

博士論文

A dissertation

ホールスラスタ地上試験で推進機に逆流する
中性粒子の抑制技術に関する研究

A study of suppression method of neutral particles
flowing back to the thruster in Hall thruster ground test

伊藤 彦

Ito Gen

目次

目次	1
図目次	4
表目次	7
記号一覧.....	8
第 1 章 序論.....	11
1.1 ホールスラスタ概略.....	11
1.2 ホールスラスタ地上試験要求.....	13
1.2.1 設備との電気的結合による効果.....	15
1.2.2 背圧効果.....	16
1.3 設備内粒子流れに関する先行研究.....	17
1.4 ビームターゲットに関する先行研究.....	19
1.5 エネルギー粒子の固体表面反射に関する先行研究.....	20
1.6 研究目的	22
第 2 章 モデル化と計算手法.....	25
2.1 流れの分類	25
2.1.1 ボルツマン方程式の確率解法.....	26
2.1.2 速度分布関数.....	27
2.1.3 ボルツマン方程式.....	27
2.1.4 マクスウェル分布.....	28
2.1.5 分離の原理.....	29
2.1.6 最大衝突数法.....	30
2.2 壁面反射モデル.....	31
2.2.1 マクスウェルモデル.....	32
2.2.2 CLL モデル.....	32
2.2.3 拡張 CLL モデル.....	33

2.3	適応係数	34
2.4	分子動力学	35
2.5	ポテンシャルモデル.....	37
第3章 Xe イオンの金属ビームターゲット表面反射特性評価		39
3.1	分子動力学計算モデル.....	39
3.2	表面欠損と照射フラックス.....	41
3.3	Xe イオンの金属ターゲット表面での反射分布評価	44
3.4	拡張 CLL モデルによる再現.....	46
3.5	表面粗さのモデル化.....	52
3.6	まとめ	55
第4章 クライオポンプのポンプ係数の粒子流入角度依存性評価 .56		
4.1	クライオポンプ内粒子軌道解析モデル.....	56
4.2	ポンプ係数の流入角度依存性.....	59
4.3	ポンプ係数の検証.....	61
4.3.1	チャンバ圧力分布計測実験系.....	61
4.3.2	チャンバ内圧力分布数値解析モデル.....	64
4.3.3	圧力較正.....	65
4.3.4	圧力分布計測値と計算値の比較.....	66
4.4	クライオポンプへ直接向かう流れのポンプ係数.....	68
4.5	まとめ	70
第5章 円錐型ビームターゲットによる逆流粒子抑制効果		71
5.1	ホールスラストプルーフモデル.....	71
5.2	ビームターゲット設計指針.....	74
5.2.1	ビームターゲットとホールスラストの距離.....	74
5.2.2	円錐型ビームターゲット頂角.....	76
5.2.3	クライオポンプ位置と面積.....	78
5.3	モデルケースによる逆流粒子抑制効果検証.....	82
5.3.1	2D3V-DSMC 計算モデル	82
5.3.2	逆流粒子の抑制効果推定.....	86
5.4	まとめ	90
第6章 結論.....		91

謝辞	93
参考文献.....	94

目次

Figure 1.1. Schematic of a Hall thruster operation (not to scale).....	12
Figure 1.2. Schematic of physics of ingestion particle generation in Hall thruster ground test. .24	
Figure 2.1. Flow chart of DSMC	27
Figure 3.1. Schematics, created through the Open Visualization Tool (OVITO)[98]......	41
Figure 3.2. Minimum unit of {111} plane of Al target.	42
Figure 3.3. Polar probability density distribution of reflected xenon at 300 eV incidence. The incident angle $\theta_{in} = -45^\circ$	42
Figure 3.4. Sputtering yield vs number of samples. The 100 samples correspond to the fluence of $0.04 \text{ atom}/\text{\AA}^2$	44
Figure 3.5. History of Al target during subsequent sputtering of 300 eV $\text{Xe}^+ \rightarrow \text{Al}$ normal incidence.	44
Figure 3.6. Polar probability density distribution of reflected xenon at 300 eV incidence. (a) Al target and (b) Ti target. The normal incident case corresponds to $\theta_{in} = 0^\circ$. The color of each plot represents the total energy carried by the reflected particles for each θ_{in} and is normalized by the total energy of the incident particles.	45
Figure 3.7. Two types of reflection trajectories. (a) Wide-angle incident case and (b) narrow-angle incident case. The color bar shows the projectile velocity normalized by initial velocity at 300 eV. The Al target atoms were thermally fluctuating at 300 K.	46
Figure 3.8. Comparison between the MD simulation (circle) and extended CLL model (dashed line) in the polar probability distribution obtained for an Al target with a normal incident. The cosine distribution of the diffusion reflection is also shown as a reference.	47
Figure 3.9. Kinetic energy distributions from MD simulation (box) and extended CLL model (dashed line) in the case of Al target with normal incident.	47
Figure 3.10. Contour plot of probability distribution of reflected xenon for 300 eV Xe irradiation of Al. Xe was irradiated from the left-hand side of the circle.	50
Figure 3.11. Contour plot of probability distribution of reflected xenon for 300 eV Xe irradiation of Ti. Xe was irradiated from the left-hand side of the circle.	51
Figure 3.12. Comparison between simulated and experimental sputter yields on Al and Ti targets. MD simulation with normal incidence (open circle), MD simulation with $0^\circ\text{--}30^\circ$ incidence (closed circle), experiment (square)[102][103] and Yamamura's semi-empirical model (line).	53

Figure 3.13. Polar probability density distribution of reflected xenon at 300 eV incidence calculated by extended CLL model. The surface angle is given a random variation in the range of ± 30 . The color of each plot represents the total energy carried by the reflected particles for each θ_{in} and is normalized by the total energy of the incident particles.	54
Figure 4.1. Cross-sectional image of two-stage cylindrical cryopump.....	57
Figure 4.2. 3D simulation model of the axisymmetric two-stage cylindrical cryopump.....	58
Figure 4.3. Calculated inflow-angle dependent pump sticking coefficients $\epsilon(\theta)$ for a cryopump without a duct and with a duct. The length of the duct is r_p	60
Figure 4.4. Calculated total capture coefficient with different duct length.....	60
Figure 4.5. Schematic of pressure distribution measurements in the $\phi 2.0 \text{ m} \times 3.0 \text{ m}$ vacuum chamber with two cryopumps.....	62
Figure 4.6. Picture of an ion gauge installed on 2-axis motion stage inside a vacuum chamber.....	63
Figure 4.7. Simulation model of the $\phi 2.0 \text{ m} \times 3.0 \text{ m}$ vacuum chamber with two cryopumps.....	65
Figure 4.8. Pressure distribution along the axis 0.1 m radially from the center axis with different ϵ_{total}	67
Figure 4.9. Residuals between the calculated average pressure and measured pressure.	68
Figure 4.10. Simulation model of the $\phi 2.0 \text{ m} \times 3.0 \text{ m}$ vacuum chamber with different input flow directions.....	69
Figure 5.1. Hemisphere covering the plume from a point source.....	73
Figure 5.2. Angular distribution of circumferentially integrated ion current. SPT-100 data is the visually read values from the paper by Mitrofanova[107].	73
Figure 5.3. Proportion of ion current vs divergence angle. SPT-100 data is the visually read values from the paper by Mitrofanova[107]	74
Figure 5.4. Proportion of mass flow reaching to target as function of target aspect ratio. The target aspect ratio is the ratio of target diameter to distance from a thruster to target end..	76
Figure 5.5. Schematic of beam peak angle θ_{peak} , target cone angle θ_{cone} , inflow angle to pump θ_{inp} , in Hall thruster ground test.	78
Figure 5.6. Probability distribution of Xe particle flow reaching to wall from beam target. The axial position from beam target end is normalized by beam target diameter.	80
Figure 5.7. Power density carried by particles from target to wall (left) and particle energy distribution (right).	82
Figure 5.8. The schematic of 2D3V-DSMC simulation model. Three different beam targets are compared, conical Al target (case 1), flat Al target (case 2), and concave Ti target (case 3).	85

Figure 5.9. Backflow flux vectors from the beam target during Hall thruster operation. Three different beam targets are compared, conical Al target (case 1), flat Al target (case 2), and concave Ti target (case 3). Length of the arrows and colors stand for the magnitude of flux normalized by maximum of the three cases.88

表目次

Table 1.1. Typical ground test facilities for Hall thruster, working all over the world.	14
Table 1.2. Typical beam targets for Hall thruster ground test facilities.....	20
Table 2.1. Flow properties and numerical method treated in this study.....	26
Table 3.1. Three parameters obtained in the case of Al target with respect to the incident angle.	48
Table 3.2. Three parameters obtained in the case of a Ti target with respect to the incident angle. In the case of 60° , the kinetic energy distribution shows a broad distribution, so the fitting was conducted using the total energy of the reflected particles as an indicator rather than the peak.	49
Table 4.1. Capture coefficients for different duct lengths.	61
Table 4.2. Specification of the mass flow controller.	64
Table 5.1. Proportion of directly pumped mass flow rate to input mass flow rate. Here, $\eta_u = 0.9$, $\eta_{ta} = 0.7$, and $s_p = 1$	80
Table 5.2. Calculated ingestion mass flow rate and bulk pressure in the case of $s_p = 0.19$. Input mass flow rate is 2 mg/s.....	89
Table 5.3. Calculated ingestion mass flow rate and bulk pressure in the case of $s_p = 1.0$. Input mass flow rate is 2 mg/s.....	89

記号一覧

A, B	=	parameters for screening function
a	=	screening length
C	=	constant for Pseudo-Voigt function
d	=	diameter
E	=	energy
E^{BCA}	=	minimum energy for Binary-Collision Approximation
F	=	force
$f(v)$	=	velocity distribution function
$G(g)$	=	probability distribution function of relative speed
g	=	relative speed
I	=	ion current
I_0	=	modified Bessel functions of first kind
J	=	circumferentially integrated ion current density
J	=	ion current density
Kn	=	Knudsen number
k_B	=	Boltzmann constant
L	=	length
M	=	atomic weight
\bar{M}	=	collision number
m	=	atomic mass
m_u	=	wight of Pseudo-Voigt function
\dot{m}	=	mass flow rate
N	=	number of particles
n	=	number density
P	=	pressure
p	=	momentum
Q	=	volumetric flow rate
q	=	electric charge
q_{heat}	=	heat flux
R	=	gas constant
r	=	radius

S	=	surface area
S_{res}	=	residual standard deviation
S_{se}	=	sensitivity factor
S_M	=	pumping speed
s	=	surface area ratio
T	=	temperature
u	=	flow velocity
$V(x)$	=	Pseudo-Voigt function
V	=	speed
v	=	velocity
Z	=	nuclear charge
α	=	accommodation coefficient
α_t	=	tangential momentum accommodation coefficient
α_n	=	normal energy accommodation coefficient
β	=	temperature coefficient
Γ	=	flux density
ε	=	pump capture coefficient
ε_{total}	=	total pump capture coefficient
ε_{rad}	=	emissivity
η	=	efficiency
η_u	=	propellant utilization efficiency
θ	=	angle
λ	=	mean free path
ξ	=	scattering kernel
ρ	=	charge density
σ	=	collision cross section
σ_{SB}	=	Stefan–Boltzmann constant
σ_V	=	variance of Pseudo-Voigt function
ϕ	=	potential function
χ	=	speed distribution function
ω	=	viscosity index

Subscripts

c	=	chamber
diff	=	diffusive

<i>i, j</i>	=	index
in	=	incident
ing	=	ingestion
mp	=	most probable
n	=	normal
p	=	pump
r	=	reference
ref	=	reflection
rms	=	root mean square
sp	=	specular
t	=	tangential
ta	=	target
VHS	=	Variable Hard Sphere
w	=	wall

Superscripts

EAM	=	Embedded Atom Method
ZBL	=	Ziegler-Biersack-Littmark

第1章 序論

1.1 ホールスラスタ概略

人工衛星の軌道制御には推進系が必要不可欠であり、衛星の発電電力の増加などの背景から電気推進機が今注目を浴びている。電気推進とは、電気エネルギーを推進剤に与えることで反力を得る推進機であり、従来の化学反応を利用したロケット推進と違って静電力や電磁力を利用できる。このため比推力（推進剤流量あたりの推力）を一桁以上大きくすることが可能であり、大幅な推進剤の低減が望め、衛星の小型化の促進や大型衛星の高効率化が期待できる。その中でもホールスラスタは、比推力が 1500~2000 秒程度で推進効率が 55%前後、電力当たり発生可能な推力は 50~60 mN/kW ほどの性能を持ちイオンスラスタに比べて電力当たり発生可能な推力が大きく、軌道遷移の短時間化や軌道間物資輸送ミッションに適した推進機といえる。全電化静止衛星（姿勢制御維持に従来の小型化学ロケットエンジンを使わず、すべて電気推進エンジンで行う衛星）では 5 kW、小惑星捕獲ミッションでは 10 kW、太陽発電衛星建造物資輸送では 25 kW、有人火星探査では 50 kW クラスのホールスラスタの活用が想定されており、大型ホールスラスタの世界的な機運が高まっている。

ホールスラスタの構造と作動原理について簡単に説明する。ホールスラスタはイオンを加速する環状のチャンネルを有しており、そのチャンネル内に軸方向の電界と半径方向の磁場が印加されている (Figure 1.1)。加速チャンネルの長さをイオンのサイクロトロン半径よりも短く同時に電子のサイクロトロン半径よりも長くなるように設計することで、イオンは磁場にとらわれずに電場によって軸方向に加速され、電子は磁場に捕捉されて軸方向の電界と半径方向の磁場の作用により周方向に $E \times B$ ドリフト運動を行う。電子のドリフトによって生じる円周方向の電流はホール電流と呼ばれ、ホールスラスタの名前の由来となっている。ホール電流と磁場との相互作用によって生じるローレンツ力により軸方向への電子の流れが妨げられ、加速チャンネルの内部に強い電場が維持されることが考えることができる。このローレンツ力の反作用は、ホール電流がホールスラスタの中心軸上に作る軸方向の磁場とホールスラスタがもつ軸方向の磁場との反発力という形でホールスラスタに伝達される。実際には電子は、ホール電流となって放電室内部に閉じ込められたままではなく、推進剤との衝突による拡散によって、徐々に上流へと移動していき、最終的にアノード（陽極）へと流れ着くことになる。電離加速領域に常に電子が存在するため、推進機内部においてはほとんどの領域において準中性が保たれる。そのため、空間電荷制限則を受けずに、高い電流密度（推力密度）を維持することが可能となる。この点がプラズマの生成と加速を

分離するために空間電荷制限則を受けてしまうイオンエンジンとは大きく異なる。ホールスラスタは通常電子源のカソード（陰極）を有し、ここから供給される電子は一部がホールスラスタから抽出されたイオンビームの中和に使われ、残りの電子は加速チャンネル内を陽極に向かって拡散する。この電子の拡散によって加速チャンネル内は電子には電子が常に供給され中性粒子との衝突によってプラズマを生成すると同時にプラズマが電氣的に準中性に保たれる。

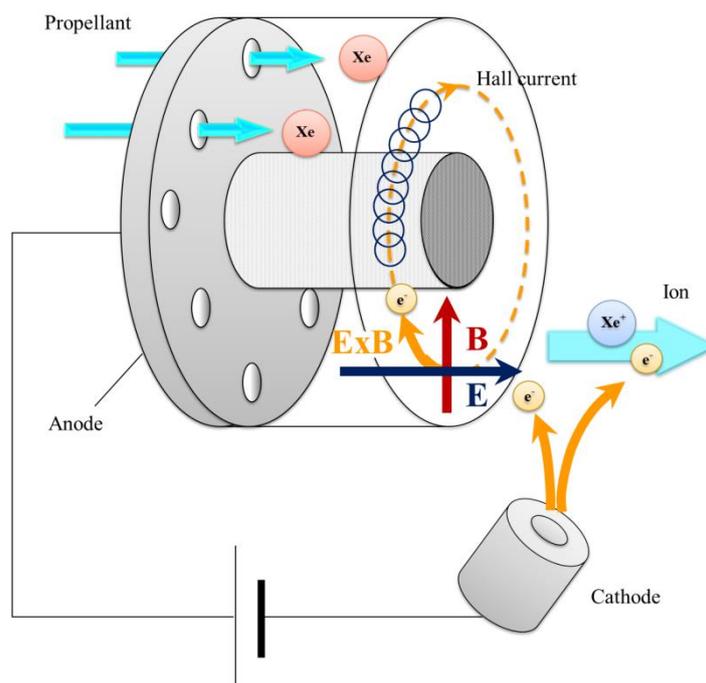


Figure 1.1. Schematic of a Hall thruster operation (not to scale).

加速チャンネルとアノードの構造からホールスラスタは大きくマグネティックレイヤ型とアノードレイヤ型の 2 種類に分類することができる。マグネティックレイヤ型は加速チャンネル長さが加速チャンネル幅よりも長く、チャンネル壁はセラミックで絶縁されている。一方、アノードレイヤ型はチャンネル長さがチャンネル幅よりも短い。チャンネル壁は導電体で出来ており、陰極電位に保たれている。生成されるプラズマの観点では電子温度に違いが表れるとされている。マグネティックレイヤ型では壁面へイオンと高エネルギーの電子が衝突し、低エネルギーの二次電子が放出され、プラズマ中の電子温度は適度に低くなる。アノードレイヤ型では、陰極電位のチャンネル壁が電子のエネルギーを保存し、電子温度を高く保つ。このエネルギー保存の観点から、マグネティックレイヤ型よりアノードレイヤ型が高性能を達成できるとされている。しかし、安定な作動範囲が狭いという欠点があり、宇宙での作動実績はマグネティックレイヤ型が大多数を占め、商用としてもマグネティックレイヤ

型が主流となっている[1].

近年，日本では様々な高出力ホールスラスタの開発が進められている．宇宙航空研究開発機構（Japan Aerospace Exploration Agency, JAXA）と IHI, IHI エアロスペース，首都大学東京は全電化衛星で姿勢制御と軌道遷移の両方に対応したマグネティックレイヤ型 2~6 kW 級ホールスラスタの開発を実施しており，2022 年打ち上げ予定の技術実証衛星 9 号機（ETS-9）で実証が予定されている．また，東京大学，九州大学などの研究機関を中心に進められている Japanese IN-space propulsion system (RAIJIN) project ではアノードレイヤ型について，5 kW 級の RAIJIN94 と 2 kW 級の RAIJIN66 を試作，試験している．それぞれの開発状況は参考文献[2]–[5]および[6]–[8]を参照されたい．

1.2 ホールスラスタ地上試験要求

ホールスラスタの開発では宇宙環境を地上で模擬した試験設備が必要不可欠である．地上試験設備は一般に，円筒形状の金属製タンク（チャンバ），粗引き用のポンプ，推進剤排気用のメインポンプ，メインポンプを保護するためのビームダンパーまたはビームターゲットの組み合わせで構成される．ホールスラスタの推進剤にはキセノンが用いられることが多く，推進剤排気用のポンプとしては，クライオポンプが良く用いられる．クライオポンプとは，チャンバ内に極低温面を設置し，これに容器内の気体分子を凝縮または吸着させて捕捉し，排気するポンプである．ホールスラスタから排出されたイオンがクライオポンプに直接あたると，エネルギーがクライオポンプに伝わって温度が上昇し，排気能力が低下する．そのため，設備にはクライオポンプを保護するためのシールドやビームのエネルギーをダンプするためのビームターゲットが設置される．

Table 1.1 に各国のホールスラスタ地上試験に用いられている設備の寸法と排気速度の関係を示す．チャンバは一般に円筒の容器であるが，アスペクト比は設備によって異なり規則性がみられない．排気速度はチャンバ表面積，体積，半径と相関が大きい．電気推進試験設備に用いられているクライオポンプは排気量が極低温パネルの表面積に依存するため，大きな排気速度を得るためには大きなチャンバ表面積が必要になり，自然とチャンバも大きくなる．チャンバの大きさがホールスラスタと比べて十分に大きく，また排気速度が大きいほど，宇宙環境をよく模擬できる．しかしながら，実際には有限のサイズ，排気速度の下で試験設備を設計，運用する必要があり，試験設備のスペックが十分かどうかは試験目的に応じて判断する必要がある．

Table 1.1. Typical ground test facilities for Hall thruster, working all over the world.

Name	Diameter, m	Length, m	Aspect ratio (D/L)	Volume, m ³	Surface area, m ²	Pumping speed (xenon), kl/s
USA						
LVTF (Univ. Michigan)[9]	6	9	0.67	254.5	197.9	240
VTF-2[10]	4.9	9.2	0.53	173.5	160.5	350
EP2[11]	2.4	9.8	0.24	44.3	78.4	250
VF-5[12]	4.6	19	0.24	315.8	291.2	320
JPL Owen[13]	3	8.6	0.35	60.8	88.1	170
ITALY						
IV-10[14]	6	10	0.60	282.7	216.8	610
LVTF (Aerospazio)[15]	3.8	11.5	0.33	130.4	160.0	200
LVTF-2 (Aerospazio)[16]	3.8	12.5	0.30	141.8	160.6	180
CHINA						
PES[17]	5.2	12.6	0.41	267.6	248.3	96.4
JAPAN						
IHI space chamber	2	3	0.67	9.4	25.1	24
UT space chamber	2	3	0.67	9.4	25.1	21
Ion thruster endurance test facility[2]	2	5	0.40	15.7	34.6	110
HTDT[18]	3	8	0.38	56.5	82.5	220

ホールスラスタの地上試験は大きく寿命試験、プルーム計測試験、性能試験に分けられ、それぞれ設備に要求される能力が異なる。寿命試験では高い真空度要求の他、チャンバからのバックスパッタリングがホールスラスタのチャンネル損耗計測を不確実にするため、バックスパッタレートを低減させる工夫が必要である。またホールスラスタから受ける熱負荷に耐える熱設計も必要となり、設備に対する要求としては最も厳しい。プルーム試験では設備内に残存する中性ガスとプルームイオンとの電荷交換(Charge Exchange; CEX)がプルーム発散角の計測に影響を与えるため、性能試験よりも高い真空度要求がある。また、プ

プルーム計測試験ではプローブを用いた接触法による計測が一般的であり、プラズマ生成部に影響を与えないためのプローブ掃引半径が規定されている[19]。この半径を満足する径を持つ試験設備でなければいけない。性能試験では、チャンバ内に残存する粒子が推進機に逆流して推進剤として再利用される現象 (Ingestion) と、チャンバ壁面とホールスラストが生成するプラズマとの電氣的な結合による electrical facility effect の2つの効果によって性能が変化することが知られている。チャンバ内の残存ガスが引き起こす CEX, Ingestion といった作用は背圧効果と呼ばれている。電気推進コミュニティでは背圧効果の観点から試験における真空度の基準を定めようとする動きがある。現在、性能試験、プルーム計測試験においては、経験的に求められた真空度基準[20]を満足させることが共通の要求となっている。しかしながら、背圧効果は真空度ではなくチャンバ内の希薄な残存粒子の流れに依存しているという主張があり、真空度ではなくチャンバ内の粒子流れを評価する必要性が議論されている[10]。

1.2.1 設備との電氣的結合による効果

ホールスラストから噴射されたプラズマプルームは準中性のプラズマとして遠方に広がっていく。障害物のない宇宙では、イオンはと電子はプラズマ中で衝突して再結合するか、太陽風のプラズマと相互作用をすることで中性粒子となる。一方、地上試験では有限の距離にチャンバ壁が存在し、プルーム中のイオンと電子は再結合する前にチャンバ壁面で衝突して中性粒子化する。再結合サイトとなったチャンバ壁はホールスラストの電気回路にプラズマプルームを介して接続されることになり、プルーム中の電子の経路を変える働きをする。チャンバ壁と電気回路の宇宙での太陽風プラズマとの相互作用を模擬する環境にはチャンバ壁と 10 km 以上の距離が必要である[21]。10 km 級のチャンバの製造、運転は非常に困難なため、地上試験で設備との電氣的結合による効果を単純に設備の拡張によって取り除くことは困難であり、影響を低減するための手法、および現象把握のための研究が進められている。チャンバ壁を模擬したプレートをチャンバ内に設置し、その電位を変えることでプレートに流れる電流が制御できることが示唆されている[22]。また異なる推進剤 (Xe と Kr) を用いた場合にも、プレートの電位を変えてプレートに流れる電流を観測した結果、その傾向に際は無いことが示されている[23]。さらに電氣的結合によって生じるによってまたカソードと壁面との位置関係によっても効果が異なることが明らかになっている[24]。これらの研究から、カソードの位置、プルームのイオン電流密度分布が地上試験設備とプラズマの電氣的結合を決定づけていることが示唆されており、推進性能には影響を与えないという見解もあるが、ホールスラストのプルーム分布は個々のホールスラストの構造や作動条件に大きく依存することから、地上試験設備とプラズマの電氣的結合が性能に与える影響は個別に調査することが望ましいとされている[25], [26]。

1.2.2 背圧効果

背圧効果はチャンバ内に残存する粒子によって引き起こされる効果の総称であり、上述の電荷交換衝突によるものと **Ingestion** によるものに分けられる。電荷交換衝突とは、高速のイオンが低速の中性ガスと電荷のみを交換することにより、低速のイオンと高速の中性粒子になる現象である。ファラデープローブを用いたホールスラストのプルーム広がり の計測において、背景圧力の上昇とともにプルーム発散角 30 度以上の広角に広がるイオンが 増加することが知られている[27].

