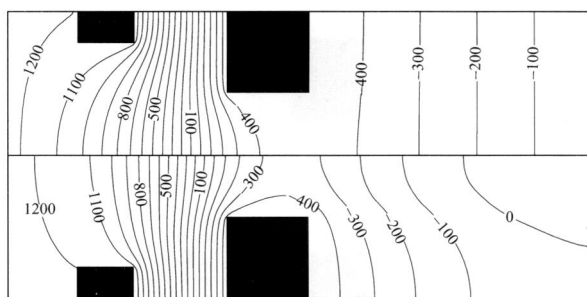


图 2 电势等值线比较(初始时刻和稳态)

Fig. 2 Comparison of the electric potential contours (at the beginning and steady state of the simulation)

图 3 给出了考虑和不考虑电荷交换离子时计算域内的电势分布图, 图中上半部分为不计算电荷交换碰撞时的工况. 由图可知, 电荷交换离子对计算域内的电场影响不是很大. 在加速栅极上游区域内, 电势分布基本没有变化, 在加速栅极下

游轴向位置较大的区域,因为在主束流内外均存在电荷交换离子,所以相同数值的电势等值线稍向前移动. 电荷交换离子的数目相对主束流离子较少是其对电势分布影响较小的主要原因.

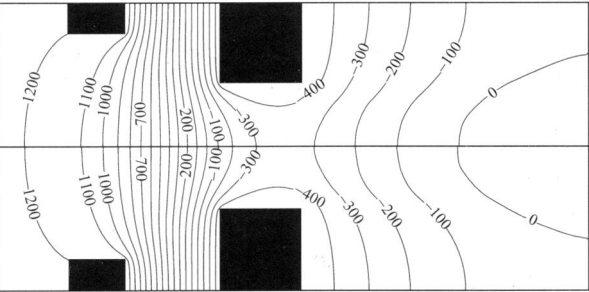


图 3 电势等值线比较(无 CEX 离子与有 CEX 离子)  
Fig. 3 Comparison of the electric potential contours (without and with CEX ions)

图 4 是图 3 对应工况下的离子空间分布图,由图 4 可以看到,由于栅极系统的聚焦效果,从屏栅极上游面开始到加速栅极下游面,主束流的半径逐渐减小. 在正常情况下,主束流半径在加速栅极孔附近小于加速栅极孔半径. 正是由于栅极系统这种聚焦作用,使得主束流边缘的离子比轴线附近的离子还要多. 虽然束流边缘处的离子数目比栅极孔轴线位置处要多,但是就离子数密度来说,因为靠近栅极孔轴线处的网格体积较小的缘故,束流边缘处的离子数密度并不一定会比栅极孔轴线处的离子数密度大.

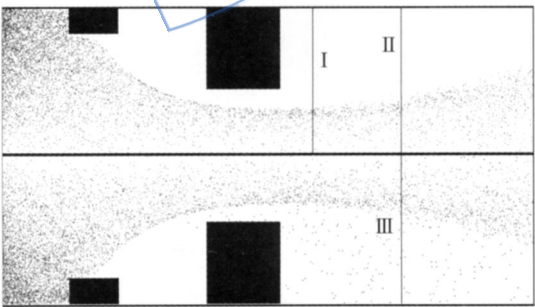


图 4 离子分布比较(无 CEX 离子与有 CEX 离子)  
Fig. 4 Comparison of the ion distribution (without and with CEX particles)

图 4 中所标示三条线段上离子数密度随径向位置的变化曲线如图 5 所示. 从图 5 中可以看出,栅极孔轴线上的离子数密度较离子束流边缘处的离子数密度要高,这也证实了前面的结论.

当程序中不考虑电荷交换碰撞时,在主束流边缘,离子数密度迅速降为 0. 结合图 3 可知,加速栅极下游电场对带正电荷的氙离子来说是减速场,所以随着与加速栅极距离的增大,主束流的半径逐渐增大,如图 5 中曲线 I 和曲线 II 所示. 当计算中考虑电荷交换碰撞时,主束流以外的位置存在电荷交换离子,如图 5 中的曲线 III 所示.

