

4P053

密度汎関数法によるフラーレン多価カチオンを用いたイオンエンジンのモデル計算

(東北大院・理) ○池田 隼人, 中井 克典, 河野 裕彦

【序】

イオンエンジンは電気推進のひとつであり、荷電粒子が電場から受ける力を利用して推進するものである。電気推進は化学推進（固体・液体ロケット）に比べて比推力が非常に大きい。比推力の定義は（推力）/（推進剤流量・重力加速度）で与えられ、単位は秒である。一般に比推力が大きいと少ない量の推進剤で大きな速度変化を得ることができる。このような効率が良いエンジンは星間探索衛星等において必要不可欠であり、これまでも実際に人工衛星の姿勢制御に用いられてきた。また、小惑星イトカワの探査機はやぶさ（第 20 号科学衛星 MUSES-C）にも搭載され、長時間推進の実証も行われた[1]。

しかしながら、イオンエンジンは比推力の面では優れているが、単位時間に得られる推力が小さいという欠点を持っている。したがって推力を大きくするための方法や条件について知見を得ることは、イオンエンジンの高性能化にとって非常に重要である。この推力を大きくする方法は一つに推進剤（一般に単体原子）を加速するグリッド間の電場を強くする方法、もう一つは推進剤の電荷を上げる方法が考えられる。また、推進剤を効率よくイオン化することもイオンエンジンの高性能化に対して重要である。

フラーレンのイオン化エネルギーは、現在実用化されている Xe よりも低く、多価カチオンにもしやすいという特徴がある。そのため、イオンエンジンの推進剤として提案された[2]。また、フラーレンは多価カチオンになっても比較的安定に存在できる[3]。さらに、Xe よりも安価に大量入手が可能であることも、推進剤が宇宙空間に捨てられるということを考えれば重要な点である。高効率のイオン化の方法として、ECR（電子シンクロトロン共鳴）が用いられているが[1]、フラーレンに対する知見は得られていない。加えて推進剤が Xe の時には起こりえなかった「分子が分解する」という問題も存在する。そこで、ECR によって生成したフラーレン多価カチオンが静電場中で安定に存在する時間に関する知見を得る必要がある。

本研究では、古典力学計算によって比推力と推力について考察した。また古典力学計算で求めた条件下において、ECR で作られたフラーレン多価カチオンが安定に存在できる時間についての知見を第一原理分子動力学計算により求めた。

【古典力学計算】

推進剤分子（フラーレン、Xe）を質量 m の質点と仮定した。加速グリッド間の電位差は ΔV 、グリッド間の距離を Δl 、推進剤分子の電荷を Z 、重力加速度を g として推力 T と比推力 I_{sp} を求めた。

電気推進によって得られる推力は、電場から受ける力と大きさが同じなので、

$$T = \frac{Ze\Delta V}{\Delta l}$$

となる。これは、推進剤分子（原子）1個あたりの推力は推進剤の分子量には依存しないことを示している。また、ロケットの加速度はロケット本体の質量と推力に依存することから推進剤の分子量が直接推力に影響しないことがわかる。加速度を上げるための方法として、ロケット本体の軽量化、推進剤の積載量を減らす方法が考えられる。推進剤の積載量は比推力を上げることにより減らすことが可能である。

また、比推力 I_{sp} は

$$I_{sp} = \sqrt{\frac{2Ze\Delta V}{mg^2}}$$

となる。この式が示すことは、比推力は推進剤の質量と電荷に依存するということである。

以上の手続きから得られた I_{sp} の C_{20} 、 C_{60} の値を上図に示した。ここでは、 $\Delta V = 1.0 \times 10^3$ V、 $\Delta l = 1.0 \times 10^{-3}$ m とした。これらは一般のイオンエンジンで使われている条件である。推進剤が C_{60} の場合は、6価以上の時に Xe^+ より比推力が大きくなる。また、 C_{20} の場合は2価以上で Xe^+ よりも比推力が大きくなる。

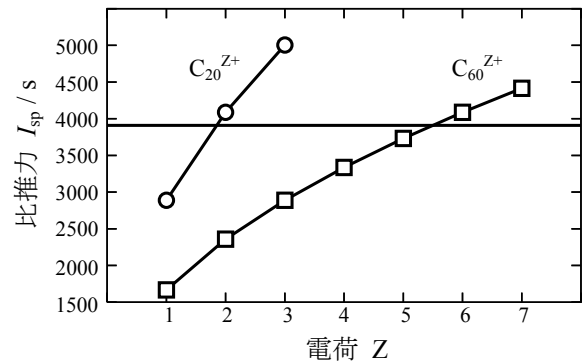


図) 推進剤が C_{20} と C_{60} の時の電荷に対する比推力を表した。○は C_{20} 、□は C_{60} のものである。 $I_{sp} = 3900$ 付近のラインは Xe^+ の比推力である。

【第一原理分子動力学計算】

ECR によってできた C_{20} や C_{60} カチオンの外部静電場中での安定性についての知見を得るために、密度汎関数法を用いた第一原理分子動力学計算を行った。密度汎関数法の計算は ADF (Amsterdam Density Functional) プログラムパッケージを用いて行った。これにより energy gradient を求め、速度ベレ法から運動方程式を解くことにより核の時間発展と運動エネルギーを求めた。energy gradient は BLYP/DZP(Large Core)のレベルで求めた。

イオンが分解するまでの時間を見積もるために、まず外部電場を 1.0×10^{10} V/m に設定し、イオンが解離するまでの時間を調べた。さらに、外部電場の強度を順次減少させ、実際に利用される電場強度での安定性についての知見を得た。

References

- [1] H. Kuninaka *et al.*, *AIAA* 2006-4318.
- [2] C.A. Scharlemann. *Acta Astron.* **51** (2002), p. 865.
- [3] R. Sahnoun *et al.*, *J. Chem. Phys.* **125** (2006) 184306