もう一方の **Ingestion** は、残存粒子がホールスラストに逆流して再度イオン化される現象 である。チャンバ内の圧力増加に伴ってホールスラストの放電電流、推力が増加するとい う実験的事実から、**Ingestion** の概念が提唱された。初期の研究では、試験設備内の残留ガス が室温の試験設備壁と完全に熱平衡であると想定した場合（熱化モデル）に見積もった逆 流ガス流量で説明ができると報告されている[28]。この熱化モデルでは、チャンバ内の残存 ガスはチャンバ壁面温度 T_w で自由運動していると考え、プラズマを生成するホールスラ スタ放電室の円環断面に流入する粒子束 Γ によって逆流粒子の流量が与えられる。平均速度 v で自由運動する粒子がある断面を通過する際の粒子束 Γ は数密度 n を用いて

$$\Gamma = \frac{1}{4}n\bar{v} = \frac{1}{4}n\sqrt{\frac{8k_B T_w}{\pi m}}, \quad (1.1)$$

で与えられる。ここで圧力 $P = nk_B\Gamma$ の関係を用いると、上式は

$$\Gamma = \frac{P}{\sqrt{2\pi m k_B T_w}}, \quad (1.2)$$

また逆流粒子 (**Ingestion**) 流量 \dot{m}_{ing} は

$$\dot{m}_{\text{ing}} = \Gamma m S_{\text{th}} = \frac{m^{1/2} S_{\text{th}} P}{\sqrt{2\pi k_B T_w}}, \quad (1.3)$$

と圧力の関数となる。ここで S_{th} はホールスラストの逆流粒子取込み面積である。よって逆 流粒子流量を減少させるにはチャンバ内のホールスラスト近傍の圧力を低下させることが 重要である。

その後の多くのホールスラストの性能試験において、圧力ごとの推進性能が評価されて いる。それらの試験結果の中には、熱化モデルでの逆流粒子流量から計算される性能変化 は観測された性能変化の 10%しか説明できないものもあり、熱化モデルで計算されるより も多くの逆流粒子が存在していることが示唆された[29]–[34]。これらの実験的事実から、真 の推進性能を正しく評価するための方法が研究されてきた。試験中の圧力計の向きや設備 の構成によって計測圧力が異なり、それが熱化モデルにおける予測の誤差要因になること が後の研究で明らかとなった。これを受けて、圧力計測の基準を規定してそのばらつきを 低減し、グローバルな評価方法を制定する動きがある[35]。また、ホールスラストの放電室

外側すぐのニアフィールド領域において、電子温度が中性粒子をイオン化するのにまだ十分に高く逆流粒子の再イオン化と加速がその領域でも起きているという仮定を置いた拡張熱化モデルが実験結果をよく再現するという報告がある[27]。この手法では式(1.3)の放電室出口面積より大きなプルーム内の基準面を横切って取り込まれた逆流粒子が、ホールスラストのガス分配器を通過して放電室内に共有された中性粒子と同様にイオン化されて加速されるという仮定に依存している。しかしこの仮定は議論的になっており、一般的な手法として定着しているものではない。これらのアプローチはどれも性能の圧力依存性を実験的に取得することを前提としている。試験中の圧力を変更するには追加ガスを流入するかポンプの稼働台数を変更する必要がある、試験コストがかかる。そこで試験によって性能の圧力依存性を取得することなく、背圧効果をモデル化して予測する技術が研究された。これらの研究については 1.3 節で述べる。

1.3 設備内粒子流れに関する先行研究

熱化モデルでは、残存する中性粒子の運動はすべて等方的であり、単に熱速度成分のみを持つ静的なガス場とみなすことができると仮定している。しかし、ホールスラストの試験設備内部のガスの流れに関するこれまでの研究から、チャンバ内には熱速度以上の速度を持つ背景粒子の流れが存在することが示唆されている[36]。この背景粒子の流れの存在は、チャンバ内で真空計の向きを変えた場合に計測される圧力の値が変化する観測結果からも支持されている[37]。Cai らはこのチャンバ内の流れをホールスラストの軸方向 1 次元でモデル化し、ポンプの配置が大きな影響を与えることを明らかにした[38]。彼らの 1 次元モデルでは円筒形のチャンバを軸方向にいくつかのセクションに分割し、質量保存を解く。これによりホールスラストに逆流する中性粒子のフラックスが計算できる。

このモデルには、マクロスコピックな流れ場として 3 つの、また個々の粒子の運動に対して 2 つの仮定を置いている。流れ場としての第一の仮定として、モデル化するチャンバ内流れは自由分子流とみなす。一般にチャンバ内のクヌーセン数をチャンバ内の静圧とポンプの長さから算出した場合、クヌーセン数は 1 より大きいため、この仮定を用いるのは妥当と考えられている。第二に、流れ場の粒子の運動は軸方向のみと仮定する。第三に、粒子の運動は熱平衡にあると仮定する。この仮定により、算出される逆流粒子流量は定常状態の値となるが、比較対象となる実験データは秒あるいは分単位の分解能で計測された性能のため、実験データとの比較においてこの仮定を置くことに問題はない。次に個々の粒子の運動に対する仮定について、第一の仮定は粒子の境界での反射に関するものである。ここでは粒子はチャンバ壁面で完全に熱適応し、かつ鏡面反射方向に反射されるとみなす。反射方向は拡散的であっても鏡面的であっても、モデルに大きな影響を与えないことが検証されている。第二に、ホールスラストから噴射された粒子はすべてチャンバ下流壁まで

無衝突で到達すると仮定する. この仮定は次の2つの実験的事実によって支持されている. 1つ目は, ホールスラストによって加速された粒子の速度は背景の中性粒子と比べて2桁程度速度が大きい, という観測結果である. このため, イオンと中性粒子の衝突断面積が小さく粒子間衝突が無視できる[39]. 2つ目は, イオン電流がチャンバ壁を介して流れているという観測結果である. この観測結果は, ホールスラストから噴射されたイオンは再結合前に壁に到達していることを示している[22]. この無衝突の仮定により, このモデルにおける中性粒子の発生源はチャンバ下流壁とみなす.

ここで, 上記の仮定に基づいてチャンバ内の粒子の往復運動で生じる流量の解析解を考える. チャンバ内に流入する流量密度 n_{input} がチャンバ壁面からチャンバ内を往復移動する際, 途中にあるポンプに吸着されて減衰し, 残りの流量密度 n_{r1} が戻る. チャンバを1往復する間にクライオポンプに排気される確率はクライオポンプ面積が粒子の通過面を占める割合 s_p , ポンプ係数 ϵ を用いて $s_p \epsilon$ で表される. よって1往復後の残存粒子 n_{r1} は

$$n_{r1} = n_{\text{input}}(1 - s_p \epsilon) \quad (1.4)$$

で与えられる. さらにチャンバ内を繰り返し往復して残ったものが残存粒子となるため, その流量密度は

$$n_c = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(n_{\text{input}} + n_{\text{input}}(1 - s_p \epsilon) + n_{\text{input}}(1 - s_p \epsilon)^2 + \dots + n_{\text{input}}(1 - s_p \epsilon)^n \right) \quad (1.5)$$

で与えられる. ここで $0 < 1 - s_p \epsilon < 1$ のため, この無限級数は収束し, 解は

$$n_c = \frac{n_{\text{input}}}{1 - (1 - s_p \epsilon)}, \quad (1.6)$$

となる.

一般にホールスラスト実験用チャンバ内のクライオポンプはホールスラストを基準としてホールスラストより上流の側壁面に設置されるもの, ホールスラストより下流の側壁面に設置されるもの, ホールスラスト下流壁面に設置されるものの3パターンが考えられる. 側壁面に設置されるポンプに当たる確率は, チャンバ内を粒子が往復した際, 二乗で与えられる. それぞれの領域において, クライオポンプ面積が通過面積を占める割合 $s_{\text{up}}, s_{\text{dp}}, s_{\text{ep}}$ とすると, それらすべてのクライオポンプに当たって排気されずにチャンバ内に残る確率は式(1.6)の $(1 - s_p \epsilon)$ の代わりに $(1 - s_{\text{up}} \epsilon)^2 (1 - s_{\text{dp}} \epsilon) (1 - s_{\text{ep}} \epsilon)^2$ となり, 式(1.6)は

$$n_c = \frac{n_{\text{input}}}{1 - (1 - s_{\text{up}} \epsilon)^2 (1 - s_{\text{dp}} \epsilon) (1 - s_{\text{ep}} \epsilon)^2}, \quad (1.7)$$

となる. これは Frieman らの1次元モデル[10]で用いられる式と同等である. このモデルでは, ポンプ係数が重要なパラメータの一つであり, 一般には実験によって求められている.

この流量密度と粒子の速度の積で逆流粒子流量が算出される. 1次元モデルでは, 壁面温度で規定される熱速度で粒子の速度が与えられるため, 常温のチャンバ壁面, および冷却されているポンプとの衝突によって変化する.

1次元モデルの逆流粒子流量予測は、いくつかのホールスラスト性能試験において、は熱化モデルから算出した逆流粒子流量では説明できなかった大きな推進性能の変化が説明できることが示されており、背圧効果のモデルとして一定の評価が得られている。しかしながら、1次元モデルにおいては3次元形状を持つ構造体によってチャンバ内の流れが変化する効果を考慮することはできない。ホールスラストの実験設備に設置される代表的な3次元形状を持つ構造体としてビームターゲットが挙げられる。このビームターゲットについて、1.4節で述べる。

1.4 ビームターゲットに関する先行研究

ホールスラストの試験設備に設置されるビームターゲットは、

1. プルームイオンによって生じるバックスパッタリングを抑制する
2. プルームイオンのエネルギーをダンプする
3. プルームイオンの反射で生じるガスをポンプに誘導する

という3つの役割を担う。どの役割に重点を置くかによって、ビームターゲットの設計思想が異なる。

ホールスラストやイオンスラストの試験設備で寿命試験の実施を想定した設備や、ホールスラストとビームターゲットとの距離が近い設備においては、1つ目のバックスパッタリング抑制効果を最大化することに主眼が置かれている。もっともシンプルな構造は金属の平板の表面をスパッタ率の低い材質で覆うものである[15]。より工夫を凝らした形状のビームターゲットとしては、入射するビームに対して20度以下の迎え角になる多フィン構造や多重ピラミッド構造が考案されている[17], [40]–[43]。またビームターゲットの表面にはスパッタ率の低い炭素材料の使用が一般的である。炭素によるコンタミを避けるためにチタンを使用する場合もある[41]。

2つ目のエネルギーをダンプする役割としてビームターゲットを使用する場合は、高エネルギーを持ったプルームイオンから、クライオポンプを保護するようにビームターゲットが設置される[18]。これらはビームダンパーとも呼ばれる。

3つ目のプルームイオンの反射で生じるガスをクライオポンプに誘導する観点では、クライオポンプとビームターゲットの位置関係が重要である。チャンバ下流にクライオポンプおよびクライオパネルを集中的に配置し、双円錐型ビームターゲットをチャンバ下流に設置することで、逆円錐型ビームターゲットを設置した場合と比較して排気速度が1.35倍になることが直接モンテカルロ法を用いた数値解析によって示されている[44]。双円錐型ビームターゲットでは衝突したイオンは拡散し、ビームターゲット背面にも拡散流路を設けることでクライオポンプに到達するガス量を増加させる設計となっている。一方、チャンバ直径に対してチャンバ長さが大きく、プルームの大半がチャンバ下流に設置したビームタ

ターゲットではなくチャンバ側壁に衝突してしまう設備では、チャンバ下流に設置した円錐型ビームターゲットがホールスラスト周辺の圧力に与える影響は数%にとどまり、ポンプ配置の影響がより大きいことが同じく数値解析によって示されている[45].

Table 1.2. Typical beam targets for Hall thruster ground test facilities.

Name	Target shape	Surface material	Aspect ratio(D/L)
VTF-2[10]	Conical	Graphite	0.53
EP2[11]	Multi pyramid	Graphite	0.24
IV-10[14]	Bi-conical	Graphite	0.60
LVTf (Aerospazio)[15]	Flat	Graphite	0.30
PES[17]	Multi fin	Graphite	0.41
IHI space chamber	Flat	Graphite	0.67
Ion thruster endurance test facility[2]	Multi fin	Titanium	0.40
HTDT[18]	Anti-conical	Titanium	0.38

1.5 エネルギー粒子の固体表面反射に関する先行研究

一般にエネルギー粒子とは、数 eV から MeV までの範囲の運動エネルギーを持つ粒子のことを指す。エネルギーが数 eV 以下の場合、固体表面の結合エネルギーよりも小さく、非弾性の相互作用が顕著になる。エネルギー粒子と固体表面との相互作用は、原子力、半導体、航空宇宙などの現代産業に非常に重要な役割を担っており、古くから研究されている。数 keV 以上の運動エネルギーを持つ粒子が固体表面に衝突する場合、スパッタリング粒子の収量は衝突するイオンビームフラックスと同等かそれ以上になる。この領域では、2体衝突近似 (binary collision approximation; BCA) を使用した古典的なモデルで固体内の衝突現象が説明でき、イオンが表面近くの固体層にとどまるイオン注入 (implantation) が顕著になる[46]。また、ターゲットが結晶の場合、高エネルギー粒子が単結晶の主軸または表面にほぼ水平に入射すると、結晶格子の原子の隙間に侵入して捕捉される channeling という現象がみられる[47], [48]。この channeling 効果はイオン注入と合わせて半導体のデバイス製造技術としてよく研究されている。一方、固体表面運動エネルギーが数 keV 以下の粒子の固体表面での衝突では、BCA モデルでは粒子間相互作用を記述するのが難しくなり、多体衝突モデルを用いる必要がある。この運動エネルギー領域は低エネルギー領域と定義される[49]。

この領域では、イオン注入や channeling の頻度が減り、入射粒子の多くは固体表面とエネルギー交換して反射する。この低エネルギー領域の粒子と固体表面の相互作用はスパッタ

リングの観点から広く研究されている[50]–[56].

Hobler らは BCA モデルと、標的原子のうち入射原子によって弾かれた反跳原子のみを計算する分子動力学計算 (Molecular dynamics simulations using recoil interaction approximation; MD-RIA)を比較し、BCA が適用可能な下限エネルギーについて研究した[57]. 下限エネルギーは

$$E_{\min}^{\text{BCA}} = 30M_{\text{in}}^{0.55} \text{ (eV)}, \quad (1.8)$$

ここで M_{in} は入射する粒子の原子量である. このモデルは Si 固体結晶に対する相互作用の計算結果から得られた経験則であり, 弾性衝突ではそれぞれの質量比が重要であるため標的原子の原子量が Si の原子量より大きく異なる場合は適用できない可能性があるが, Al など質量の値が近い原子には適用可能であると想定される. 式(1.8)に Xe の原子量 131.29 を代入して計算すると, 439 eV となる. したがって, 作動電圧 300 V 程度のホールスラストで加速された Xe^+ の固体表面との相互作用には BCA モデルが適用できないことが予想される.

Chernysh らは BCA モデルをベースとした数値計算により, スパッタリングのメカニズムを 4 つに分類した[51]. 入射イオンおよび標的原子内部に侵入して弾かれたイオンによってノックオンされて放出されるスパッタ原子を一次ノックオン原子, 入射イオンおよび標的原子内部に侵入して弾かれたイオンと衝突してエネルギーを得た標的原子 (反跳原子) によってエネルギーを得た原子を二次ノックオン原子と呼ぶ. このような反跳原子による衝突発展を衝突カスケードと呼ぶ. 一般に, 数百 eV のエネルギーしかない低エネルギーのイオンは, バルクの内部に深く入り込むことができない. このため, 低エネルギーイオン入射時には, 入射イオンによる一次ノックオンと二次ノックオンの二つのメカニズムが支配的である. この時, スパッタ粒子の分布は垂直方向成分が小さいアンダーコサイン分布を示すことが知られている. 入射イオンのエネルギーが高くなるとコサイン分布に近づき, さらに高くなると, 標的原子内部に侵入して弾かれたイオン由来のスパッタが多くなるため, 垂直方向成分が大きくなるオーバーコサイン分布を示す[58]. またスパッタ率およびスパッタされた粒子の分布は入射イオンの流入角度, エネルギーに依存すること明らかとなっており Yamamura らは膨大な実験データをもとに半経験則を構築し, モデル化した[59], [60]. Zhang らは Yamamura らのモデルを, 250 から 300 eV の Hg^+ イオンによる Mo, Ni のスパッタリングの実験結果と比較し, 良い一致を示すことを報告している[61].

低エネルギーイオンの反射に関する研究は, スパッタリングの研究と比べると限定的である. Winters らは, 低エネルギーイオンが金属固体表面に垂直入射した際, 金属固体表面で反射した粒子が運ぶ反射エネルギーが, 様々なスパッタリングシステムで成膜された薄膜にどのような影響を与えるかについて議論している[50]. Zhou らは, 低エネルギー Xe^+ が Ni 結晶表面に垂直入射した際に生じるスパッタリングと反射粒子の挙動を分子動力学計算で解析した[55]. 彼らは, 反射 Xe の持つ運動エネルギーが 2 eV から 6 eV の間に狭く分布していることを報告している. また入射エネルギー 50 eV から 1000 eV において, 反射 Xe

の散乱分布やエネルギー分布は入射エネルギーによらないと結論付けている。これらのスパッタリングに関する研究では、主に垂直入射の場合について議論されている。

低エネルギーイオンと炭素材料の相互作用については、電気推進機の中でもイオンエンジンの重要な部品の一つである加速グリッドに炭素材料が用いられることから、Xe イオンによって生じるスパッタリングの観点での研究が進められている[62]–[64]。Doerner らは 10 eV ~ 200 eV のエネルギー範囲にある Xe イオンを金属 (Mo, Ti, Be), およびグラファイトターゲットに照射する実験から、連続照射後の金属では内部に Xe が見られなかったのに対し、グラファイトターゲットでは組成比で 14% もの Xe が内部に存在したと報告している[62]。また Kenmotsu らは、炭素ターゲットに Xe が蓄積されている状態とそうでない状態で Xe が衝突した際の挙動をモンテカルロ計算で調査し、実験で観測されるスパッタリング閾値以下の入射エネルギーで生じるスパッタリングには、Xe の炭素ターゲットへの蓄積が寄与していることを示している[64]。

エネルギー粒子はイオンであることが多いが、特に低いエネルギーを持つイオンは、表面近くで効率的に中和されることが知られている。したがって、表面に衝突する実際の粒子は、中和電子遷移によって生成される様々な電子状態にある中性粒子であることが多い。よって BCA や分子動力学計算でエネルギー粒子と固体表面の相互作用を計算する際、入射粒子はエネルギーを持つ中性粒子として設定される[49]。

1.6 研究目的

1.1 節でホールスラストの概要と需要の増加について、1.2 節でホールスラスト地上試験における問題について整理した。問題の一つである背圧効果は、ホールスラストより噴射された推進剤が真空ポンプで排気されるまでにチャンバ内に残存し、その一部がホールスラストに逆流して推進剤として再利用されることによって生じる。このホールスラストに逆流する粒子を逆流粒子と呼び、本研究では、ホールスラスト地上試験で生じる逆流粒子を抑制する手法を考案することを目的に設定した。

1.3 節で紹介した設備内粒子流れの 1 次元モデルの研究では、逆流粒子の発生源はイオンビームが衝突するチャンバ壁面とみなされる。そこでこれまでビームをダンプすることに主眼を置いて設計されていたビームターゲットを、反射粒子をクライオポンプへと導くミラーの様に活用する手法を提案する。

ビームターゲットの影響はチャンバ内の圧力を指標として研究されているが、本研究で提案するようにミラーの様に活用する例はなく、またビームターゲットが逆流粒子の流れに与える影響についても評価されていないことを 1.4 節で述べた。ビームターゲットのような構造体が逆流粒子の流れに与える影響は 1 次元モデルによるモデル化が困難なため、本研究では主に 2 次元軸対称モデルによる数値計算によってこのビームターゲットによる逆

流粒子の抑制効果を評価する。数値計算のためのモデル化と計算手法について第 2 章で述べる。本研究で取り扱うチャンバ内の物理現象概略を Figure 1.2 に示す。

本研究ではホールスラストとして最も一般的な作動電圧範囲 300 V から 400 V [65], [66] の作動で生成される 300 eV の 1 価 Xe イオンにのみ着目する。実際のホールスラストのプラズマイオンはエネルギー分布が存在するが、1.5 節で紹介したように、数百 eV のイオンの固体表面反射特性はエネルギーに依存しないため、エネルギー分布を考慮する必要はないと考える。またイオンの固体表面での反射特性について、材質や入射角度の依存性は明らかになっていないため、ビームターゲットの設計のためにはこれを明らかにする必要がある。ビームターゲット表面で生じる反射粒子の運動ベクトルのモデル化について第 3 章で議論する。ここでビームターゲットの材質は金属とする。ビームターゲットの材質としては炭素材料が最も多く用いられているが、1.5 節で紹介したように、炭素ターゲットに Xe が衝突した際、一定の割合で炭素内部に侵入して蓄積されるため、Xe を鏡面的に反射して誘導するという本研究の目的に対して炭素材料は不相当と考える。また、スパッタリングを抑制するというビームターゲット本来の役割を果たすために、金属の中でも低スパッタ率の材料が候補となる。本研究ではスパッタ率が低く、ホールスラストの試験設備のような大型真空設備に使用実績のある Al, Ti を材質候補として選定した。

ビームターゲットで粒子をどのようにクライオポンプに誘導するかを設計するためには、クライオポンプによる排気と粒子流れの関係をモデル化する必要がある。クライオポンプによる粒子の排気特性はポンプ係数で表され、クライオポンプに向かう流れがある場合のポンプ係数について、第 4 章で議論する。

第 5 章では、第 3 章、第 4 章で構築したモデルを土台として逆流粒子を抑制するためのビームターゲットの設計手法、効果について議論する。本研究では円錐型ビームターゲットをチャンバ下流に設置し、ビームターゲット付近のチャンバ側壁面上にクライオポンプを配置する構成を提案する。円錐型の頂角をパラメータとして粒子の軌道が制御可能である。最後に、数値計算によってビームターゲットによる逆流粒子の抑制効果を評価する。なお、チャンバ形状やクライオポンプの配置に応じて円錐型よりも最適なビームターゲット形状が存在すると考えられるが、本研究では特定のチャンバへの最適化は実施せず、構造が簡素で汎用性のあるビームターゲット形状として円錐型ビームターゲットに着目した。ゼロからチャンバ、クライオポンプ、ビームターゲットを設計する場合に加えて、クライオポンプが円筒型のチャンバ側壁面上に均等に設置されている設備に対しては、第 5 章で議論するビームターゲット設計指針が適用できると想定される。

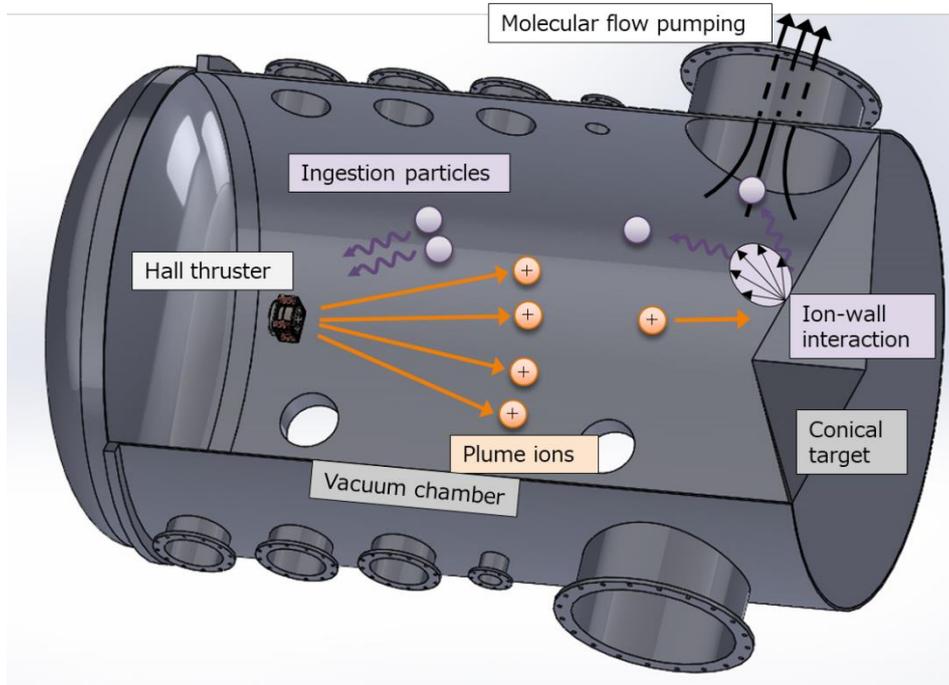


Figure 1.2. Schematic of physics of ingestion particle generation in Hall thruster ground test.