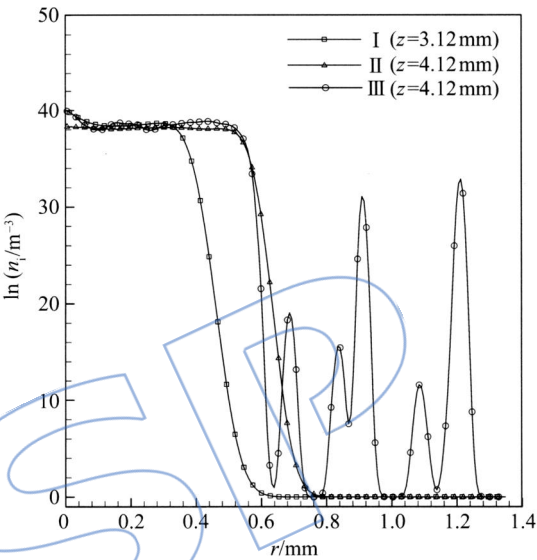


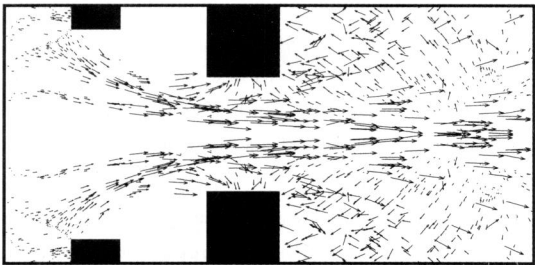
图 5 不同轴向位置处的离子数密度随径向距离的变化  
Fig. 5 Variation of the ion logarithmic density with radial position

电荷交换离子的运动轨迹取决于其初速度、产生位置以及电场的加速. 由于电荷交换离子的初速度相对较小,所以其轨迹主要取决于产生位置和电场加速. 模拟得到的电荷交换离子的分布及其速度矢量如图 6(a) 所示,不同位置处电荷交换离子的不同行为示意如图 6(b) 所示.

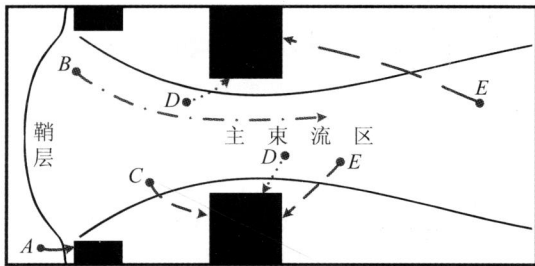
由图 6(a) 可知,在计算域内的主束流区域,都有可能产生电荷交换离子. 不同位置处产生的电荷交换离子,尽管其速度大小相差不大,但因受到的电场作用不一样,其对栅极系统造成的影响也不同. 如果电荷交换离子在电场作用下加速到很高的速度并撞击到栅极,会造成栅极的腐蚀,当栅极腐蚀到一定程度时会发生结构失效或电子回流,离子发动机将不能正常工作.

图 6(a) 中,屏栅极上游径向位置大于屏栅极孔半径位置处产生的电荷交换离子会直接撞击到屏栅极. 此位置处的电荷交换离子经历的电场强度较弱,在撞击屏栅极之前,其最大能量不会高于

$v_p$  个电子伏,因此不会对屏栅极造成明显危害. 其行为如图 6(b) 中的 A 线所示.



(a) 交换电荷离子分布及速度 (模拟结果)



(b) 交换电荷离子的不同行为 (示意图)

图 6 电荷交换离子分布及其行为特性

Fig.6 Distribution and the different behaviors characteristics of CEX ions

图 6(a) 中,屏栅极上游径向位置较小处产生的电荷交换离子,在电场的作用下最终加速喷出栅极孔. 这部分离子只是降低了发动机的推力和效率,对栅极系统并没有腐蚀作用. 其行为如图 6(b) 中的 B 线所示.

图 6(a) 中,屏栅极下游面到加速栅极上游面之间产生的电荷交换离子,在电场的作用下会离开主束流区域,一部分会撞击到加速栅极上游面,造成加速栅极上游面的腐蚀. 由于此处的电场强度较大,所以携带很高能量的电荷交换离子撞击到加速栅极,有可能使栅极材料成片脱落. 如果栅极材料为金属,则有可能造成栅极间的短路. 另一部分会撞击到加速栅极孔壁,使栅极孔逐渐增大,这种腐蚀称为孔扩大 (aperture enlargement) 腐蚀模式. 此部分电荷交换离子行为如图 6(b) 中的 C 线所示.

图 6(a) 中,加速栅极孔范围内的电荷交换离子在电场作用下,大部分将撞击到加速栅极孔壁,同样会使加速栅极孔径逐渐增大. 此部分电荷交换离子行为如图 6(b) 中的 D 线所示.