第2章 モデル化と計算手法

2.1 流れの分類

希薄流となる条件は一般的にクヌーセン数 Kn によって定義される。クヌーセン数は平均自由行程と流れの代表長さの比で、

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}, \quad (2.1)$$

と定義される。 L は物体の代表長さ、 λ は平均自由行程である。

$$\lambda = \frac{k_B T}{\sqrt{2}\sigma P}, \quad (2.2)$$

となる。ここで、 P は圧力、 k_B はボルツマン定数、 T は気体の温度、 σ は衝突断面積である。 Kn が 0.01 より小さいとき、流れは連続であると見なすことができ、流れの特徴は熱力学、流体力学など連続体力学の手法で取り扱うことができる。 Kn が 0.01 より大きい場合には連続体としての取り扱いができず、 Boltzmann 方程式にさかのぼって考えなくてはならない。 Boltzmann 方程式は複雑な非線形積分微分方程式であり、その取扱いは非常に難しい。 DSMC 法(Direct Simulation Monte Carlo method, 直接シミュレーションモンテカルロ法)は Boltzmann 方程式を直接解くのではなく、 Boltzmann 方程式の基になっているそれぞれの粒子の衝突過程を確率的に取り扱うことによって流れ場を解析するといった方法である。この手法の詳細は、南部[67], Brid[68], らの教科書を参照されたい。 Kn が 1 より大きい場合に流れは自由分子流と見なすことができる。自由分子流では流れの代表的な長さを分子が移動する間、分子間衝突は起きないとみなされる。よって分子間衝突を無視して粒子の運動方程式を解く粒子法 (Test Particle Monte Carlo; TPMC) を用いた計算によりモデル化が可能である。

分子が直径 d の球であるとみなす剛体球モデルで衝突断面積を扱う場合、式(2.1)は

$$\text{Kn} = \frac{k_B T}{\sqrt{2}\pi d^2 P L}, \quad (2.3)$$

となる。ここで、ホールスラストの推進剤としてよく用いられる Xe 分子のファンデルワールス直径 4.32 Å を用いて、本研究で取り扱う計算領域の Kn を算出する。まずホールスラスト試験中のチャンバ内の圧力は、一般に 10^{-3} Pa 程度である。代表長を東京大学、および IHI で使用されているスペースチャンバの長さ 3 m とすると、チャンバ内の Kn 数は 1.7 となる。よってこの領域の計算には TPMC が適用される。ただし、チャンバ内部にガスを流入する場合、ガス流入部付近は圧力が高くなる。ホールスラストの試験では未燃ガスとしてホールスラストから噴射される中性粒子がホールスラスト付近の圧力分布に強く影響を

与える。この領域では圧力が 10^{-2} Pa 以上になり、Kn は 1 以下となる。よって DSMC を用いて粒子間衝突を計算する必要がある。次に、クライオポンプの内部について、一般的にその内部はガスが排気されておりチャンバよりも 1 桁以上圧力が低い。よって Kn は 1 以上となり、粒子間衝突を無視した TPMC が適用可能である。Table 2.1 に Kn と流れの分類、計算手法をまとめる。

Table 2.1. Flow properties and numerical method treated in this study

本研究で対象とする流れ	チャンバ内ガス流入付近	チャンバ下流	ポンプ内部
圧力レンジ, Pa	$10^{-2} <$	$10^{-4} \sim 10^{-3}$	$< 10^{-4}$
Kn	$Kn < 1$	$1 < Kn < 10$	$10 < Kn$
流れの区分	遷移流	自由分子流	自由分子流
計算手法	DSMC	TPMC	TPMC

2.1.1 ボルツマン方程式の確率解法

モンテカルロ法は、乱数を用いた統計的な手法であるので、確率的な事象に関する広範な問題を解くことができ、ボルツマン方程式の確率解法として広く用いられている。TPMC, DSMC は代表的なモンテカルロ法の計算手法であり、両者の違いは分子間衝突を取り扱うかどうかのみである。

DSMC 法は、1 粒子で数万～数百万粒子を代表する粒子を境界面内で移動・衝突させる粒子法の一つである。解析手順は、(1) 粒子の解析空間への流入、(2) 粒子の移動、(3) 境界面での粒子の反射、流出、(4) 粒子間の衝突判定、である。これを繰り返し、代表粒子の総数や速度のばらつきが十分小さくなった後、データを加算平均してサンプリングする。速度は(3), (4)の境界および粒子間衝突によって更新される。計算フローを Figure 2.1 に示す。以下、確率解法に必要な概念について説明する。

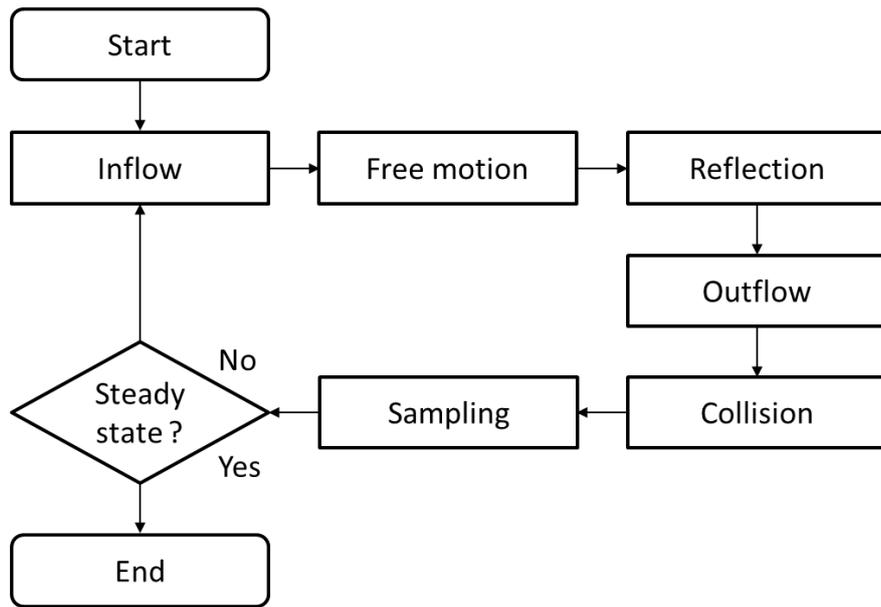


Figure 2.1. Flow chart of DSMC

2.1.2 速度分布関数

分子運動を取り扱う際にはどの速度を持った分子がいくつ存在するかを表す速度分布関数という概念が必要となる。ある流れ場の一点の位置ベクトルを x とすると、その点での数密度は $n(x)$ と書ける。この x を含む体積 $dx = dx_1 dx_2 dx_3$ の中にある分子の個数は $n(x)dx$ となる。分子の速度 v の直角座標成分を v_1, v_2, v_3 ととり、それらの成分を座標軸とした速度空間で、速度ベクトル v の先端に体積 $dv = dv_1 dv_2 dv_3$ の直方体を考える。この中にある分子数は速度分布関数 f を用いて $f dv$ と書くことができ、 $v \sim v + dv$ の速度を持つ分子の数を表す。 f は速度空間の位置によって変わるため v の関数であり、速度空間のすべての分子数を加えると全体の分子数に等しくなるため、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} n f dv_1 dv_2 dv_3 = n, \quad (2.4)$$

が成り立つ。速度分布関数 f は規格化条件を満たすため、確率密度とも解釈できる。

2.1.3 ボルツマン方程式

数密度 n は一般に時間 t にも依存し、同様に f は v, x, t に依存する。ここで $n f = \Gamma$ と置き、任意の部分領域 G についての積分

$$\int \int_G \Gamma dx dv = n_G, \quad (2.5)$$

は時刻 t において領域 G に存在する粒子の数を与えることを意味する。ここで、粒子の自由運動と粒子同士の衝突によって単位時間に領域 G に流入、流出する粒子数を数え上げる

と,

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} = -v \cdot \nabla_x \Gamma + Q(\Gamma), \quad (2.6)$$

ここで右辺第一項は輸送項, 第二項は衝突項である. これは非平衡状態の分布関数 $f(v, x, t)$ に対する基本方程式であり, ボルツマン方程式と呼ばれる.

2.1.4 マクスウェル分布

平衡状態では速度分布関数 f は t にも x にも依存しない. この時のボルツマン方程式の解はマクスウェル分布となり, 流速 u と温度 T を一定とした場合には

$$f(v) = \frac{1}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(v-u)^2}{2RT}\right], \quad (2.7)$$

として与えられる. 熱速度の大きさ V が $V \sim V + dV$ にある分子の数を, スピード分布関数 χ を用いて $n\chi(V)dV$ と置くと, 平衡状態では

$$\chi(V) = \frac{4\pi}{(2\pi RT)^{3/2}} V^2 \exp\left(-\frac{V^2}{2RT}\right), \quad (2.8)$$

となり, $\chi(V)$ は

$$V_{\text{mp}} = \sqrt{2RT}, \quad (2.9)$$

で極大値を取る. この V_{mp} は最確速さと呼ばれる.

また V の平均値は

$$\bar{V} = \int_0^\infty V\chi(V)dV = \sqrt{\frac{8RT}{\pi}}, \quad (2.10)$$

で与えられ, この \bar{V} は平均速さと呼ばれる.

同様に平均二乗速さは

$$\bar{V}^2 = \int_0^\infty V^2\chi(V)dV = 3RT, \quad (2.11)$$

で与えられ, その平方根は

$$V_{\text{rms}} = \sqrt{3RT}, \quad (2.12)$$

である.

これらの速さは

$$V_{\text{mp}} : \bar{V} : V_{\text{rms}} = \sqrt{2} : \sqrt{8/\pi} : \sqrt{3} = 1 : 1.128 : 1.225, \quad (2.13)$$

の割合となり, 値には大きな差はないが物理的な意味は異なる. 平均自由行程や分子のフラックスなど, 輸送現象を扱う場合には平均速さを, エネルギーや圧力の場合には 2 乗平

均速さを用いる。

マクスウェル分布をしている分子集団から任意の 2 個を取り出し、この分子間の相対速度の大きさ g を調べる。 g が $g \sim g + dg$ にある確率を $G(g)dg$ とすると

$$G(g) = \frac{4}{\sqrt{\pi}(4RT)^{3/2}} g^2 \exp\left(-\frac{g^2}{4RT}\right), \quad (2.14)$$

また g の平均は

$$\bar{g} = \int_0^\infty gG(g)dg = 4\sqrt{\frac{RT}{\pi}}, \quad (2.15)$$

となる。これは $\sqrt{2\bar{v}}$ に等しい。 $G(g)$ は $g_{\text{mp}} = 2\sqrt{RT}$ で極大値をとる。 DSMC 法では速度分布関数 f の代わりに f から抽出したサンプルの集合を用いてボルツマン方程式の解を得る。その際、 g の上限 g_{max} が必要となる。厳密にはこのような上限は存在しないが、経験的に

$$g_{\text{max}} = 2.5g_{\text{mp}} = 5\sqrt{RT}, \quad (2.16)$$

と置くと、 $g > g_{\text{max}}$ となる確率が無視しうほど小さくなり、計算上問題ないとされている[67]。

2.1.5 分離の原理

DSMC 法では分子の衝突と移動を分離して考える。式(2.6)の Γ について $\Delta t \ll 1$ のとき、

$$\Gamma(v, x, \Delta t) = \Gamma(v, x, 0) + \Delta t \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial t} \right)_{t=0}, \quad (2.17)$$

ここで式(2.6)より

$$\Gamma(v, x, \Delta t) = (1 - \Delta t D + \Delta t Q) \Gamma(v, x, 0), \quad (2.18)$$

ただし $D = v \cdot \nabla_x$ であり、 D は線形、 Q は非線形演算子である。 $(\Delta t)^2$ を無視すると式(2.18)は

$$\Gamma(v, x, \Delta t) = (1 - \Delta t D)(1 + \Delta t Q) \Gamma(v, x, 0), \quad (2.19)$$

つまり $\Gamma(v, x, \Delta t)$ を求めるには、まず

$$\Gamma^*(v, x) = (1 + \Delta t Q) \Gamma(v, x, 0), \quad (2.20)$$

を求め、次に

$$\Gamma(v, x, \Delta t) = (1 - \Delta t D) \Gamma^*(v, x), \quad (2.21)$$

を求めればよい。式(2.21)の解はすぐ求まり、

$$\Gamma(v, x + v\Delta t, \Delta t) = \Gamma^*(v, x), \quad (2.22)$$

となる。式(2.20)は Δt の間におこる分子間衝突による変化を表し、式(2.22)はこれらの分子が無衝突で x から $x + v\Delta t$ に移動することを表す。このように分子の衝突と移動を分離できる原理を分離の原理という。これが成立するためには $\Delta t|Q\Gamma| \ll \Gamma$ かつ $\Delta t|D\Gamma| \ll \Gamma$ が必要である。これらを書き直すと、

$$\Delta t \ll \lambda/\bar{V}, \quad \bar{v}_x \Delta t \leq \Delta x, \quad (2.23)$$

となる。ここで \bar{v}_x は v_x の代表値である。後者の条件はクーラン条件と呼ばれ、分子がセル幅 Δx を飛び越えないように Δt を選択する必要がある。

2.1.6 最大衝突数法

最大衝突数法は各セルのサンプル粒子同士の最大衝突数を求めることで、計算効率を良くし、また精度が良い結果を得ることができる手法である。 N 分子系で Δt 時間に起きるセル内の平均衝突数は

$$\bar{M} = \frac{n\Delta t}{N} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^N g_{ij} \sigma_{ij}(g_{ij}), \quad (2.24)$$

で与えられる。ここで $G = g_{ij} \sigma_{ij}(g_{ij})$ と置き、この最大値 G_{\max} を仮定すると最大衝突数として

$$\bar{M}_{\max} = \frac{1}{2} n\Delta t(N-1)G_{\max}, \quad (2.25)$$

が得られる。最大衝突数法による粒子の衝突計算では、まず G_{\max} を予想し、最大衝突数 \bar{M}_{\max} を求める。 \bar{M}_{\max} は乱数 U を用いて整数にする。次に N 個の分子の中から任意の2個の分子 i, j 抽出する。乱数 U を生成し、 $U > G_{ij}/G_{\max}$ なら衝突計算を行い、それぞれの粒子の速度を衝突後の速度に置き換える。これを \bar{M}_{\max} 回繰り返す。

この手法は厳密にはボルツマン方程式を満足せず、気体の状態が一様であると仮定してボルツマン方程式を線形化したKac方程式に立脚するものと考えられている。この手法の欠点は、1つまたは数回の連続する Δt 内で、同じ粒子ペアが繰り返し選択されて衝突してしまうことである。計算において Δt を減少させると、式(2.25)よりセル内の最大衝突数は減少する。ところが、衝突有無の判定は G_{ij}/G_{\max} に依存し、 Δt には依存しない。セル内の計算粒子数が少ない場合、ある Δt 内で同じ粒子ペアが選択されてしまう可能性が高くなる。これによって生じる誤差を抑制するため、経験的に各セルの粒子が20個以上になるようにするのが望ましいとされている[68]。

形式的にボルツマン方程式を満足する解法として、Nanbu法がある[69]。この手法では、ある Δt 内で全粒子の衝突確率を判定した後に速度を変換するため、前述の同じ粒子ペアの

衝突が Δt 内に選択されることはない。最大衝突数法では粒子間衝突に関して運動量を厳密に保存することが可能であるが、Nanbu 法では分子衝突に関する個々の運動量は厳密には保存されないという欠点がある。どちらの手法においても個々の衝突において運動量と運動エネルギーを同時に保存することはできないが、この問題はサンプル粒子数を十分大きくすることで緩和され、統計的な揺らぎの範囲内で保存則が満足されることになる。また計算能率は最大衝突数法に利点がある。これらの手法の他にも複数の手法が開発されており、それらは参考文献にまとめられている[70]。

2.2 壁面反射モデル

TPMC および DSMC のような希薄気体流れの解析のためには、固体表面における境界条件として、気体分子の固体表面での散乱挙動のモデル化が必要となる。固体表面に入射する分子の速度分布関数を f_{in} 、反射粒子のものを f_{ref} とすると、両者の関係は散乱 kernel $\xi(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})$ を用いて以下の式で与えられる。

$$v_n f_{\text{ref}}(\mathbf{v}) = \int_{v'_n < 0} |v'_n| \xi(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) f_{\text{in}}(\mathbf{v}') d\mathbf{v}', \quad (2.26)$$

ここで \mathbf{v}' および \mathbf{v} は入射分子および反射分子の速度、 v'_n および v_n はそれらの固体表面法線成分である。散乱 kernel $\xi(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})$ は速度 \mathbf{v}' で入射した分子が速度 \mathbf{v} で反射する確率を表している。散乱 kernel は以下の非負制約、規格化条件、および可逆条件を満たす。

$$\xi(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) \geq 0, \quad (2.27)$$

$$\int_{v'_n < 0} \xi(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) d\mathbf{v} = 1, \quad (2.28)$$

$$|v'_n| \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}'^2}{2k_B T}\right) \xi(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) = |v_n| \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2k_B T}\right) \xi(-\mathbf{v} \rightarrow -\mathbf{v}'), \quad (2.29)$$

ここで m は気体分子の質量、 T は温度である。後述する一般的な壁面反射モデルでは、 T を壁面温度 T_w としている。式(2.29)は気体-表面相互作用過程の可逆性に基づいて導出される。これは、入射したガス分子が壁面と平衡状態でマックスウェル分布に従うとき、反射したガス分子は同じ平衡状態を維持することを約束するものである。

最も単純なモデルは鏡面反射モデルであり、このモデルでは気体分子の速度のうち固体接線方向は保存され、法線方向成分のみが反転する。このモデルは気体-固体間のエネルギー交換が起こらないという特殊な状況にのみ適用可能である。鏡面反射における反射粒子の速度分布関数と散乱 kernel は

$$f_{\text{ref,sp}}(\mathbf{v}) = f_{\text{in}}(\mathbf{v} - 2\mathbf{n}v_n), \quad (2.30)$$

$$\xi_{\text{sp}}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) = \delta(\mathbf{v}' - \mathbf{v} + 2\mathbf{n}v_n), \quad (2.31)$$

ここで \mathbf{n} は固体表面からの単位法線ベクトル、 δ はデルタ関数である。

一方、チャンバに使用されるような物体の表面状態は大抵の場合、原子・分子スケールでみると大きな表面粗さを持つため拡散反射モデルに従うと考えることが多い。このモデルでは気体分子は固体表面の温度における熱平衡状態に達して、表面から余原則に従う速度分布で拡散的に放出される。反射粒子の速度分布関数と散乱 kernel は

$$f_{\text{ref,diff}}(\mathbf{v}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2k_B T}\right), \quad (2.32)$$

$$P_{\text{diff}}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{m}{k_B T}\right)^2 |v_n| \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2k_B T}\right), \quad (2.33)$$

である。

2.2.1 マクスウェルモデル

2つのモデルの中間として、壁面に入射する粒子のうち、適応係数 α の割合で拡散反射し、残りが鏡面反射するというマクスウェルモデルが実際の計算ではよく用いられる。このモデルでは反射粒子の速度分布関数と散乱 kernel は

$$f_{\text{ref,Maxwell}}(\mathbf{v}) = (1 - \alpha)f_{\text{ref,sp}}(\mathbf{v}) + \alpha f_{\text{ref,diff}}(\mathbf{v}), \quad (2.34)$$

$$\xi_{\text{Maxwell}}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) = (1 - \alpha)\delta(\mathbf{v}' - \mathbf{v} + 2\mathbf{n}v_n) + \alpha \frac{1}{2\pi} \left(\frac{m}{k_B T}\right)^2 |v_n| \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2k_B T}\right), \quad (2.35)$$

で与えられる。マクスウェルモデルは簡略であり、工学的に粗い表面での気体分子と固体表面の相互作用をモデル化する場合に広く用いられる。

気体分子を固体表面に衝突させて両者の相互作用を観察する手法として、分子線散乱実験が用いられてきた。それらの実験で観察された気体分子の散乱角度分布は葉状分布を示すことが報告されており[71], [72]、マクスウェルモデルではこの葉状分布が再現できないという欠点がある。

2.2.2 CLL モデル

エネルギー・運動量の適応係数を同時に反映することができ、さらに広がりを持った現実的な散乱角度分布を与えるモデルとして Cercignani-Lampis-Lord (CLL)モデルが開発された[73]。CLL モデルでは、入射速度 v_{in} で固体表面に衝突した気体分子が、反射速度 v_{ref} で固体表面から離脱する確率を考え、熱平衡状態でのつり合いが保たれる関数を数学的な考察により導出している。単原子分子の場合は、壁面の接線方向の運動量適応係数および法線方向のエネルギー適応係数をパラメータとして使用する。接線方向速度を v_t 、法線方向速度を v_n とすると、以下のような接線方向の速度変化と法線方向の速度変化はそれぞれ以下の

独立な散乱 kernel に従う.

$$\xi_{\text{CLL}}(v'_t \rightarrow v_t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B \alpha_t (2 - \alpha_t)}} \exp\left[-\frac{m}{2k_B T} \frac{\{v_t - (1 - \alpha_t)v'_t\}^2}{\alpha_t}\right], \quad (2.36)$$

$$\xi_{\text{CLL}}(v'_n \rightarrow v_n) = \frac{m}{k_B T} \frac{v_n}{\alpha_n} I_0\left(\frac{m}{k_B T} \frac{\sqrt{1 - \alpha_n} v'_n v_n}{\alpha_n}\right) \exp\left[-\frac{m}{2k_B T} \frac{v_n^2 + (1 - \alpha_n)v_n'^2}{\alpha_n}\right], \quad (2.37)$$

ここで α_t, α_n はそれぞれ接線方向の運動量適応係数および法線方向の運動エネルギー適応係数である. I_0 は 0 次の第 1 種修正ベッセル関数で,

$$I_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(x \cos \phi) d\phi, \quad (2.38)$$

である.

CLL モデルは DSMC 法への実装が容易なこともあり, DSMC 法による希薄気体の流れの研究や, 抗力係数の算出に用いられている[74]–[79]. しかしながら, CLL モデルには複数の適応係数が必要になるため, それらが用意できない場合には使うことができない. 使いやすさの観点ではマクスウェルモデルが優れている. DSMC 法による希薄気体の解析においてマクスウェルモデルと CLL モデルの違いによる影響を調査した研究では, 流れの固体壁への入射角度が一定に与えられている問題では熱の輸送に対してモデルの違いが顕在化するが, そうでない場合にはモデルの違いは無視するという報告もある[80]. またマクスウェルモデルや CLL モデルはボルツマン方程式に基づいて導出されており, これらのモデルは特に数 100 K~数 1000 K の温度に相当するエネルギーを持つ気体と固体の相互作用に対して使われている.

2.2.3 拡張 CLL モデル

ここでホールスラストから噴射される 300 eV の加速エネルギーを持つ Xe イオンが壁温度 300 K のビームターゲット壁面に衝突する場合を考える. その時, Xe の入射エネルギーを並進温度に換算すると, 壁温度 300 K の 7740 倍になる. この大きな運動エネルギーを持つ粒子が壁面と衝突すると, 壁面を介して入射粒子の運動エネルギーが反射粒子の熱エネルギーに変換される. 従来の CLL モデルではエネルギー適応係数によって入射粒子の運動エネルギーと壁面の熱エネルギーとのエネルギー交換は考慮されているが, 粒子の運動エネルギーが壁面を介して反射粒子の熱エネルギーに変換される効果は考慮されていない. そこで反射温度 T_{ref} というパラメータを導入する. この T_{ref} は射粒子の入射エネルギーを並進温度換算した T_{in} と壁面温度 T_w の間の値を取ると考えられるため, 係数 β を用いて

$$T_{\text{ref}} = T_{\text{in}}(1 - \beta) + \beta T_w, \quad (2.39)$$

と定義する. つまり, 係数 β によって T_{ref} が決定される. 式(2.39)を係数 β について書き下すと

$$\beta = \frac{T_{\text{in}} - T_{\text{ref}}}{T_{\text{in}} - T_{\text{w}}}, \quad (2.40)$$

となり、これの物理的な意味は入射粒子の運動エネルギーが壁面を介して熱エネルギーに変換される割合である。1.5 節で紹介した先行研究では、数 100 eV の Xe が壁面に入射した際の反射 Xe のエネルギーは平均して数 eV 程度であることから、 β はおよそ 1 に近い値であると想定される。CLL モデルの温度を T_{ref} に置き換え $\alpha_e, \alpha_n, \beta$ の 3 つのパラメータを用いて反射粒子の分布を与えるモデルを拡張 CLL モデルとする。

本研究ではイオンと固体壁の相互作用には拡張 CLL モデルを、中性粒子と固体壁の相互作用にはこのマクスウェルモデルを使用する。

2.3 適応係数

気体と固体との間での物理量の交換の割合を示す指標を適応係数と呼ぶが、エネルギーに対する適応係数は

$$\alpha_E = (\bar{E}_{\text{in}} - \bar{E}_{\text{ref}}) / (\bar{E}_{\text{in}} - \bar{E}_{\text{w}}), \quad (2.41)$$

ここで \bar{E}_{in} , \bar{E}_{ref} は入射分子と散乱分子の平均並進エネルギーを表す。 \bar{E}_{w} は散乱分子が表面温度の Maxwell-Boltzman 分布に従って放出された場合の平均並進エネルギーである。鏡面反射のように、気体分子が入射時の運動エネルギーを保ったまま散乱される場合は $\alpha = 0$ 、拡散反射のように表面と十分に相互作用して表面温度の熱平衡状態に達してから散乱される場合には $\alpha = 1$ (完全適応) となる。同様に運動量適応係数は入射分子と散乱分子の平均運動量 \bar{p}_{in} , \bar{p}_{ref} を用いて

$$\alpha_M = (\bar{p}_{\text{in}} - \bar{p}_{\text{ref}}) / \bar{p}_{\text{in}}, \quad (2.42)$$

で与えられる。運動量適応係数は流れの滑りと密接に関連しており、特に接戦方向の運動量適応係数は様々な気体と固体に対して実験と数値解析による調査によって値が求められており、参考文献[81][82]にまとめられている。そのうち、イオンと固体の相互作用については Knechtel らによる Ar イオンについての報告があるのみである[83]。

エネルギー適応係数は熱適応係数とも呼ばれ、分子線による実験や、ガスから固体壁への熱流束の計測によって実験的に見積もられる[84]。またマクスウェルモデルの適応係数はエネルギー適応係数と一致し、真空容器内に設置したプレートが雰囲気ガスから受ける力の計測とマクスウェルモデルを壁面境界条件として用いた DSMC 法による計算結果を比較してエネルギー適応係数を求める研究もある[85]。

適応係数は He など分子量の小さい原子では 0.2 などの小さい値を、Xe などの分子量の大きい原子では 1 に近い値を取る。固体の材質や表面状態にも依存し、また 1 つの実験で複数の適応係数を取得するのは困難である。そこで、実験の代わりに分子動力学計算を用い

て適応係数を算出する研究が近年進められている[86]–[88]。特に微小電気機械システム (Micro Electro Mechanical Systems; MEMS) の表面と流れの相互作用を対象とした研究が多くみられ、それらの研究では適応係数が Kn 数に依存することが明らかになっている。

一方、電気推進機の試験設備として用いられる数 m 級のチャンバ内の粒子計算では、壁面モデルにはマクスウェルモデルが使用され、推進剤である Xe の適応係数として 1 に近い固定値が使用される[44], [45]。これらの計算モデルでは粒子の流入条件として電気推進機から噴射された推進剤プルームをモデル化しているが、プルーム中の粒子はイオンとして扱われているわけではなく、プルーム粒子の壁面での反射は他の中性粒子と同様の扱いである。

本研究ではマクスウェルモデルを用いる場合、Xe の適応係数として先行研究[45]で使用されている 0.9 を使用する。

2.4 分子動力学

MD 法は、多原子系における原子の動きを運動方程式から求める方法である。原子の動きを追跡していくので、時間平均から熱力学的な諸物性値を得ることができ、また拡散係数や粘性係数などの輸送物性も計算することができる。また平衡状態のみならず、せん断場での分子の振る舞いなどの非平衡系における分子の運動にも適用することができる。取り扱える原子の数も比較的多いため、金属や半導体などの材料開発などの様々な分野において、有用な計算技術である。

MD 法では、まず原子の運動がニュートンの運動方程式に従うものと仮定する。そして個々の原子について運動方程式を立て、それらを連立して解くことで複数の原子の運動を追跡する。 N 個の原子からなる系において、1 個の原子 i についての運動方程式は次のように書ける。

$$F_i = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2}, \quad (2.43)$$

ここで、 m は原子の質量、 r は原子の位置、 F は原子にかかる力を表している。 F は原子核間、電子間、原子核と電子間に作用する相互作用、および電磁場などの外場との相互作用に起因するものであるが、古典分子動力学法ではこれらを表現する関数系をあらかじめ用意しておき、それに刻一刻と変わる r_{ij} を代入して値を得る手順を取る。

最も単純には、各原子の周りの他原子の配置から計算されるポテンシャルエネルギーの和として表現される全ポテンシャルエネルギー E を考え、原子 i に作用する力 F を

$$F_i = -\frac{\partial E(r_i)}{\partial r_i}, \quad (2.44)$$

として計算する。

こうしたポテンシャルの存在を仮定することの正当性や、原子の種類ごとにどのように関数化するかなどは量子力学理論によって検討されるべき問題であるが、ポテンシャルモデルの多くは経験的に求められ、これらを用いた場合は古典的分子動力学と呼ばれる。原子間相互作用を定める原子間ポテンシャルの選択は、MD 計算の結果の質を決定づけるため、慎重な選択が必要である。本論文では古典的分子動力学を用いており、以降、説明は古典的分子動力学に限定する。

MD 計算で直接取り扱うことができる原子数は、コンピュータの能力向上と共に飛躍的に大きくなっているが、仮に 10^9 (10 億)個としても、3 次元的に配置すると一辺がわずかに 1000 原子($\sim 0.1 \mu\text{m}$ 程度)の立方体状のかたまりしか解析できない。これではバルク的特性を評価するには不十分な場合が多く、その解決策として解析の対象が巨視的系の一部分となるような取り扱いがなされる。一般的な解決策として広く用いられているのは周期構造モデルと連続体中への埋め込みモデルの 2 つである。前者では、解析可能は原子数からなる基本枠を設定し、基本枠の境界に周期境界条件を適用する。後者は、き裂や格子欠陥などの局所的な不均一構造を扱う場合によく用いられるが、連続体はマクロ的モデルであるため、原子系とのつなぎ方に注意深い配慮が必要となる[89]。

MD の解析手順は、(1) 初期座標・速度を生成、(2) ポテンシャルエネルギーと力の計算、(3) 座標・速度を更新、(4) 境界条件と温度抑制層の適用、(5) 巨視的な量のサンプリングである。これを設定した時間まで所定の時間刻みで繰り返し計算し、統計的な情報を得る。初期座標は構造と周期境界条件が両立するように注意して設定する必要がある。初期速度としては、多くの場合、系の設定温度の平衡状態に対する Maxwell-Boltzmann 分布から抽出して与えられる。式(2.40)から時間発展を積分する計算には差分法が用いられる。ポテンシャルエネルギーと力の計算には大変時間のかかるものとなるため、1 ステップあたりにその項の計算回数が比較的少ない、Verlet 法、Leap-frog 法、Gear 法などが用いられる。これらの手法の詳細は岡田らの教科書[90]を参考にされたい。時間刻みは原子核の振動周期の $1/100$ 程度を目安として、1 fs 程度に選定されることが多い[89]。

解析結果として得られる全原子の位置と運動量は、物質の特性を求めるための全情報を含んでいると考えられ、時々刻々の系の変化の詳細を評価することができる。現在のコンピュータで取り扱える系の大きさは、アボガドロ数($\sim 6 \times 10^{23}$)に較べて遙かに少なく、統計力学的関係から物性を評価するには系が小さすぎることに注意しなければならない[90]。

近年、コンピュータの性能と MD 計算技術の双方の向上もあり、MD を用いたエネルギー粒子と固体表面との相互作用の研究が盛んになってきている[55]–[57], [91], [92]。また MPI 並列機能が実装されているオープンソースも普及しており、Large-scale atomic/molecular massively parallel simulator (LAMMPS[93])は特に汎用性が高くエネルギー粒子と固体表面との相互作用の研究にも使われている[56]。本研究でも LAMMPS を使用し、MD 計算モデルは Wise らの 1000 eV 以下の入射エネルギーを持つ Xe イオンによる金属のスパッタ率を分

子動力学計算で再現する研究で使用されているモデルを参考にして構築する[56]. このような気体粒子と固体の相互作用を計算する場合, 固体間, 固体 - 気体間, および気体間についてそれぞれ独立したポテンシャルモデルを用いる.

2.5 ポテンシャルモデル

ポテンシャルモデルは大きく以下の3種類に分類できる.

- 2体間ポテンシャル: 2原子間の距離の関数
- 3体間ポテンシャル: 原子間距離だけでなく結合角も考慮に入れる
- 多体ポテンシャル: 原子 i の周囲の原子群より, 電子密度などの値を求め, エネルギーを決める

2体間ポテンシャルは Van der Waals 力に基づく Lennard-Jones ポテンシャルや, 金属系に用いられるモースポテンシャルなどが挙げられる. エネルギー粒子と固体表面との相互作用にはクーロンポテンシャルに基づく近接型ポテンシャルが広く用いられており, 中でも遮蔽関数に ZBL(Ziegler-Biersack-Littmark)型関数を用いた ZBL ポテンシャルモデルはスパッタリングの研究に広く用いられている. 本研究においても, Xe と固体原子との相互作用に ZBL ポテンシャルを用いる. ZBL ポテンシャルは以下の関数で表される.

$$E_{ij}^{\text{ZBL}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}} \phi^{\text{ZBL}}(r_{ij}/a) + S(r_{ij}),$$

$$a = \frac{0.4685}{Z_i^{0.23} + Z_j^{0.23}}, \quad (2.45)$$

$$\phi^{\text{ZBL}}(x) = \sum_{i=1}^4 A_i e^{-B_i x},$$

ここで e は素電荷, ϵ_0 は真空中の誘電率, Z は相互作用を行っている2つの原子核の電荷, $\phi^{\text{ZBL}}(x)$ 遮蔽関数, a は遮蔽パラメータと呼ばれる. 遮蔽関数のパラメータの値は $A_1 = 0.18175$, $A_2 = 0.50986$, $A_3 = 0.28022$, $A_4 = 0.02817$, $B_1 = 3.19980$, $B_2 = -0.94229$, $B_3 = -0.40290$, $B_4 = -0.20162$ である. また $S(r_{ij})$ はカットオフ距離の内側と外側でポテンシャルをゼロに傾斜させるスイッチング関数であり,

$$S(r) = \begin{cases} \frac{S_1}{3}(r - r_{in})^3 + \frac{S_2}{4}(r - r_{in})^4 & r_{in} < r < r_{out} \\ S_3 & r \leq r_{in} \\ 0 & r \geq r_{out} \end{cases}, \quad (2.46)$$

ここで

$$S_1 = \left(-3E'(r_{out}) + (r_{out} - r_{in})E''(r_{out}) \right) / (r_{out} - r_{in})^2,$$

$$S_2 = \left(2E'(r_{out}) - (r_{out} - r_{in})E''(r_{out}) \right) / (r_{out} - r_{in})^3, \quad (2.47)$$

$$S_3 = -E(r_{out}) + (r_{out} - r_{in})E'(r_{out})/2 - (r_{out} - r_{in})^2E''(r_{out})/12,$$

であり, r_{in} はスイッチング関数が立ち上がるインナーカットオフ, r_{out} は ZBL ポテンシャルのグローバルカットオフである. スwitching関数の境界条件は $S'(r_{in}) = S''(r_{in}) = 0$, $S(r_{out}) = -E(r_{out})$, $S'(r_{out}) = -E'(r_{out})$, and $S''(r_{out}) = -E''(r_{out})$, で与えられ, LAMMPS 内部で反復して計算される.

3 体間ポテンシャルは主にシリコン系のシミュレーションによく使われる Tersoff ポテンシャルや, カーボンナノチューブに使われる Brenner ポテンシャルなどがある. 本研究では取り扱わないため, 詳細は教科書[90]を参照されたい.

次に多体ポテンシャルについて, 最も広く知られているものは EAM (Embedded Atom Method) モデルであり, これは主に金属に適用される. 金属では電子雲中に原子核が埋め込まれていると考え, その原子核を挿入する際のエネルギーを考慮したモデルである. EAM モデルでは 2 つの分子 i, j 間のエネルギーは次式で与えられる.

$$E_i^{\text{EAM}} = F^{\text{EAM}} \left(\sum_{j \neq i} \rho(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi^{\text{EAM}}(r_{ij}), \quad (2.48)$$

ここで r_{ij} は原子間距離, $\rho(r_{ij})$ は電荷密度であり, F^{EAM} は電子密度 ρ を持つ位置にある原子の埋め込みエネルギー, ϕ^{EAM} は原子間の中心斥力を表す. 本研究では金属ビームターゲット材料候補として低スパッタ率で電気推進機の試験設備への使用実績もある Al と Ti に着目し, それぞれについて Winey らと Mendeleev らによって報告されているパラメータセットを使用した[94], [95]. なおこれらのパラメータセットを含むポテンシャルファイルは NIST Interatomic Potentials Repository Project で公開されており, ここから取得した[96].

第3章 Xe イオンの金属ビーム ターゲット表面反射特性評価

ホールスラスタが生成した 300 eV の Xe イオンをビームターゲットで効率よくクライオポンプに誘導するためには、Xe イオンの金属ビームターゲット表面反射特性を知る必要がある。

これまでの低エネルギーイオンと固体との相互作用の研究では、固体表面に衝突して反射したイオンの分布特性はイオンが垂直入射する場合には一定の知見が得られているが、特にイオンの入射角度が変化した際、分布がどのように変化するかは明らかになっていない。

本章では分子動力学計算によって Xe イオンの金属ターゲット表面反射特性、特に入射角度依存性を明らかにし、ビームターゲット設計に用いることのできる実用的なモデルに落とし込むことを目的とした。

3.1 分子動力学計算モデル

反射およびスパッタされた原子の軌道を計算するための計算モデルを構築した。2つの計算領域を作成し、純粋な元素から形成された結晶金属の層を配置した金属領域、衝突粒子を配置した気体領域の2つの領域を作成した。Al は面心立方格子で格子定数は 4.049 Å である。また Ti は α -Ti を想定し六方最密構造で格子定数 c が 4.716 Å、軸比 c/a が 1.598 である。すべり面として活動しやすい面、つまり表面エネルギーの低い面 (Al では {111} 面, Ti では {10 $\bar{1}$ 0} 面) を結晶の最表面に設定した。系のサイズおよび境界条件は計算結果に大きく影響を与えるため、注意深く設定する必要がある。本計算では、 $12 \times 12 \times 8$ 結晶格子とし、 x 軸および y 軸方向に周期境界を、 z 軸方向に自由境界を設定した。温度制御層 (層の平均温度を 300 K に保つ) として Langevin 法を用いており、これを中間の 4 つの結晶格子で構成されている層に適用することで周期境界条件として実際に計算していない周囲の材料への熱伝導を模擬している。2 つの結晶格子で構成される最下層は結晶が移動しないように固定している。最上層の 4 つの結晶格子は自由運動している。自由運動する最上層の深さは、その下層に設定した温度制御層が再表面の原子の動きに影響を与えないように設定する必要がある。Wise らは最上層のサイズが結晶格子 2 つ以上であれば、計算されるスパッタ率が温度制御層の影響を受けないことを明らかにしており、本計算モデルはこの条件を満た

している。計算は常温 300 K の熱運動を初期速度として与えて 5 ps 運動させて結晶が熱平衡状態にした後、気体領域から Xe 原子の位置をランダムに選定して金属ターゲット結晶に指定の入射速度で入射し、1 ps 運動させ、表面が定常状態に戻るため 1 ps の静定時間を設けるといふ 2 ステップを繰り返し行っている。結晶モデル概略図を Figure 3.1 に示す。入射粒子のフルーエンスが $0.04 \text{ atom}/\text{\AA}^2$ となるまで Xe 原子を入射し、反射粒子の軌道と速度、およびスパッタ粒子の数をカウントする。入射粒子のフルーエンス $0.04 \text{ atom}/\text{\AA}^2$ は Wise らの Xe イオンによる金属のスパッタ率を分子動力学計算で再現する研究で使用されている値である[56]。分布の評価の際にデータ数がたりない場合は結晶をリセットして計算を続行し、サンプル数を増やす。このフラックスの範囲で生じる表面の欠損の影響が考慮されている。入射粒子の極角 θ_m はパラメータとして各条件で 1 つの値を使用している。実際の固体表面では結晶の向きが場所によってばらついていることを考慮し、方位角 ϕ_m を結晶表面の対称性がカバーされる角度 (Al で 60 度, Ti で 90 度) まで 1 度刻みで振って各方位角での計算結果を合算している。

本計算モデルでは ZBL ポテンシャルのインナーカットオフを 3 \AA 、アウターカットオフを 4 \AA に設定した。インナー、アウターカットオフをそれぞれ 2 \AA 外側に拡張しても計算結果に対する影響は見られなかった。なお、本計算モデルにおいて気体-気体間相互作用は考慮していない。1-20 kW のホールスラスタのビームイオン電流密度は $10^5 \text{ A}/\text{m}^2$ を超えるため[19], [97], この時 12×12 の結晶表面に到達する平均的な入射イオンの間隔は 10^3 ps 以下と推定される。したがって、1 回の 2 ps イベント内に複数の Xe イオンが入射することは稀であり、計算から除外しても結果に対する影響は無視できると考えられる。

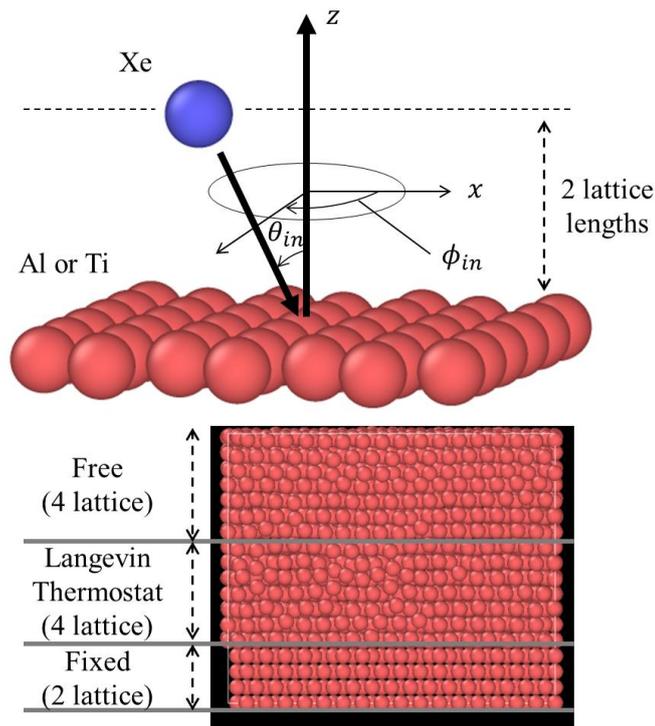


Figure 3.1. Schematics, created through the Open Visualization Tool (OVITO)[98].

3.2 表面欠損と照射フラックス

イオン照射によって表面がスパッタされ、原子レベルでの欠損が生じる。表面欠損の具合は照射フラックスによって異なる。本研究では $0.04 \text{ atom}/\text{\AA}$ の照射フラックスによって生じる表面欠損の影響を計算に含むため、入射粒子の位置は乱数を用いて決定している。表面欠損の影響を考慮しない場合、金属結晶表面は規則性があるため最小の繰り返し単位の中で生じる位置の違いが結果に与える影響を調査すればよい。ここで Al ターゲットの場合、面心立方格子の $\{111\}$ 面の繰り返し単位は Figure 3.2 に示す三角形であり、 x_m, y_m がそれぞれ 2.52 \AA , 1.46 \AA である。また方位角 φ は 30 度である。そこで、Xe が衝突する位置を x 方向、および y 方向に 0.1 \AA 刻みで 25 ステップ、 15 ステップ、さらに方位角を 1 度ずつ 30 度まで移動させ、各位置で反射粒子の分布を計算した。その際、金属表面は都度新しくし、表面欠損の影響を含まないようにした。計算は Xe の入射角度が 45 度の条件で実施した。このように照射位置を逐一更新して計算した結果を米印で Figure 3.3 に示す。また照射フルエンス $0.04 \text{ atom}/\text{\AA}^2$ の条件で生じる表面欠損の影響を考慮した計算結果を丸で示してい

る. さらに, 衝突位置は乱数を用いて不規則に与え, 金属表面は 1 回の照射のたびに更新した計算結果を四角で示す. 金属表面を都度更新して表面欠損の影響を考慮しなかった場合, 分布は照射位置を乱数で決定した場合と逐一刻んだ場合では反射粒子の分布は同じような散乱分布形状を示した. 一方, 表面を都度更新しない場合, 反射粒子の分布は入射方向側に広がりを持つようになる. この表面欠損による広がり, 反射粒子のサンプリングを十分に行うことで再現性があることを確認している. 本研究では $0.04 \text{ atom}/\text{\AA}^2$ の照射フルエンスとして 100 個の Xe 粒子が衝突, 反射し, これを 100 回以上繰り返して 10000 以上のサンプルを取得している.