图 6(a) 中,加速栅极下游主束流内产生的电荷交换离子在电场的作用下,大部分最终撞击到

加速栅极下游面,其形成的腐蚀称为坑槽 (pits and grooves) 腐蚀. 从图 6(a) 可以看到,距离加速栅极下游面较近的电荷交换离子,其经历的电势变化较小,撞击加速栅极时能量较低,加速栅极的腐蚀也相应较小. 距离加速栅极较远处产生的电荷交换离子,其经历的电势变化较大,撞击到加速栅极时能量较高,加速栅极的腐蚀也相应较大. 此部分电荷交换离子行为如图 6(b) 中的 E 线所示.

在图 6(a) 中还可以看到,在靠近计算域右端边界主束流边缘处产生的电荷交换离子,其在电场作用下加速时会离开计算域的上、下边界. 因为本论文中设置上、下边界为镜像反射边界,所以这部分离子将会重新回到计算区域,并在电场作用下最终撞击加速栅极. 这些离子可看作是相邻栅极孔束流中产生的电荷交换离子,在电场作用下加速撞击到了模拟加速栅极上.

考虑电荷交换碰撞后不同电流比较如表 2 所示. 由表可知,模拟电荷交换离子后,屏栅极电流增大了 1.42%,说明电荷交换离子对屏栅极的贡献较主束流离子来说很小. 加速栅极电流从 0 变为了 0.0049 mA,相当于主束流电流的 1.41%,有很大的增长,相应地,主束流电流减小了 1.90%. 这说明电荷交换离子不但对栅极造成了撞击腐蚀,还使离子发动机的推力性能有所降低.

表 2 栅极系统电流参数对比

Table 2 Comparison of optical system electric currents

| 参数                | 不模拟 CEX 离子 | 模拟 CEX 离子 |
|-------------------|------------|-----------|
| 屏栅极电流 $I_s$ / mA  | 0.1342     | 0.1361    |
| 加速栅极电流 $I_a$ / mA | 0          | 0.0049    |
| 主束流电流 $I_b$ / mA  | 0.3534     | 0.3467    |

综上,尽管有撞击到屏栅极的电荷交换离子,但因为离子能量低,不会对屏栅极造成明显腐蚀. 加速栅极受到电荷交换离子的撞击腐蚀较严重,尤其是加速栅极下游面尤为严重,此结论和文献 [1] 中的模拟结果相同,这主要是由加速栅极下游较远处主束流中产生的电荷交换离子在电场作用下以较大的速度撞击栅极造成的. 电荷交换离子撞击加速栅极下游面会产生溅射离子,如果栅极材料为金属,这些溅射离子运动到航天器上,不仅使航天器携带正电荷,还将污染航天器上的科学

仪器等.

### 3 结 论

本文对离子发动机栅极系统的离子束流进行了模拟,着重研究了电荷交换离子对束流的影响,结果表明:程序较好地模拟了离子及电荷交换离子在栅极系统中的运动;相对主束流离子来说,交换电荷数目较少,其对计算域内的电势分布影响较小;电荷交换离子使加速栅极电流从0增大为主束流电流的1.41%,有较大的增加;电荷交换离子对屏栅极的影响较小,对加速栅极的撞击腐蚀较大,加速栅极下游面受电荷交换离子撞击腐蚀最为严重.

### 参考文献:

- [1] Peng X, Keefer D, Ruyten W M. Plasma particle simulation of electrostatic ion thruster [J]. Journal of Propulsion and Power, 1992, 8(2):361-366.
- [2] Birdsall C K, Landon A B. Plasma physics via computer simulation [M]. New York: McGraw-Hill, 1985: 11-13.
- [3] Oh D Y, Hasting D E, Marrese C M, et al. Modeling of stationary plasma thruster-100 thruster plumes and implications for satellite design[J]. Journal of Propulsion and Power, 1999, 15(2):345-357.
- [4] Okawa Y, Takegahara H. Particle simulation on ion beam extraction phenomena in an ion thruster[R]. IEPC-99-146.
- [5] 李定,陈银华,马锦秀,等. 等离子体物理学[M]. 北京:高等教育出版社,2006.  
LI Ding, CHEN Yinhua, MA Jinxiu, et al. Physics of plasma [M]. Beijing: Higher Education Press, 2006. (in Chinese).
- [6] 刘畅,汤海滨,顾佐,等. 单链表在离子发动机光学系统粒子模拟中的应用[J]. 强激光与粒子束,2006, 18(7): 1193-1198.  
LIU Chang, TANG Haibin, GU Zuo, et al. Particle simulation of ion thruster optical system using single linked list[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2006, 18(7):1193-1198. (in Chinese)
- [7] Rapp D, Francis W E. Charge exchange between gaseous ions and atoms [J]. J. Chemical Physics, 1962, 37(11): 2631-2635.