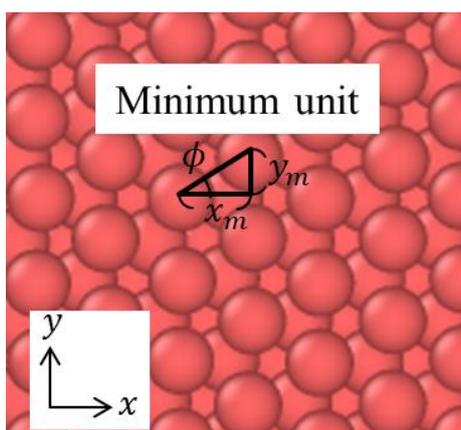


Figure 3.2. Minimum unit of $\{111\}$ plane of Al target.

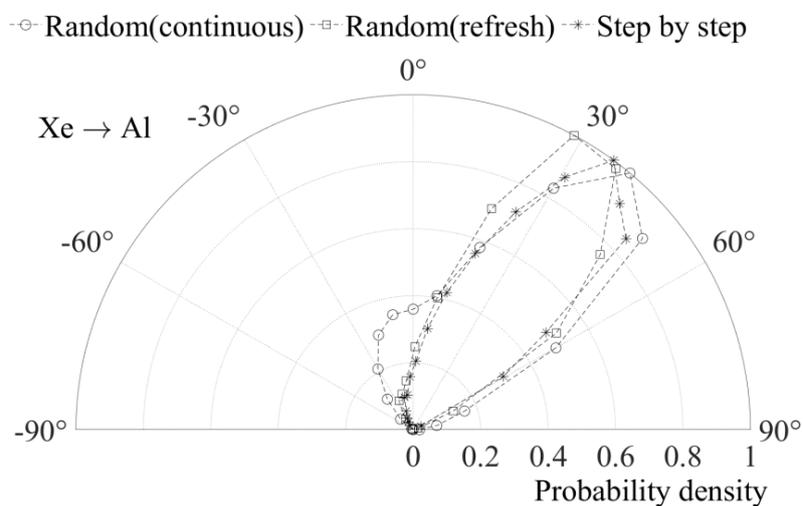


Figure 3.3. Polar probability density distribution of reflected xenon at 300 eV incidence. The incident angle $\theta_{in} = -45^\circ$.

次にホールスラスタを作動させたときのイオンの照射フラックスを考える。6 kW クラスのホールスラスタを作動電圧 300 V で動作させて計測したプルーム電流密度のピーク値はおよそ 10 mA/cm^2 である[99]。すべてのイオンが一価イオンであると仮定すると、これはイオンの照射フラックス $6.24\text{E}+2 \text{ atom/\AA}^2/\text{s}$ となり、本計算領域内でのイオンの平均粒子衝突時間間隔は 7000 ps となる。本研究では 2 ps の衝突時間間隔で衝突現象を単独の事象として取り扱っており、これは 7000 ps と比べて十分に短い間隔であるため妥当である。なお、本計算では 2 ps の時間間隔で 100 個のイオンを打ち込んだ際にフルーエンスが 0.04 atom/\AA^2 になるため、これはイオンの照射フラックスにすると $2.0\text{E}+10 \text{ atom/\AA}^2/\text{s}$ となる。

次に、長時間のイオン照射による影響、つまり、照射フルーエンスの増加による影響を考える。Figure 3.4 は 300 eV の Xe^+ を Al ターゲットに垂直入射させる計算で得られたスパッタ率と照射イオンの合計数の関係を示している。照射イオンが 100 個の時、照射フルーエンス 0.04 atom/\AA^2 である。スパッタ率は照射イオンが 80 個を超えたところから一定の値に収束している。また、Figure 3.5 に照射イオンの数の増加と Al ターゲットの形状変化を示す。表面には連続的なスパッタリングによって生じる欠損や付着原子が見られる。このような表面欠損や付着原子はスパッタ率やイオンの軌道に影響を与えることが知られている[100], [101]。本計算では照射フルーエンス 0.04 atom/\AA^2 の条件下で起きるターゲット原子のスパッタリングによって生じる表面欠損や付着原子の影響が計算結果に含まれている。また、Figure 3.4 より、照射フルーエンス 0.04 atom/\AA^2 以上の条件でもスパッタ率が変化しないことから、本研究で構築するモデルは定常的なイオン照射の状態に適用可能であると想定できる。なお、ターゲットの内部に不純物が含まれている場合や、比較的大きな欠損がある場合は反射粒子の挙動に影響を与えることが予想されるため、そのようなターゲットを用いる場合はこれらをモデル化した検討が必要である。

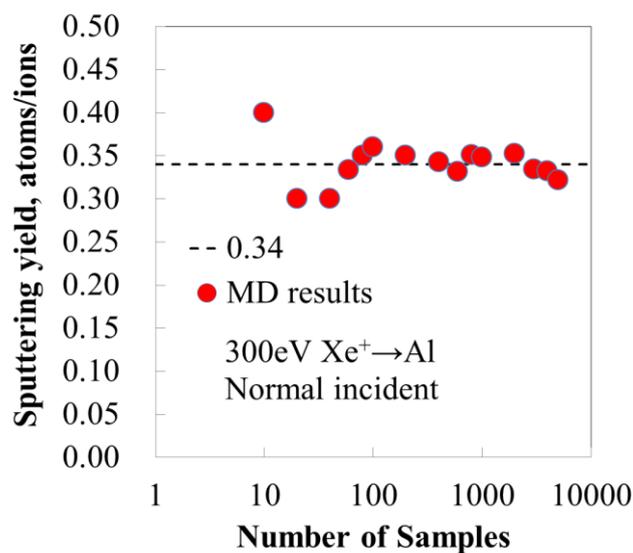


Figure 3.4. Sputtering yield vs number of samples. The 100 samples correspond to the fluence of $0.04 \text{ atom}/\text{\AA}^2$.

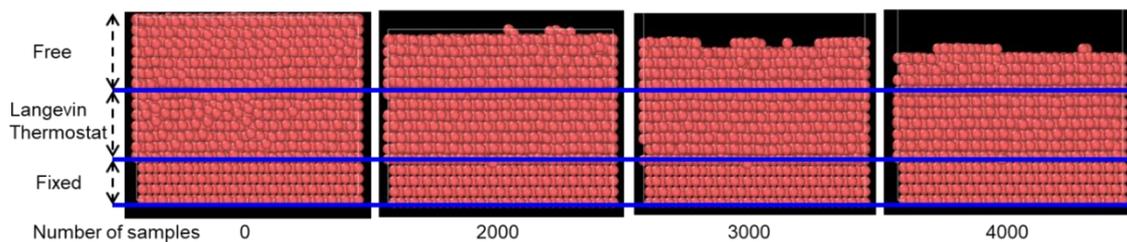


Figure 3.5. History of Al target during subsequent sputtering of $300 \text{ eV Xe}^+ \rightarrow \text{Al}$ normal incidence.

3.3 Xe イオンの金属ターゲット表面での反射分布評価

ホールスラストの代表的な作動電圧である 300 V で加速された Xe^+ に対象を限定し、 300 eV の入射エネルギーをもつ Xe^+ が Al, Ti ターゲットへ衝突した際に生じる Xe 反射粒子の運動を MD で計算した. 計算で得られた Xe 反射粒子の散乱確率密度分布を Figure 3.6 に示す. 入射角度 θ_m は 0 度の時ターゲットに垂直入射であり, 90 度の場合にターゲットに平行に入射である. 分布図のコンターは入射角度ごとに反射粒子が運ぶ全運動エネルギーを表しており, 入射フラックスの全運動エネルギーで規格化されている.

どちらのターゲットの場合も反射粒子の分布には入射角度依存性がある。入射角度が 60 度以上の広角入射の場合は反射粒子の分布のピークの角度は軸対称、つまり鏡面反射の位置にある。一方、30 度以下の狭角入射の場合は垂直入射とほぼ変わらない分布を示し、ピークもターゲットに垂直となる。30 度から 60 度の間は遷移領域となっており、Al と Ti で広がり方やピーク位置が異なっている。Al の場合は入射角度 45 度でも鏡面反射方向に分布が広がっているが、Ti の場合は拡散的である。

また反射粒子の全エネルギーは広角反射の場合には 5 割以上が保存されているのに対し、狭角入射の場合はそのほとんどが失われている。Al の場合の方が Ti の場合と比べて反射によるエネルギー損失が少ない。

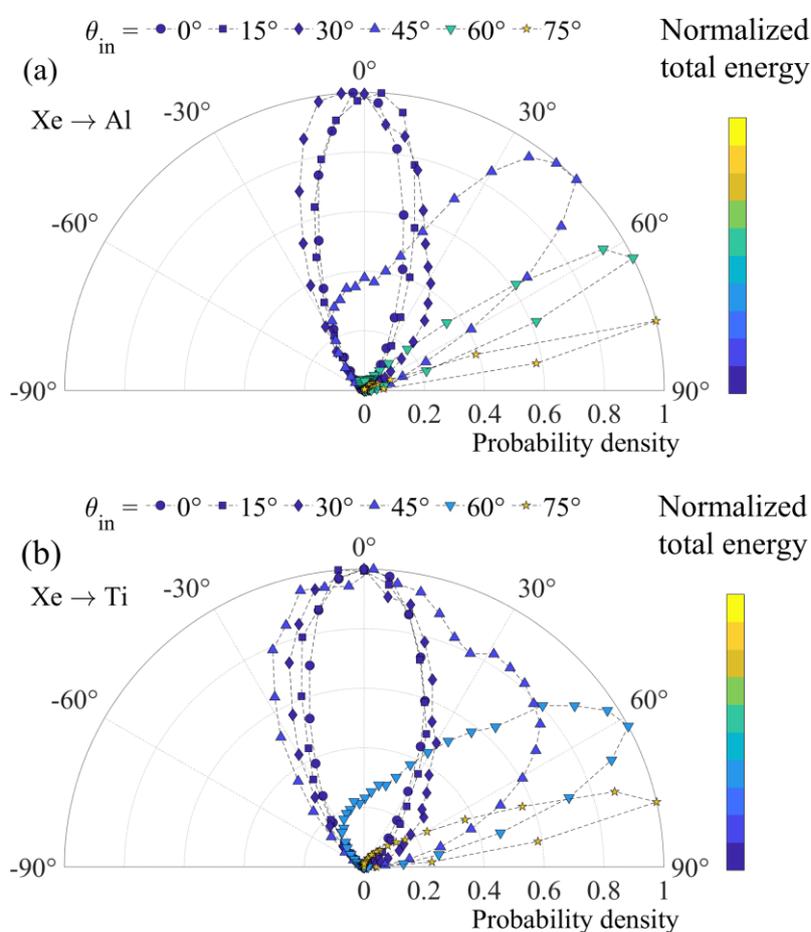


Figure 3.6. Polar probability density distribution of reflected xenon at 300 eV incidence. (a) Al target and (b) Ti target. The normal incident case corresponds to $\theta_{in} = 0^\circ$. The color of each plot represents the total energy carried by the reflected particles for each θ_{in} and is normalized by the total energy of the incident particles.

反射粒子の軌道を調査したところ、広角入射と鋭角入射の場合では、支配的な反射メカニズムが異なることが確認された。Figure 3.7 に二つの異なる反射軌道の例を示す。(a)が広角入射の場合に支配的な反射である。入射粒子は固体表面から内部に侵入することなく、入射前の情報を保存して反射する鏡面反射に近い。一方、(b)は狭角入射の場合に支配的な反射である。入射粒子はターゲット表面の原子を押し分けて固体表面層より下に進み、押し返されて反射する。その際、エネルギーと方向の情報は失われている。この二つの反射のバランスによって反射粒子の分布が決まっている。なお 300 eV の条件では Al と Ti とも入射粒子が固体内部に侵入して滞在する挙動(いわゆるイオン注入)は 0.5%以下であった。

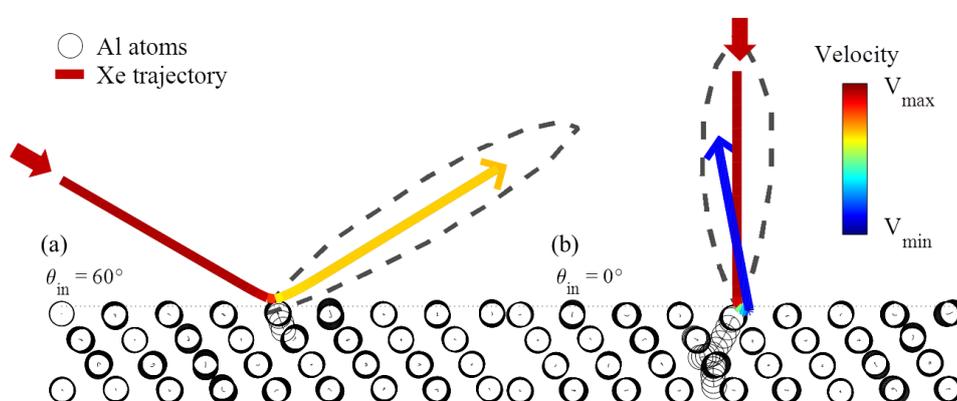


Figure 3.7. Two types of reflection trajectories. (a) Wide-angle incident case and (b) narrow-angle incident case. The color bar shows the projectile velocity normalized by initial velocity at 300 eV. The Al target atoms were thermally fluctuating at 300 K.

3.4 拡張 CLL モデルによる再現

拡張 CLL モデルに必要な 3 つのパラメータの算出は、散乱確率密度分布およびエネルギー分布に対するフィッティングによって取得する。Al ターゲットにおける垂直入射のデータに対してフィッティングした例を示す。Figure 3.8 は散乱確率密度分布図、Figure 3.9 は反射粒子のエネルギー分布図である。散乱確率密度には CLL モデルで適応係数が 1 の場合の拡散分布を比較として示している。MD の結果は拡散分布より中心軸に集中した葉状分布を示している。エネルギー分布をみると、MD で計算された値は 3.58 eV にピークをもって分布している。拡張 CLL モデルで Xe 反射粒子の MD 計算結果を最もよく再現するパラメータとして、適応係数 α_t , α_n についてそれぞれ 0.987, β について 0.998 という値が得られた。

これらのパラメータを得るためのフィッティングはまず 2 つの適応係数を散乱確率密度の中心線、およびエネルギー分布のピーク位置が拡張 CLL モデルのフィッティングカーブと一致するように推定し、 β によって両者の幅を合わせるという手順で取得している。垂直入射の計算では入射エネルギー $300 \text{ eV} \pm 30 \text{ eV}$ の範囲で同じフィッティングパラメータが得られている。

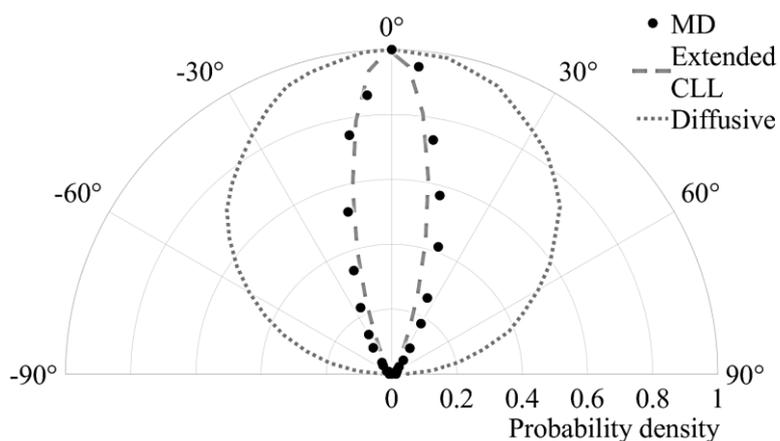


Figure 3.8. Comparison between the MD simulation (circle) and extended CLL model (dashed line) in the polar probability distribution obtained for an Al target with a normal incident. The cosine distribution of the diffusion reflection is also shown as a reference.

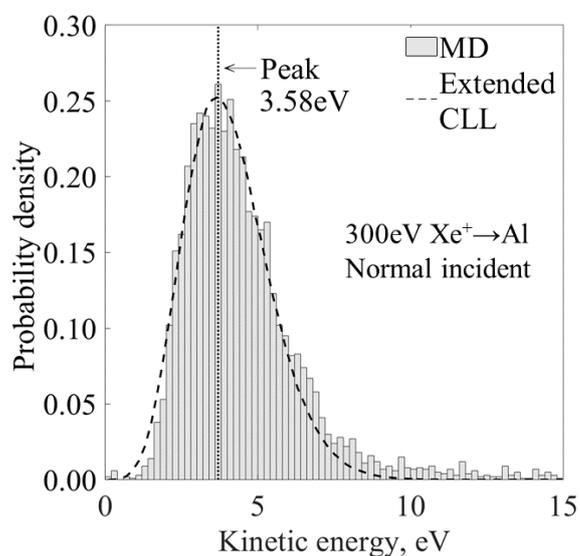


Figure 3.9. Kinetic energy distributions from MD simulation (box) and extended CLL model (dashed line) in the case of Al target with normal incident.

Al と Ti ターゲットの両方について、すべての入射角度について同様のフィッティングを行い、得られた3つのパラメータを Table 3.1 および Table 3.2 にまとめる。また散乱確率密度分布とエネルギー分布について、それらのパラメータを用いて拡張 CLL モデルによって計算された分布と MD 計算結果との差分を分布のピーク位置および半値全幅 (Full Width at Half Maximum, FWHM) で示している。Ti の入射角度 60 度の条件では MD で計算されたエネルギー分布は広範囲に広がり、ピークが一つではなかった。そのため、この条件のみ、エネルギー分布のピークの代わりに反射粒子が運ぶ全運動エネルギーをフィッティングの指標とした。Al ターゲットと比べて、Ti ターゲットの場合ではエネルギー分布の広がりにおいて拡張 CLL モデルと MD 計算結果の差が大きい。また Figure 3.10 および Figure 3.11 は、Al および Ti ターゲットにおける反射 Xe の散乱確率密度の2次元等高線図である。図中の半径軸は極角 $\theta = 0^\circ \sim 90^\circ$ を、円周軸は方位角 $\varphi = 0^\circ \sim 360^\circ$ をそれぞれ表している。拡張 CLL モデルは MD 計算結果の3次元分布を概ね再現していることがわかる。

Table 3.1. Three parameters obtained in the case of Al target with respect to the incident angle.

Incident angle, deg	α_t	α_n	β	Reflection angular distribution, deg				Kinetic energy distribution, eV			
				Peak		FWHM		Peak		FWHM	
				MD	Ext. CLL	MD	Ext. CLL	MD	Ext. CLL	MD	Ext. CLL
75	0.050	0.220	0.980	77.3	77.3	8.9	5.3	283.3	283.8	13.7	35.7
60	0.364	0.330	0.950	61.1	61.1	16.5	13.7	195.8	195.8	65.7	104.9
45	0.990	0.986	0.996	37.5	37.5	41.5	42.9	3.8	3.8	3.6	5.6
30	1.000	0.984	0.996	0.5	0.5	48.3	42.7	4.3	4.3	3.5	5.7
15	1.000	0.987	0.998	0.7	0.7	47.8	52.2	2.3	2.3	2.2	3.1
0	0.987	0.987	0.998	0.0	0.0	32.1	29.0	3.6	3.6	4.4	4.6

Table 3.2. Three parameters obtained in the case of a Ti target with respect to the incident angle. In the case of 60°, the kinetic energy distribution shows a broad distribution, so the fitting was conducted using the total energy of the reflected particles as an indicator rather than the peak.

Incident angle, deg	α_t	α_n	β	Reflection angular distribution, deg				Kinetic energy distribution, eV			
				Peak		FWHM		Peak		FWHM	
				MD	Ext. CLL	MD	Ext. CLL	MD	Ext. CLL	MD	Ext. CLL
75	0.080	0.200	0.86	75.1	75.1	15.0	13.3	277.8	278.3	31.2	114.6
60	0.780	0.880	0.86	54.2	54.2	42.2	47.5	Broad	69.8	Broad	128.5
45	0.999	0.991	0.992	16.2	16.2	98.5	76.2	2.8	2.8	2.6	5.0
30	1.000	0.992	0.996	0.4	0.4	55.8	56.2	2.3	2.3	2.4	3.7
15	1.000	0.994	0.997	0.7	0.7	47.8	52.2	2.3	2.3	2.2	3.1
0	0.993	0.993	0.998	1.1	1.1	44.2	40.6	2.3	2.3	2.3	3.1

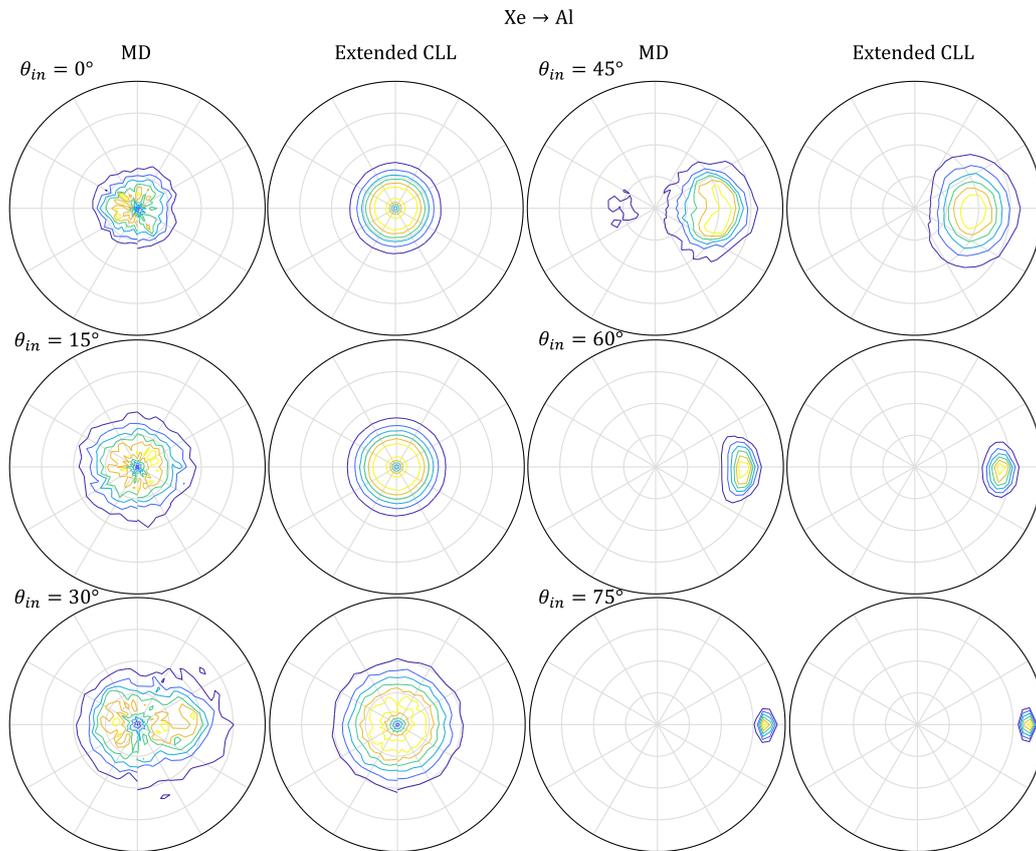


Figure 3.10. Contour plot of probability distribution of reflected xenon for 300 eV Xe irradiation of Al. Xe was irradiated from the left-hand side of the circle.

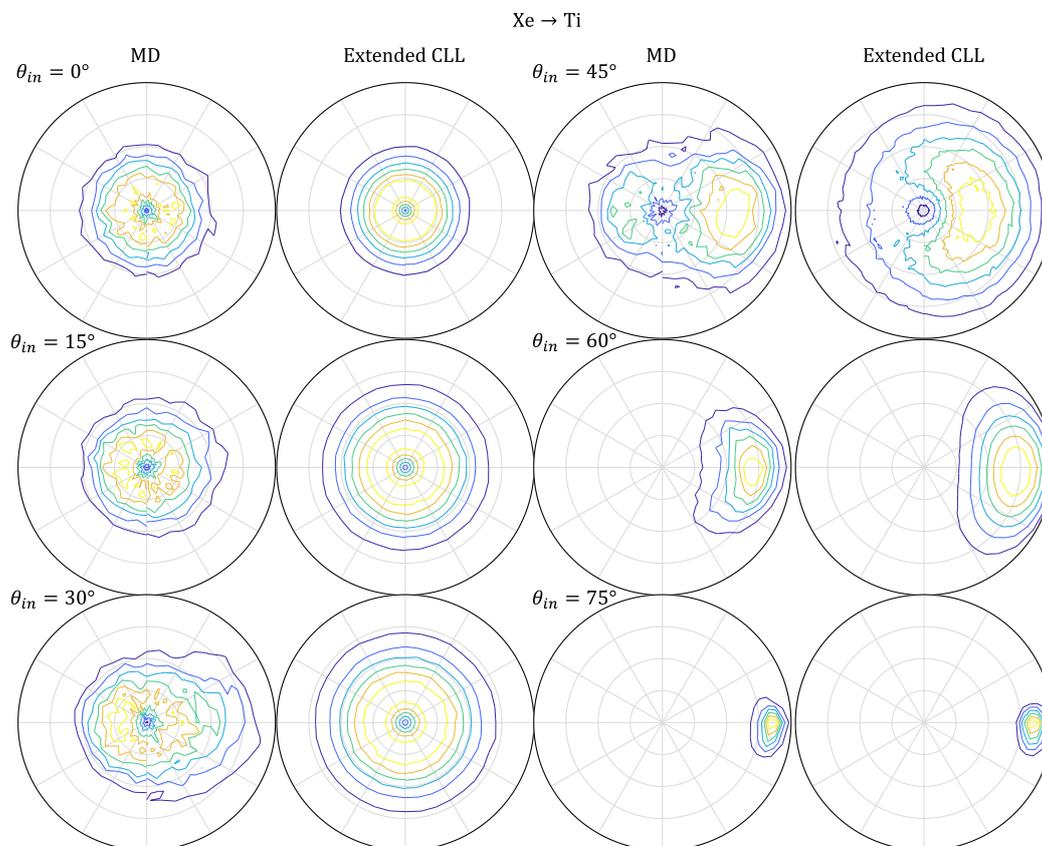


Figure 3.11. Contour plot of probability distribution of reflected xenon for 300 eV Xe irradiation of Ti. Xe was irradiated from the left-hand side of the circle.

3.5 表面粗さのモデル化

スパッタ率の先行研究では、Ti ターゲットは低エネルギーXe イオン衝突時のスパッタ率の入射角依存性がAlターゲットに比べて強いことが報告されている。また、機械的に研磨されたTiターゲットの連続スパッタリング後の表面構造を走査型電子顕微鏡で観察したところ、数10 μm の凹凸が生じることが確認されている[102]。なお同様の実験でMoの表面をスパッタリング前後で比較すると、スパッタリングによってむしろ凹凸が減少していることが確認されている。以上のことから、特にTiターゲットの場合には、表面の凹凸の影響を考慮する必要があると予測される。実用的なイオンのビームターゲット表面反射モデル構築のためには、連続的なスパッタリングによって生じる表面粗さの影響を考慮する必要がある。

表面粗さを考慮する方法として、金属表面の凹凸により入射粒子が衝突するターゲット表面の角度が変化するモデルを考案した。金属表面でのイオン反射についてMD計算結果を検証するのに十分な実験データがないため、イオン反射と同様の原子間相互作用で発生するスパッタリングを代表する指標であるスパッタ率を検証データとして選定した。Figure 3.12は横軸にXeの入射エネルギー、縦軸にスパッタ率を示している。表面粗さを考慮したMDシミュレーションでは、表面粗さを代表する表面角度の幅を $\pm 30^\circ$ と仮定し、入射粒子の方位角を $0\sim 360^\circ$ の範囲で、極角を $-30^\circ\sim 30^\circ$ の範囲でランダムに抽出して与え、極角に応じて座標軸を傾けることで、表面の角度が変化する様を模擬した。

比較として、山村ら[60]によって構築された半経験則と実験結果(Rosenbergら[103]によって測定されたAlに関するデータとTartzら[102]によって測定されたTiに関するデータ)をそれぞれ記載した。実験データはXeイオンをビームターゲットに垂直入射した実験で取得されたものであり、半経験則はそれらのデータをもとに構築されている。Alの場合、250 eV以上のエネルギーでは、垂直入射時のMD計算結果と実験との差は10%以下であり、傾向は一致した。Tiの場合、Alの場合よりも実験との差が大きかった。Alターゲットでは表面粗さモデルを追加した場合のスパッタ率は10%未満の増加にとどまり、その傾向は変化していない。一方、表面粗さモデルを追加したTiターゲットの計算結果ではスパッタ率が約2倍に増加し、実験データに大きく近づくことが確認された。よってTiターゲットの場合、連続的なスパッタリングによって生じる表面粗さは $\pm 30^\circ$ の表面角度のばらつきを与えることでモデル化できる。

また、表面粗さを上記手法でモデル化したTiターゲットに300 eVの入射エネルギーでXeが衝突した場合の散乱確率密度分布図を、拡張CLLモデルを用いて計算した。結果をFigure 3.13に示す。拡張CLLモデルに必要なパラメータはTable 3.2のものを使用した。Figure 3.6の表面粗さを考慮しないTiターゲットの場合と比較し、分布はより拡散的で、反射後の粒子が運ぶエネルギーも小さくなっていることがわかる。

なお, Al, Ti とも 200 eV 以下の入射エネルギーではスパッタ率は実験及び半経験則から大きく外れる. これは, 200 eV 以下の低エネルギー領域での相互作用を計算するためには, ZBL と EAM をスムーズに接続するポテンシャルモデルが必要とされているが[56], 本研究ではそのようなポテンシャルモデルは使用していないためである.

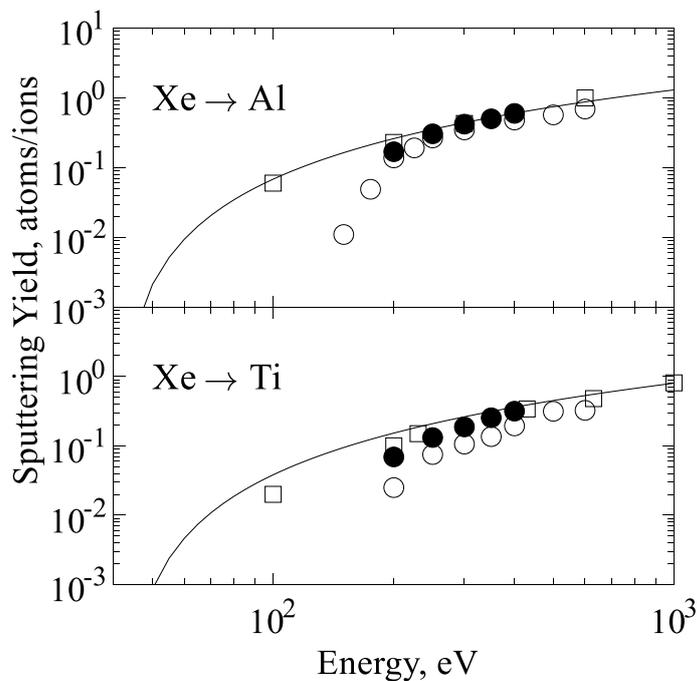


Figure 3.12. Comparison between simulated and experimental sputter yields on Al and Ti targets. MD simulation with normal incidence (open circle), MD simulation with 0°–30° incidence (closed circle), experiment (square)[102][103] and Yamamura’s semi-empirical model (line).

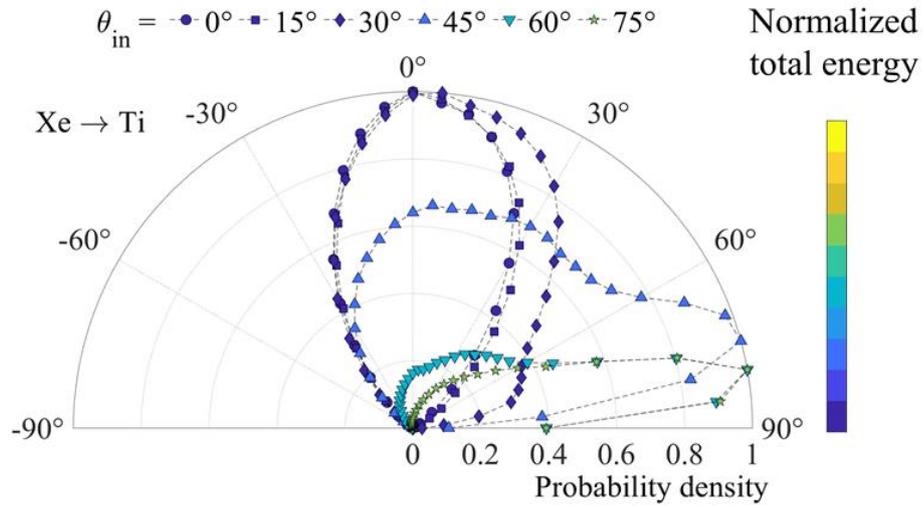


Figure 3.13. Polar probability density distribution of reflected xenon at 300 eV incidence calculated by extended CLL model. The surface angle is given a random variation in the range of $\pm 30^\circ$. The color of each plot represents the total energy carried by the reflected particles for each θ_{in} and is normalized by the total energy of the incident particles.

3.6 まとめ

本章では金属表面でのイオンの反射プロファイルを取得する分子動力学計算 (MD) を構築して 300 eV 相当の Xe イオンが Al および Ti ターゲットに入射した際の反射粒子特性を計算し、以下の結論を得た。

- 反射した Xe の散乱確率密度分布は拡散反射より指向性のある葉状分布を示し、ビームターゲット材質に依存して分布が変化する。Al と Ti を比較すると、Ti の場合の方が反射した Xe の分布はより拡散的である。
- Xe の反射特性は Xe の入射角度に依存し、狭角入射と広角入射で異なる反射メカニズムを示す。Al の場合は 45 度以上、Ti の場合は 60 度以上で反射粒子の分布は鏡面反射方向に広がり、角度が大きいほど運動エネルギーが保存され分布は狭く鏡面反射的になる。30 度以下の狭角入射では Al, Ti とも反射粒子の分布は入射角度によらず垂直方向に広がる。
- CLL モデルに対して、入射粒子の運動エネルギーが反射温度に変換される効果を取り入れた拡張 CLL モデルを用いると、反射粒子の 3 次元分布が MD 計算結果を良く再現することができる。
- 連続的なイオン照射後に生じる数 10 μm 程度の表面粗さをモデル化することで、特に Ti ターゲットの場合に分子動力学計算で計算されたスパッタ率が大きく実験値に近づく。またこの時、Ti ターゲットで反射した Xe の分布はより拡散的となる。

以上より、ビームターゲット表面で反射した Xe の反射特性が明らかになり、拡張 CLL モデルによって DSMC などの粒子計算で反射粒子の挙動を再現することが可能となった。また、ビームターゲットを反射板として使用し、反射粒子を誘導するためには、反射粒子の軌道が拡散的となる Ti よりも、より指向性の強くなる Al の方がビームターゲットの材質として相応しい。

本章で得られた研究成果は参考文献[104]にて発表される。

第4章 クライオポンプのポンプ係数の粒子流入角度依存性評価

ビームターゲットによってクライオポンプに粒子を誘導する際、クライオポンプの排気特性と粒子流れの関係が明らかになっていないと、ビームターゲットによる誘導効果を最大化できない。電気推進機の試験設備で広く用いられている 2 段型クライオポンプは、その構造上、排気性能が粒子流れに対して依存性を持っていることが予測される。そこで本章では一般的な 2 段型クライオポンプをモデル化し、クライオポンプの排気性能に関連するポンプ係数を解析的に求める。また、クライオポンプによって排気されるチャンバ内部の圧力計測実験により、解析的に求めたポンプ係数を評価する。

4.1 クライオポンプ内粒子軌道解析モデル

クライオポンプとは、真空容器内に極低温面を設置し、これに容器内の気体分子を凝縮または吸着させて捕捉し、排気する真空ポンプである。機械的な可動部分が少なく、油等を使わないため、クリーンで高い真空をつくることができる。そのため電気推進の実験に使われる真空槽では広く使われている。典型的なクライオポンプは、異なる温度で運転される 2 段のステージで構成される。2 段型クライオポンプの構造概略を Figure 4.1 に示す。1 段目は、クライオポンプの入口開口部に設置されたバップルおよび外側のクライオパネルで構成され、通常約 80 K に冷却されている。水蒸気はこれらのパネル上に凍結するが、電気推進の推進剤として広く使用されている Xe などの希ガスは凍結されない。2 段目は内側のクライオパネルと活性炭の吸着塔で構成され、約 10-20 K に冷却される。2 段目の表面に到達する Xe は、ステージの温度が 20 K を超えない範囲内に維持される限り、ほぼ 100% 凝縮されるとみなされる。したがってクライオポンプに流入した Xe 粒子がどの程度凝集されて排気されるかを表すポンプ係数 ϵ は、1 段目を通過して 2 段目に到達した粒子と、2 段目で凝縮されずに出ていく粒子の比と置くことができる。

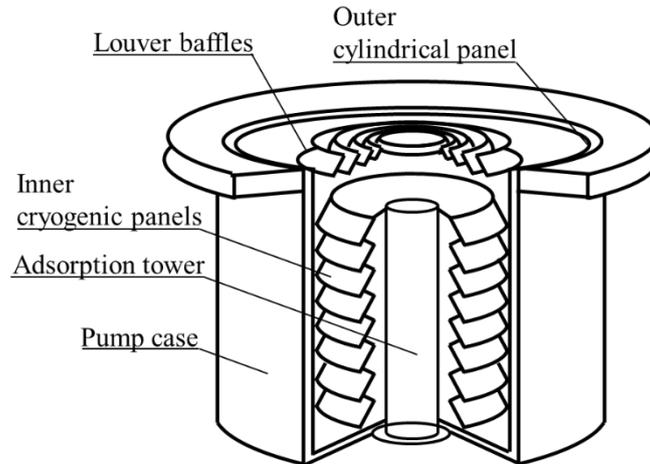


Figure 4.1. Cross-sectional image of two-stage cylindrical cryopump.

数値解析で係数 ϵ を算出するため、クライオポンプ内部の粒子の軌道を3次元で解析した。Figure 4.2 にクライオポンプのモデルの断面図を示す。ここでは2段軸対称の形状を想定した。1段目は円環状のバッフルからなり、バッフルの数はクライオポンプによって異なる。ここでは12枚のバッフルを想定した。1段目のバッフルおよびポンプ外壁の温度は80 Kとした。2段目は、15 Kに冷却された吸着塔を想定している。この領域に到達したXeはすべて凝縮されて排気されるため、計算からは除外される。

クライオポンプを設置した設備では、再生を促進するためにゲートバルブが設置されているものもある。その場合、クライオポンプの上流にダクトとして円筒状の空間が設置され、クライオポンプまでのコンダクタンスが増加して排気速度が低下する。ダクトによるコンダクタンスの増加がポンプ係数に与える影響を調査するために、クライオポンプの上に長さ l_d のダクトセクションを設け、 l_d を計算パラメータとした。モデルの長さはクライオポンプ半径 r_p を基準として設定しており、相似形状のクライオポンプに対して適用可能である。

計算粒子はクライオポンプ入り口付近に一様に分布させ、軸方速度と径方向速度をそれぞれ与えた。周方向速度は与えず、クライオポンプ上流から一様に粒子が流れ込む状態を模擬している。クライオポンプの内部は、第2段の温度が約20 Kに維持される限り高真空状態であるためと考えられるため、非衝突を仮定した。バッフルや外壁で拡散し、クライオポンプの入り口に戻った粒子は計算から除外した。クライオポンプに流入させた粒子の数と2段目で除外された粒子の数の比を ϵ とし、流入粒子の軸方向速度と径方向速度の角度に対する依存性を調査した。ここで流入角度は $v_z : v_r$ を1:0としたときに0度とし、 $v_z : v_r$ を0:1としたときに90度とする。

本計算に使用したマクロ粒子の数は250,000個である。時間ステップは 10^{-4} 秒とし、2段

目の吸着塔で除去された粒子に対する計算ごとのばらつきは±1%であった。

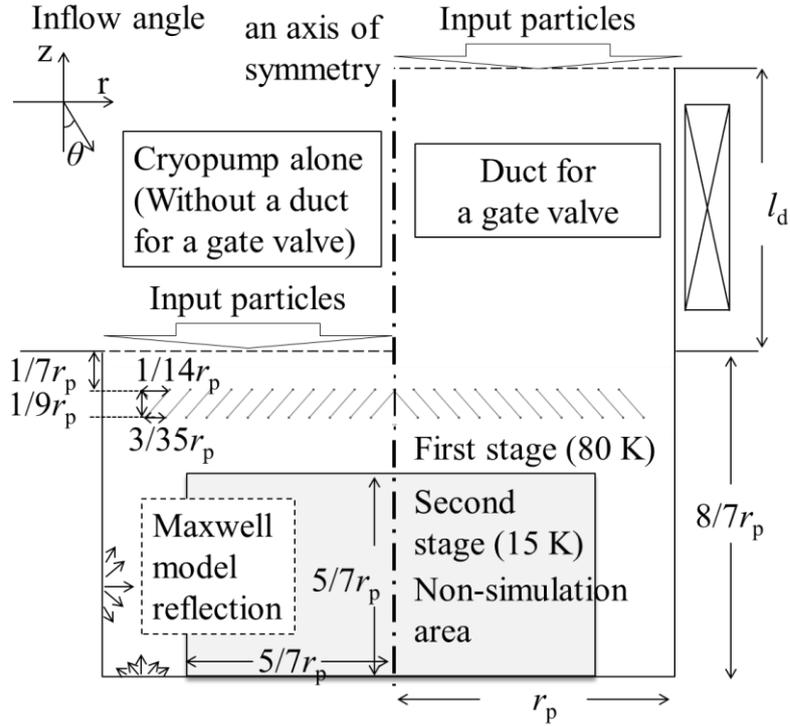


Figure 4.2. 3D simulation model of the axisymmetric two-stage cylindrical cryopump.

計算されたクライオポンプの流入角度依存性を考慮したクライオポンプの排気性能は、クライオポンプへの流入ガス流束の流入角度分布に $\epsilon(\theta)$ を乗じた値を積分して求めた ϵ_{total} で代表して表すことができる。流入ガス流束の流入角度分布は、クライオポンプ面積、ガスの発生源とクライオポンプの位置関係、ガス流速の初期分布、ガス流速のクヌーセン数に依存する。ここで、チャンバ壁面との衝突や粒子間の衝突が多く、完全に熱平衡化したガスがクライオポンプに流入する場合について考える。クライオポンプ面への流入ガス流束密度 Γ は、速度分布関数 f 、数密度 n 、ガスの粒子速度のうちクライオポンプ表面に垂直な成分 v_{\perp} を用いて

$$\Gamma = \int \int v_{\perp} n f dv_x dv_y, \quad (4.1)$$

で与えられる。軸対称のクライオポンプに流入角度 θ でガスが流れ込む場合、(4.1)式を円筒座標系に変換して θ の関数にすると

$$\Gamma(\theta) = \int \int v \cos \theta n f v^2 \sin \theta dv d\varphi, \quad (4.2)$$

と Γ は θ の関数に変換できる。本計算モデルではクライオポンプは軸対称なため、流入粒子束 ϕ_{inflow} は角度 φ には依存せず、クライオポンプ表面積 S を用いて

$$\phi_{inflow}(\theta) = S\Gamma(\theta) = Sn \sin 2\theta \int v^3 f dv, \quad (4.3)$$

したがって、熱平衡化したガス流束の流入角度分布は $\sin 2\theta$ の関数として与えられる。

4.2 ポンプ係数の流入角度依存性

計算で求められたポンプ係数の流入角度依存性を Figure 4.3 に示す。横軸は粒子の流入角度である。ダクトがない場合の計算結果を菱形で、長さ r のダクトが取り付けられている場合の計算結果を円で示している。モデルは完全な円筒軸対称のため、流入角度 0 度から -90 度は 0 度で対称の結果となる。ここで、粒子の流入角度が 90 度の場合にはクライオポンプ入口面に対して流入粒子の軌道が平行し、粒子はクライオポンプ内部に入らない。図中の横軸 90 度の値は流入角度を 89.9 度として計算した値を示している。

ダクトがない場合、流入角度が 0 度から 40 度まではポンプ係数はほぼ一様となり、40 度より大きい流入角度ではポンプ係数が小さくなる。これは角度がつくほど粒子が外壁に衝突し、クライオポンプ内部の吸着塔に到達する確率が低くなるためである。またダクトを追加した場合、ポンプ係数の流入角度依存性が変化し、より低い角度にピークを持つようになる。これは粒子の流入口からクライオポンプまでの間の空間が、流れを整流する働きをした結果と考えられる。

次に、ダクト長さが ϵ に与える影響を調査した。ダクト長さを $0, 3/7 r, 5/7 r, r$ と変えて $\epsilon(\theta)$ を計算し、式(4.3)を乗じて得られた熱化粒子の粒子束に対する ϵ_{total} を Figure 4.4 に示す。この結果から、 ϵ_{total} はクライオポンプ前面のダクト長さに比例して直線的に減少していることがわかる。長さ r のダクトを設置した場合、 ϵ_{total} は 0.55 であり、またダクトを設置していない場合の ϵ_{total} は 0.70 であった。これはダクト長さが長くなるほど、 $\epsilon(\theta)$ の流入角度依存性が強くなることに起因している。Table 4.1 に流入角度 θ が 90 度の時、および 0 度の時の ϵ とダクト長さの関係をもとめた。ダクト長さが長くなればなるほど、 $\epsilon(90)$ は減少し、 $\epsilon(0)$ は増加する。

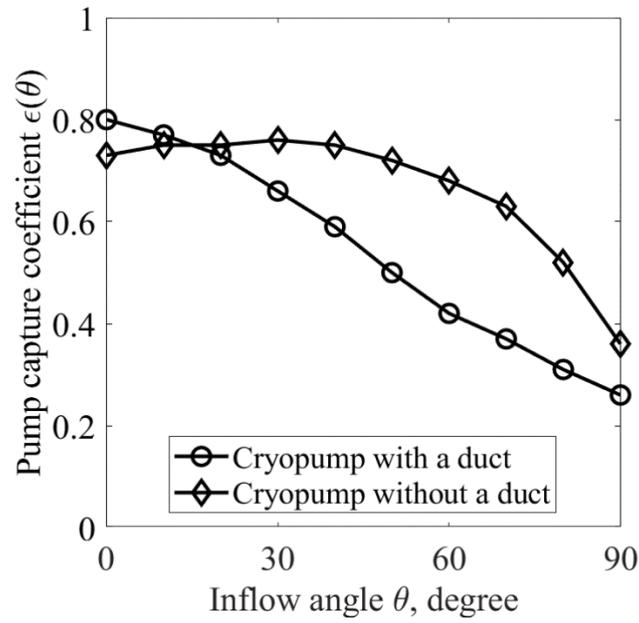


Figure 4.3. Calculated inflow-angle dependent pump sticking coefficients $\epsilon(\theta)$ for a cryopump without a duct and with a duct. The length of the duct is r_p .

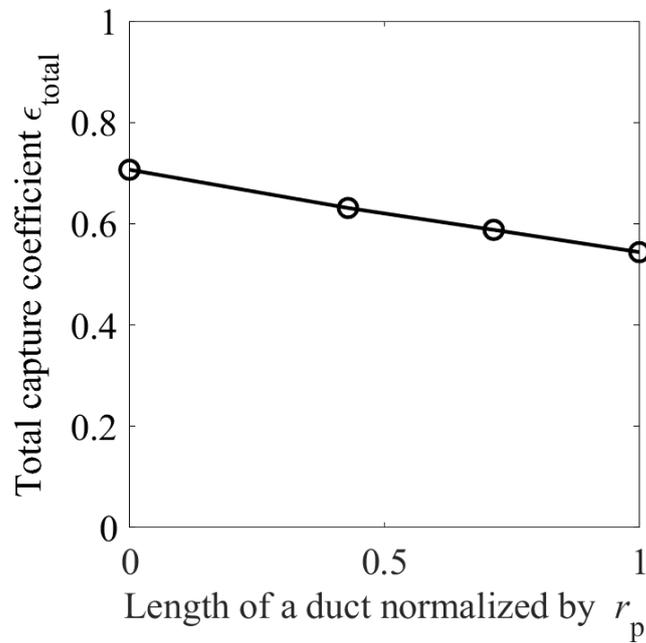


Figure 4.4. Calculated total capture coefficient with different duct length.

Table 4.1. Capture coefficients for different duct lengths.

Duct length	0	$3/7 r$	$5/7 r$	r
$\epsilon(90)$	0.36	0.30	0.29	0.26
$\epsilon(0)$	0.73	0.78	0.79	0.80
ϵ_{total}	0.55	0.59	0.63	0.70

4.3 ポンプ係数の検証

4.2 節での議論により、ポンプ係数 ϵ は流入角度依存性を持ち、流入するガス流束の流入角度分布がわかれば ϵ_{total} で代表できることが示された。ポンプ係数の評価は、そのクライオポンプによって真空引きされたチャンバ内部圧力と、流入させたガス流量との関係によって評価される。ここでは、クライオポンプによって排気されたチャンバ内に常温の Xe ガスを流して計測した圧力から ϵ_{total} を算出し、4.2 節で得られた数値計算結果の検証を行う。なお、ポンプ係数の流入角度依存性そのものを評価するには一様な流入角度を持ったガス流束がクライオポンプに流入する状態を実験で再現する必要があるが、本研究ではそのような実験は実施していない。

4.3.1 チャンバ圧力分布計測実験系

電離真空計を用いて、 $\varnothing 2.0 \text{ m} \times 3.0 \text{ m}$ のチャンバ内の圧力分布を計測した。実験系概略図を Figure 4.5 に示す。チャンバには直径 30 インチ、22 インチの円筒型クライオポンプ (ULVAC 製 U30H, U22H) が 1 台ずつ左右に取り付けられている。それぞれのクライオポンプは同じ構造を持っており、またそれぞれクライオポンプ直径と同程度の長さを持つダクトを介してチャンバに取り付けられている。チャンバは 2 台の神港精機社製油回転ポンプ SR-30BII と神港精機社製メカニカルブースターポンプ SMB-5000 を用いて粗挽きした後、2 台のクライオポンプによって真空引きされる。ガスを流さない状態のチャンバの到達圧は 10^{-4} Pa 以下である。圧力分布の計測には、BA 型の電離真空計 (ULVAC 製 GI-TL3RY, 測定子 WIB-G5) を使用した。直径 23 mm のステンレス配管に電離真空計の粒子流入口を取り付け、チャンバ内に設置した株式会社日本シード研究所製 2 軸ステージ上に設置した。2 軸ステージはチャンバの半径方向のトラバースと軸方向のトラバースから構成されており、それぞれ 1000 mm, 1200 mm の移動範囲を持つ。各トラバースは移動速度を 10, 20, 30 mm/s から選択して指定することが可能である。各トラバースにはエンコーダが設置してあり、ステージの半径方向位置、軸方向位置それぞれについて 0.1 mm 単位で出力する。2 軸ステージに設置された電離真空計の写真を Figure 4.6 に示す。電離真空計はケーブルの振動に敏感なため、ケーブルの取り回しには細心の注意が必要である。本実験ではケーブルはステージに

用意されたケーブルベアに固定し、移動速度 10 mm/s で電離真空計を移動させて、前後で電離真空計の信号に差が出ないことを確認している。

チャンバ中心軸上の静圧を測定するために、電離真空計の入口を-x 方向に向けて設置した。電離真空計は電離真空計内部と周囲の圧力が同じになるまでに時間を要するため、空間分布を取得する際には各計測点で 2 分程度の静定時間を設けた。中心軸から半径方向 0.1 m の軸上で、ガス導入管の 0.1 m 下流側から 0.05 m 刻みで 11 点、残りのチャンバ中心までを 0.1 m 刻みで 6 点を計測位置とした。

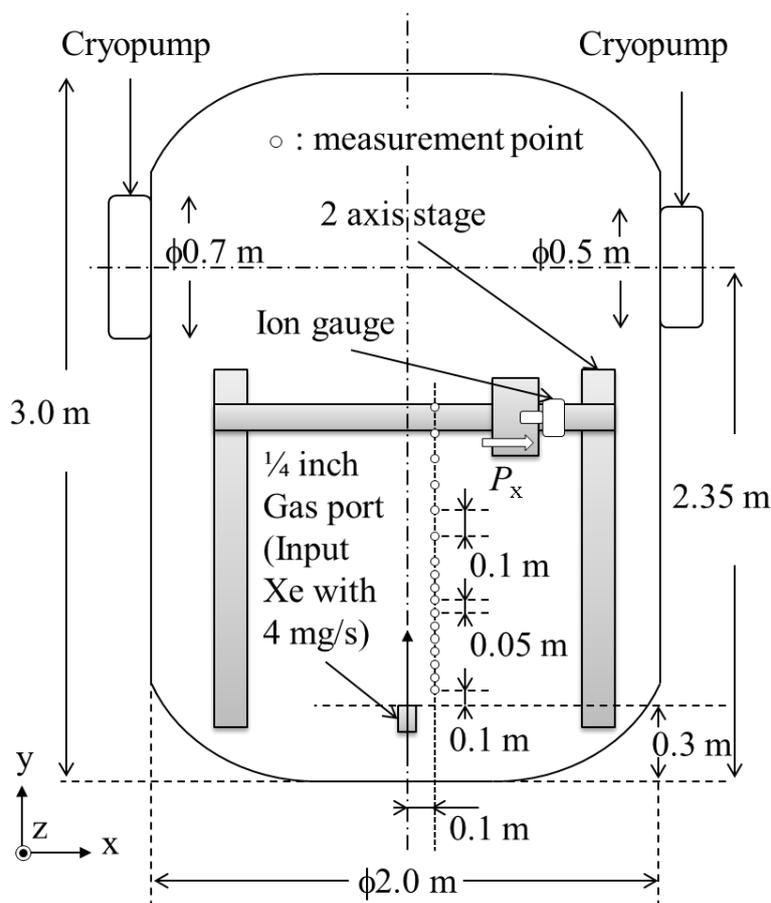


Figure 4.5. Schematic of pressure distribution measurements in the $\phi 2.0 \text{ m} \times 3.0 \text{ m}$ vacuum chamber with two cryopumps.

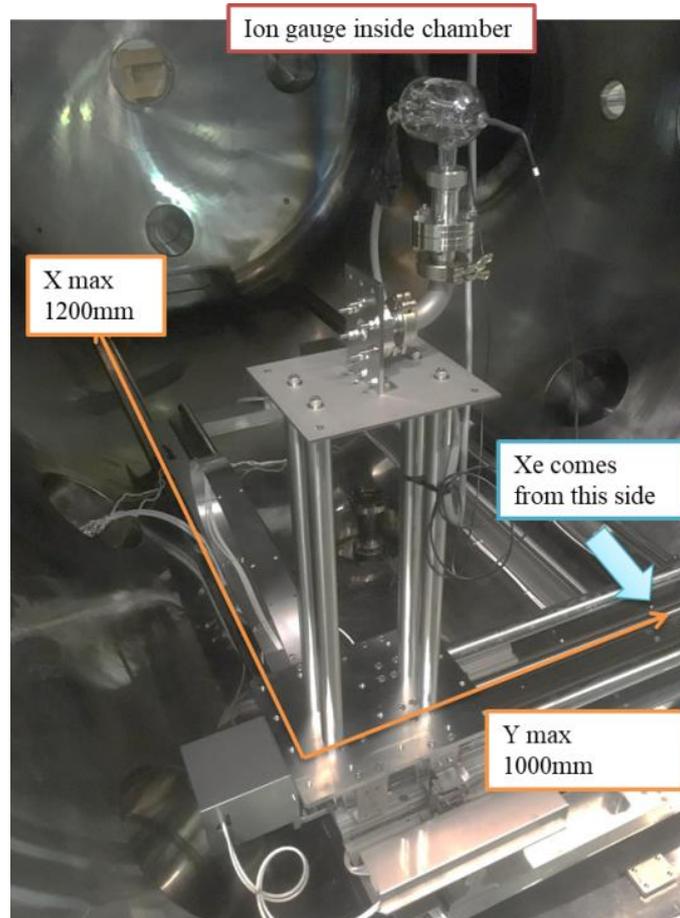


Figure 4.6. Picture of an ion gauge installed on 2-axis motion stage inside a vacuum chamber.

本実験では純度 99.999%の Xe ガスをチャンバ上流に設置した 1/4 インチ配管から 4 mg/s 流入させた。Xe ガスは、4 MPa 程度の圧力でタンクの中に保管されており、レギュレータによって 0.2 MPa に調圧され、HORIBA 社製流量計 SEC-Z512MGX を通してガス配管に導入される。流量計の諸元を Table 4.2 に示す。流量計はメーカーによって Xe ガスで較正されている。流量計は HORIBA 社製流量制御ユニット PE-D20 によってデジタル制御される。本実験で使用した PE-D20 の最小流量設定単位は 0.1 sccm である。本実験では流入流量 4 mg/s に対し、流量計に起因する流量の不確かさが $\pm 1.0\%$ (± 0.04 mg/s)である。圧力 P と排気速度 S と体積流量 Q の関係は

$$Q = SP, \quad (4.4)$$

と一定の排気速度の下では比例する。よって流量の不確かさによって計測圧力には $\pm 1.0\%$ の不確かさが含まれる。

Table 4.2. Specification of the mass flow controller.

	SEC-Z512MGX
Full scale (for Xe)	200 sccm
Flow control range	2~100%F.S.
Flow rate accuracy at 25°C	± 1.0%S.P.
Responsivity	<1 s
Repeatability	±0.2% F.S.
Operating inlet pressure	50~300 kPa
Leak integrity	$< 5 \times 10^{-12} \text{ Pa} \cdot \text{m}^3/\text{s}$ (He)

4.3.2 チャンバ内圧力分布数値解析モデル

4.2 節で求めたポンプ係数 $\epsilon(\theta)$ を用いて、 $\text{Ø} 2.0 \text{ m} \times 3.0 \text{ m}$ のチャンバ内の圧力分布を算出する計算モデルを構築した。座標系は 3 次元直交座標とし、円筒影響のチャンバ側壁および平坦なチャンバ両端が反射境界として設定されている。計算は DSMC 法を用いており、計算格子は $0.1 \text{ m} \times 0.1 \text{ m} \times 0.1 \text{ m}$ で均等に生成した。モデル概略図を Figure 4.7 に示す。粒子の流入口は 1/4 インチ配管を模擬した内径 4.35 mm の円筒断面に設置した。粒子は純粋な Xe ガスであり、速度は 300 K のマクスウェル分布から確率的に与えた。チャンバに取り付けられた 2 つのクライオポンプは大きさが違うものの、形状は相似であり、クライオポンプ直径と同様の長さを持つダクトを介して取り付けられているためダクト長さ r_p のポンプ係数を計算に使用した。クライオポンプに到達した粒子は流入角度から定まるポンプ係数の割合で計算から除去されるか、壁面と同じ条件で反射する。壁面反射は 4.2 節のクライオポンプ内部の計算と同じモデルで計算される。ただしクライオポンプの 1 段目との熱交換は考慮していない。よって、チャンバ内の粒子はすべて常温 300 K で熱平衡状態にある。

衝突断面積には Hard Sphere (HS) モデルを採用し、Xe の衝突断面積として $5.89 \times 10^{-19} \text{ m}^2$ を使用した。この衝突断面積は Xe のファンデルワールス半径 $2.16 \times 10^{-10} \text{ m}$ [105] から算出された値である。本計算モデルでは粒子はすべて常温 300 K で熱平衡状態にあり粒子間の相対速度は小さいため、相対速度に依存しない HS モデルを用いることは妥当である。

本実験条件では Xe ガスは常温で熱平衡にあり、またその流れはクライオポンプに対して指向性はなく熱運動によってクライオポンプに流入すると想定される。そこでポンプ係数として $\epsilon(\theta)$ を逐次計算する代わりに、4.2 節で求めた $\epsilon_{\text{total}} = 0.55$ を用いても計算される圧力分布は変わらない。解析では圧力分布の ϵ_{total} に対する依存性を取得するため、 ϵ_{total} を計算パラメータとして 0.3 から 0.9 の範囲で変化させて計算した。

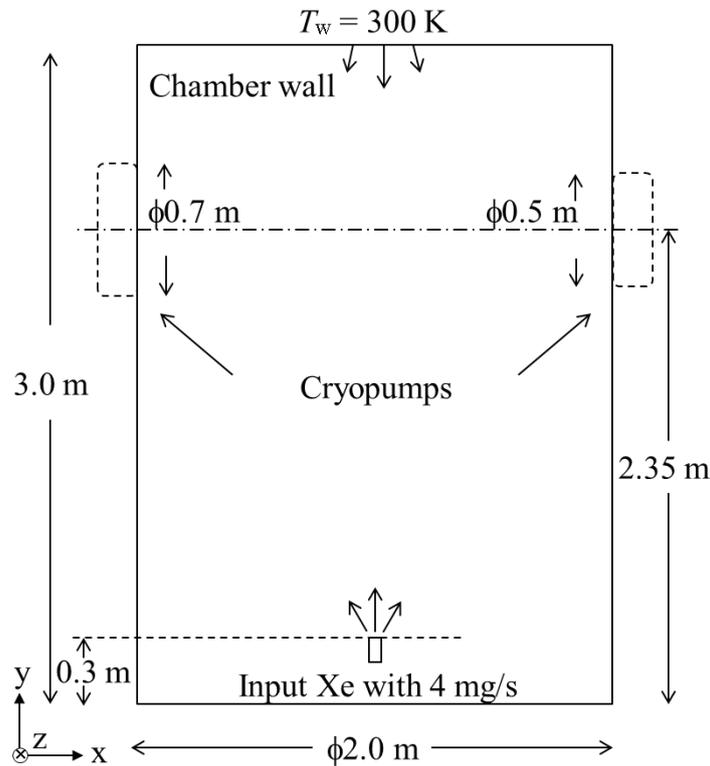


Figure 4.7. Simulation model of the $\phi 2.0 \text{ m} \times 3.0 \text{ m}$ vacuum chamber with two cryopumps.

4.3.3 圧力較正

電離真空計測定子の内部では、気体を電離する為にフィラメントを加熱し、発生した熱電子を加速させている。この熱電子と気体分子の衝突頻度は気体の密度に比例する事から、衝突によって、一定の割合でイオンを生成すると考えられる。よって生成イオンの数から気体分子の密度が求められる。一般的に密度は圧力に比例するため、気体分子の圧力 P は

$$P = \frac{I_i}{S_{se} I_e}, \quad (4.5)$$

ここで I_e はフィラメントから打ち出される熱電子によるエミッション電流, I_i はイオン電流, S_{se} は感度係数である。感度係数は測定子の構造や寸法による物、各電極に印可される電圧などの諸条件、測定ガスの種類などによって決定される。 I_i は微小なため、電離真空計 GI-TL3 RY によって電氣的に増幅・演算され、圧力に変換される。電離真空計の圧力表示機は、多くの場合電離真空計が窒素ガスに対しての圧力を表示するように設定されており、以下の式で各ガス種に対する圧力絶対値が与えられる。

$$P_c = \frac{(P_i - P_b)}{S_{se}} + P_b \quad (4.6)$$

ここで P_c が較正後の Xe ガスに対する圧力、 P_i が較正前の Xe ガス流入で電離真空計が表示する圧力、 P_b がチャンバ内背圧、 S_{se} が感度係数である。電気推進の試験では、圧力計測を標準化する動きがあり、Xe ガスに対する $S_{se} = 2.87$ が用いられている[35]。

電離真空計の感度係数は、使用する電離真空計や使用環境によって左右され、計測誤差はカタログ値よりも大きく経験的には 30%以上の誤差があると言われている。よって各実験設備で計測対象のガスを用いて較正することが望ましい。ここでは本研究で実施した圧力較正について記載する。

チャンバ内の圧力分布はクライオポンプによる排気の影響が小さいガス流入口 0.3 m 付近からチャンバ下流に行くにしたがって急激に低下し、一定の値に近づく。チャンバ下流の圧力はポンプ係数によって大きく変化するのに対し、ガス流入口直下の圧力はポンプ係数をほとんど受けない。実際、実験で計測された較正前の圧力では、ガス流入口に一番近いところと遠いところでは 1 桁以上の圧力差がある。そこで、ガス流入口付近の領域をガスジェット領域、チャンバ下流の圧力が一定となる領域をバルク領域と定義する。ガスジェット領域ではポンプ係数によらず、数値計算でも圧力計測でも同様の圧力となると考えられる。ガスジェット領域として 0.4, 0.45, 0.5 m の 3 点の圧力を計測しており、この 3 点で較正を実施した。実際にはガスジェット領域にも 1 桁低い圧力オーダーで ϵ_{total} に依存して変化するバルク領域の圧力の影響がある。そこで、圧力較正に用いる数値解析の値は、 ϵ_{total} の幅 0.5 から 0.6 で計算される圧力の平均で較正を実施した。これは、較正前の感度係数 $S_{se} = 2.87$ を使用した際に実験圧力が含まれる範囲である。得られた較正感度係数は $S_{se_cal} = 3.03$ であり、本研究ではこの値を用いて圧力較正を実施した。なお、較正誤差は感度係数に対して $\pm 6\%$ であった。よって較正された圧力の誤差はこの $\pm 6\%$ に流量計の不確かさ $\pm 1\%$ を加えた $\pm 7\%$ である。

4.3.4 圧力分布計測値と計算値の比較

実験及び数値解析で得られた圧力分布を Figure 4.8 に示す。エラーバーは較正感度係数の誤差 $\pm 6\%$ に流量計の誤差 $\pm 1\%$ を加えた $\pm 7\%$ を示している。軸方向 1 ~ 1.5 m のバルク領域では ϵ_{total} による影響が大きく、数値解析の圧力は ϵ_{total} に依存して大きく変化している。そこで軸方向 1 ~ 1.5 m のバルク領域圧力の平均値を算出し、実験値との残差を計算した。Figure 4.9 は横軸に ϵ_{total} を、縦軸に圧力の実験値との残差を示している。クライオポンプは 2 台あるため、 ϵ_{total} と圧力との間には 2 乗の関係がある。よって残差を 2 次関数でフィッティングした。フィッティング曲線から残差が 0 になる ϵ_{total} は 0.52 ± 0.04 であった。ここで残差 0 となる圧力に誤差 $\pm 6\%$ を圧力の誤差に換算して誤差の幅として与えている。4.2 節の解析で得られた $\epsilon_{total} = 0.55$ との差は 0.03 であり、4.2 節で構築したポンプ係数を算出する解析は現

実のポンプ係数を良い精度で予測できることが確認された。なお、バルク領域での圧力実験値は 4.7×10^{-3} Pa であり、式(4.4)から排気速度を算出するとおよそ 15,000 l/s である。U30H と U22H のカタログ値を Xe 換算すると 20,500 l/s であり、カタログ値より小さい。一方、ダクトがない場合の $\epsilon_{\text{total}} = 0.7$ の時の圧力を用いて計算した排気速度は 20,500 l/s とカタログ値と一致する。

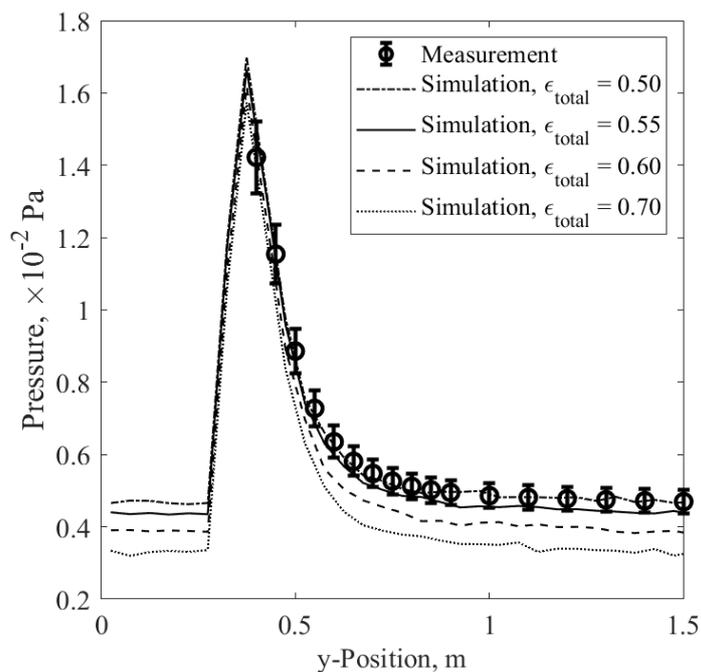


Figure 4.8. Pressure distribution along the axis 0.1 m radially from the center axis with different ϵ_{total} .

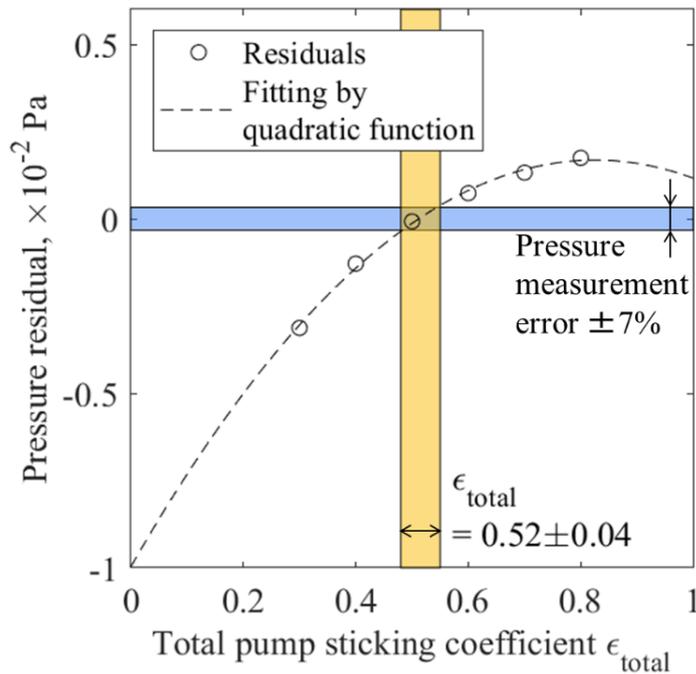


Figure 4.9. Residuals between the calculated average pressure and measured pressure.

4.4 クライオポンプへ直接向かう流れのポンプ係数

クライオポンプへの粒子の流入角度が小さいほどポンプ係数が大きくなるというポンプ係数の流入角度依存性より、クライオポンプに向かう粒子流れに指向性がある場合、 ϵ_{total} が増加することが予想される。ここで、クライオポンプに向かって指向性のある流れに対して、ポンプ係数がどのように変化するかを DSMC 計算で検討した。この計算では、クライオポンプに流入する粒子束の流入角度分布を取得して ϵ_{total} を計算し、クライオポンプに向かう流れがある場合とそうでない場合の変化を調査することを目的としている。計算モデル概略図を図に示す。チャンバの大きさは 4.3 節の計算モデルと同様である。クライオポンプに向かう流れをクライオポンプがすべて回収するためには、4.3 節の計算モデルより大きいクライオポンプが必要となる。そこでクライオポンプの直径を 1.4 m に拡張している。流入ガスは流量 4 mg/s の Xe ガスをクライオポンプに向かって噴射した条件 1 とチャンバ下流壁に向かって噴射した条件 2 の 2 条件について計算した。粒子の速度はマッハ 1 の流れの流入条件から棄却法を用いて与えた。その他の計算条件は 4.3 節と同様である。

計算の結果、チャンバ左側のクライオポンプに対する ϵ_{total} は条件 1, 2 についてそれぞれ

0.62, 0.53, またチャンバ右側のクライオポンプに対する ϵ_{total} はどちらも 0.53 であった。チャンバ右側のクライオポンプはどちらの条件でも熱運動している粒子が流入するのみのため、同じポンプ係数になる。チャンバ左側の ϵ_{total} の変化はクライオポンプに向かう粒子の流入角度分布によって生じたものである。以上より、クライオポンプに向かう粒子流れに指向性がある場合、 ϵ_{total} が増加することが示唆された。

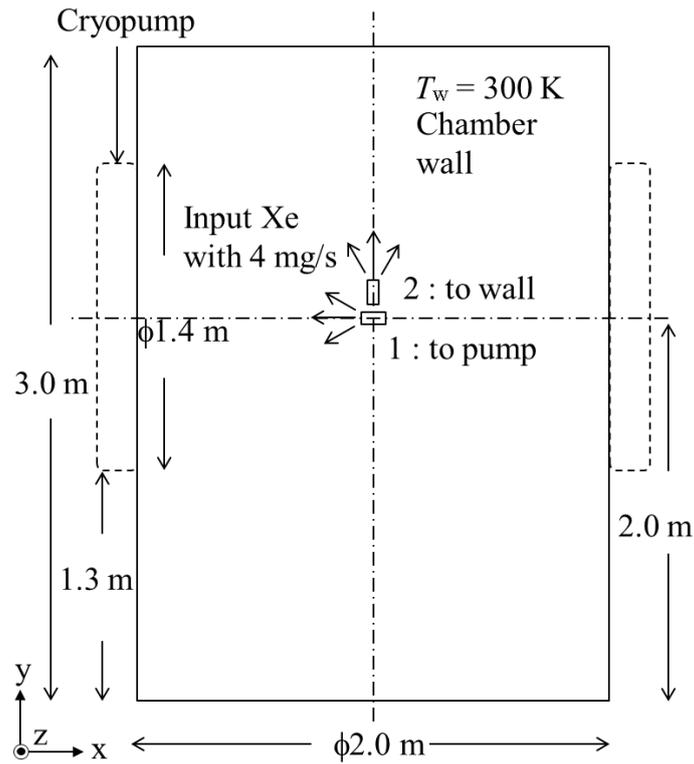


Figure 4.10. Simulation model of the $\phi 2.0\text{m} \times 3.0\text{m}$ vacuum chamber with different input flow directions.

4.5 まとめ

本章ではクライオポンプに流入する粒子の流入角度と排気確率を表すポンプ係数の関係性を調査した。その結果、以下の結論を得た。

- ポンプ係数は流入角度に依存し、クライオポンプ単体の場合、0.78 から 0.36 の値を取る。
- クライオポンプがダクトなどの構造体と接続されている場合、流入角度依存性は強くなり、流入角度 0 度から 90 度までの増加に伴ってポンプ係数は 0.80 から 0.26 へ減少する。ダクトの長さが長くなるほど、ポンプ係数の流入角度依存性が大きくなる。
- クライオポンプが取り付けられたチャンバ内の圧力分布計測から得られた熱運動粒子束に対する総ポンプ係数 ϵ_{total} は 0.52 ± 0.04 であり、TPMC 計算から算出された ϵ_{total} は 0.55 であったため、本章で構築したポンプ係数を算出するモデルは実際のクライオポンプのポンプ係数を精度よく良く予測できる。
- クライオポンプへの粒子の流入角度を制御し、クライオポンプに向かって粒子を流入させることで総ポンプ係数を増加させることが可能である。

本章で得られた研究成果は参考文献[106]にて発表された。

第5章 円錐型ビームターゲット による逆流粒子抑制効果

第3章でホールスラストから加速されたXeイオンが金属ビームターゲット表面で反射した際の反射粒子の挙動をモデル化することに成功した。また第4章ではクライオポンプによる排気と粒子流れの関係をモデル化し、クライオポンプの排気性能に関連するポンプ係数が粒子の流入角度に依存して変化することを明らかにした。本章ではこれらの知見を活かし、ビームターゲットで発生した逆流粒子を直接クライオポンプに誘導して抑制するためのビームターゲットの設計指針を示し、その効果を議論する。

円錐型ビームターゲットの設計パラメータは頂角と直径、および材質である。ここでビームターゲットの直径は最大でチャンバ直径である。頂角との組み合わせによってビームターゲットの直径を小さくする設計もあり得るが、一般にビームターゲットの直径を小さくするとビームターゲットに衝突するXeイオンの割合が減少するため、ここではビームターゲットに当たるXeイオンを最大化することを優先してビームターゲットの直径はチャンバ直径と同様と考える。

第3章の結論より、表面で反射したXeの分布の指向性が強いのはAlである。よってビームターゲット表面で反射した粒子を指定の場所に誘導するという目的を達成するためのビームターゲット材質として、AlとTiではAlの方が相応しい。そこで本章ではAlターゲット表面でのXe反射特性をもとにビームターゲットの設計指針を議論する。

5.1 ホールスラストプルームモデル

ビームターゲットでホールスラストから噴射されるプルームイオンの軌道を変更してクライオポンプに誘導する効果を見積もるためには、プルームの発散を考慮する必要がある。ホールスラストから噴射されるプルームイオンは、中心軸に対して軸対称に広がる。ホールスラストを点光源と見なすと、中心軸からの角度 θ 、ホールスラストからの距離 r における2次元平面円弧上での電流密度 $j(\theta)$ は、Figure 5.1に示す円弧を含む半球領域で方位角方向に一様と仮定した場合の点光源からの総電流密度 $J(\theta)$ と以下の関係にある。

$$\frac{j(\theta)}{\Delta\theta} = \frac{J(\theta)}{\Delta S} \quad (5.1)$$

半球上の単位面積 ΔS は

$$\Delta S = 2\pi r^2 \sin \theta \Delta \theta, \quad (5.2)$$

で与えられる．中心軸からの角度に対するプルーム電流の累積分布は $J(\theta)$ についての累積分布関数であり，

$$I(\theta) = \int_0^\theta J(\theta') d\theta' = \int_0^\theta 2\pi r^2 \sin \theta' j(\theta') d\theta', \quad (5.3)$$

である．

円錐角ビームターゲットでこのプルームイオンを反射させて誘導する効果を最大化するためには，中心軸からの角度に対するプルーム電流密度 $I(\theta)$ のピークが重要である．プルーム電流密度 $I(\theta)$ はプルームイオンの速度ベクトルと中心軸がなす角度に対する確率密度と考えることができる．ここで，ホールスラスト SPT-100 について Mitrofanova[107]らが計測したプルーム電流密度と発散角の関係を Figure 5.2 に丸で示す．この分布を再現する関数として，ガウス関数とローレンツ関数の和である疑似 Voigt 関数を用いる．疑似 Voigt 関数は，

$$V(x) = V_0 + A \left[m_u \frac{2}{\pi} \frac{\sigma}{4(x - x_c) + \sigma^2} + (1 - m_u) \frac{\sqrt{4 \ln 2}}{\sqrt{\pi} \sigma} \exp\left(-\frac{4 \ln 2}{\sigma^2} (x - x_c)^2\right) \right], \quad (5.4)$$

ここで m_u は重み， x_c は中央値である．疑似 Voigt 関数による近似曲線は実験データをよく近似できている．またピーク角度 θ_{peak} は7.3度であった．

プルームの発散の指標としてホールスラストから噴射されたイオンが運ぶ全イオン電流の95%または90%が存在する半角(half-divergence angle)として定義される発散角がよく用いられる．この発散角は，2次元平面で円弧上にプローブを掃引して電流密度分布を計測し，その累積分布値から算出される．Figure 5.3 にプルーム電流密度の累積分布を示す．疑似 Voigt 関数は累積分布値もよく再現できている．SPT-100 では90% half-divergence angle は30度であり，上述のピーク角度はこの発散角よりも小さい角度である．

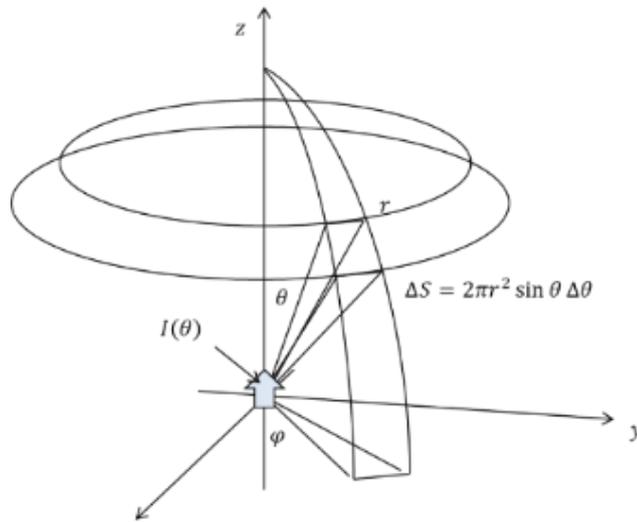


Figure 5.1. Hemisphere covering the plume from a point source

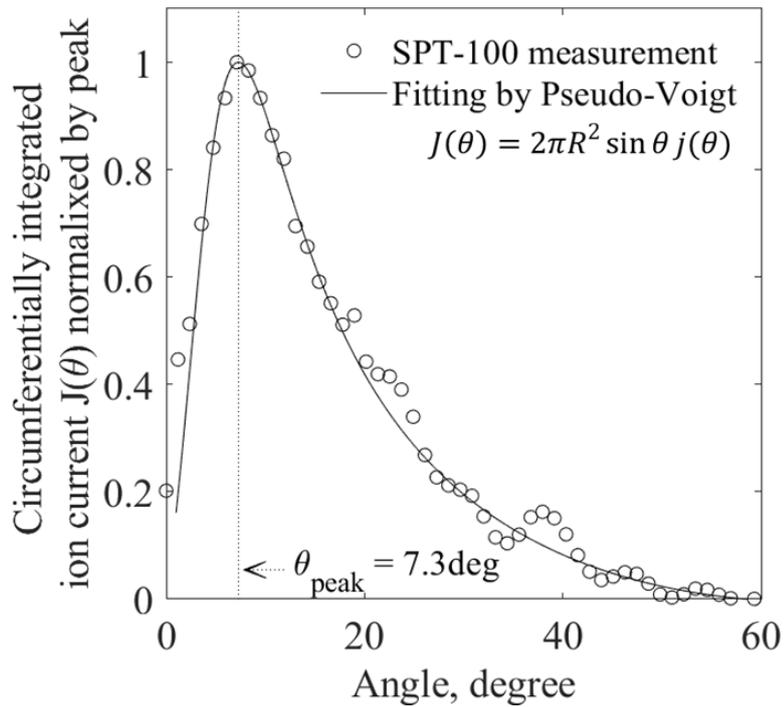


Figure 5.2. Angular distribution of circumferentially integrated ion current. SPT-100 data is the visually read values from the paper by Mitrofanova[107].

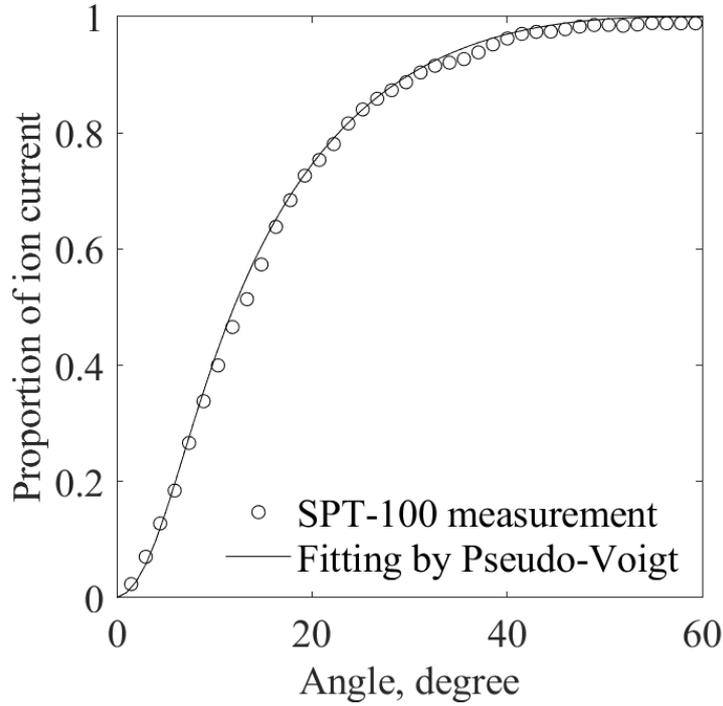


Figure 5.3. Proportion of ion current vs divergence angle. SPT-100 data is the visually read values from the paper by Mitrofanova[107]

5.2 ビームターゲット設計指針

ビームターゲットによってプルームイオンをクライオポンプに誘導した時に直接排気される流量 \dot{m}_p は以下の式で見積もることができる。

$$\dot{m}_p = \dot{m}_{th} \eta_u \eta_{ta} \eta_p s_p \epsilon_{total} \quad (5.5)$$

ここで \dot{m}_{th} はホールスラスタに投入する全流量、 η_u はホールスラスタの推進剤利用効率、 s_p はクライオポンプの面積比である。また、 η_{ta} はビームターゲットによる粒子収集効率、 η_p はクライオポンプによる粒子収集効率と定義する。 η_{ta} はプルームイオンがビームターゲットに当たる割合であり、ビームの分布、およびビームターゲットとホールスラスタの距離によって決まる。 η_p 、 ϵ_{total} はビームターゲットの頂角、およびクライオポンプの位置と面積が関係する。以降、それぞれの設計指針について述べる。

5.2.1 ビームターゲットとホールスラスタの距離

ホールスラスタの地上試験において、チャンバの大きさはプラズマとチャンバの電氣的結合の観点から大きければ大きいほど宇宙を模擬できるため良いが、実際には試験サイト

の制約によって m オーダーのサイズになる。その中にビームターゲットを設置することを考えた時、ビームターゲット直径 d_{ta} とビームターゲット端からホールスラストまでの距離 l_a の比をターゲットアスペクト比とすると、これはホールスラストから噴射されたプルームがどれだけビームターゲットに当たるかを示す指標になる。Figure 5.4 は横軸にターゲットアスペクト比、縦軸に全プルーム粒子のうちビームターゲットに当たる割合を示したものである。ビームターゲットによる粒子のクライオポンプへの誘導効果を最大化するためにはビームターゲットに当たる割合が多いほうがよい。ただし、設備との電氣的結合の観点から、ホールスラストと設備内構造物との距離はできるだけ遠くにとるべきである。ホールスラストとチャンバ端との距離を取るとターゲットアスペクト比が小さくなり、ビームターゲットに当たるプルーム粒子の割合が減って粒子を直接クライオポンプに誘導する効果が小さくなる。クライオポンプがチャンバ下流に設置されている場合、ビームターゲットはチャンバ下流端に設置されるため、ホールスラストの位置を調整してこのターゲットアスペクト比を調整することになる。そのため、チャンバアスペクト比より小さくすることはできない。本研究では、第 1 章で述べた世界各国の試験設備のアスペクト比から、それらの設備すべてに適用可能なターゲットアスペクト比 0.67 を指標としてビームターゲットの設計について議論する。ターゲットアスペクト比 0.67 のとき、プルームイオンがビームターゲットに当たる割合 η_{ta} は 0.7 であり、ホールスラストによって噴射された全プルームイオンの 70% がビームターゲットに到達する。

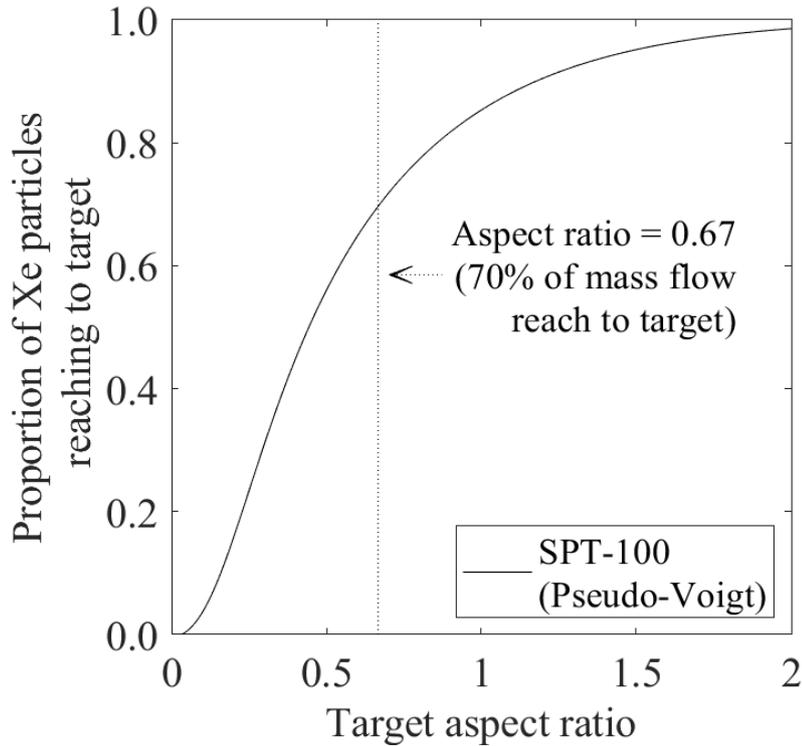


Figure 5.4. Proportion of mass flow reaching to target as function of target aspect ratio. The target aspect ratio is the ratio of target diameter to distance from a thruster to target end.

5.2.2 円錐型ビームターゲット頂角

円錐型ビームターゲットの頂角を鈍角にすると、ビームターゲット表面で反射した粒子のクライオポンプへの誘導効果が少なくなり、またビームターゲット表面で反射して直接ホールスラストに向かう粒子が増加する。一方、頂角が鋭角な場合、Xe イオンがビームターゲット表面に入射する入射角が大きくなり、ビームターゲット表面で反射してクライオポンプに誘導された粒子のクライオポンプへの流入角度が大きくなってしまう。第 4 章の結論より、流入角度が大きくなるとポンプ係数が低下するため、クライオポンプに誘導された粒子の排気効率が低下してしまう。さらに、第 3 章の結論から、ビームターゲット表面に対して粒子が広角入射した場合、反射粒子が運ぶエネルギーが増加してクライオポンプに入るエネルギーが増加する。一方、粒子が狭角入射した場合、反射粒子の速度ベクトルはビームターゲット表面に垂直に向いてしまう。ビームターゲットの頂角はこれらのバランスを見て決める必要がある。

クライオポンプの位置および幅に自由度があることを想定すると、ビームターゲットか

ら反射される粒子束の分布に合わせて位置および幅を決めることで、クライオポンプに流入する量を最適化できる。一方、クライオポンプへの流入角度を調整するためにクライオポンプを傾けて設置するのは一般的なチャンバでは難しい。よって、クライオポンプへの流入角度に依存するポンプ係数を最大化することを最優先し、円錐型ビームターゲットの頂角を決定する。

ここでは、第4章でモデル化した一般的な2段構造のクライオポンプを、ダクトを介して設備に取り付けることを想定する。ポンプ係数の流入角度依存性が示すように、粒子がクライオポンプに流入する際の流入角度は小さくなればなるほど良い。また、第3章の反射モデルより、粒子がA1ターゲットに入射する際の入射角度が45度以上の場合、反射粒子のフラックスは鏡面反射方向に主成分を持つ。Figure 5.5に示すような、ある点光源（ホールスラスト）から角度 θ_{peak} で噴射されたプルームイオンが、頂角 θ_{cone} の円錐型ビームターゲット表面で鏡面反射した時、反射粒子がチャンバ側壁面に設置されたクライオポンプに流入する流入角度 θ_{inp} は

$$\theta_{\text{inp}} = \theta_{\text{peak}} - 2\theta_{\text{cone}} + \pi/2, \quad (5.6)$$

である。この θ_{inp} を最小、つまり0にする θ_{cone} は

$$\theta_{\text{cone}} = \theta_{\text{peak}}/2 + \pi/4, \quad (5.7)$$

である。またプルームイオンがビームターゲットに入射する際の入射角度 θ_{int} は、

$$\theta_{\text{int}} = \pi/2 + \theta_{\text{peak}} - \theta_{\text{cone}}, \quad (5.8)$$

で与えられ、式(5.7)、式(5.8)より、 $\theta_{\text{int}} = \theta_{\text{cone}}$ が成り立ち、どちらも45度以上となるため、A1ターゲットであればビームターゲット表面からの反射粒子のフラックスが鏡面反射方向に主成分を持つという条件を満たす。周方向に積分したプルーム電流密度のピーク角度を式(5.8)の θ_{peak} に代入することにより、円錐型ビームターゲット頂角 θ_{cone} が求まる。5.1節で求めたSPT-100のピーク角度 $\theta_{\text{peak}} = 7.3$ 度を用いると、 θ_{cone} は48.65度となる。

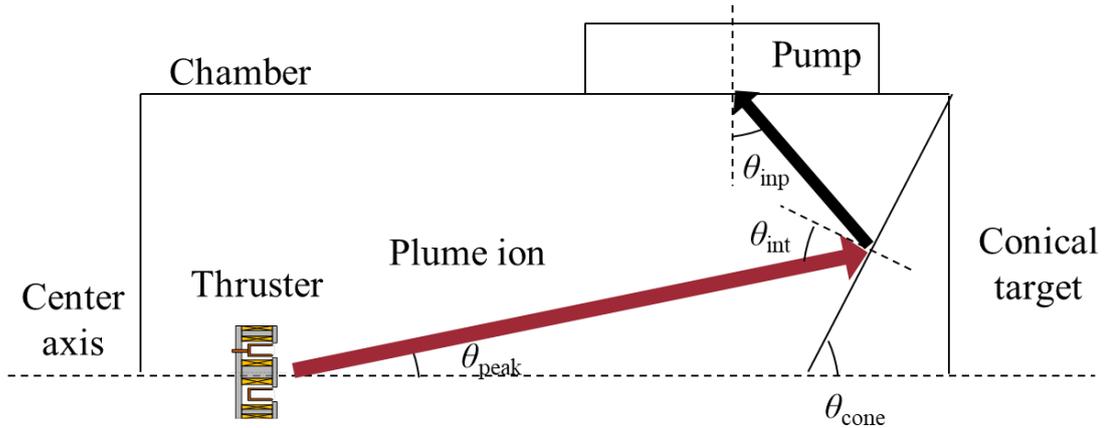


Figure 5.5. Schematic of beam peak angle θ_{peak} , target cone angle θ_{cone} , inflow angle to pump θ_{inp} , in Hall thruster ground test.

5.2.3 クライオポンプ位置と面積

クライオポンプの位置と面積が関係する η_p , $\varepsilon_{\text{total}}$ について検討する. まず, η_p について, これは側壁面への粒子の到達確率密度分布をクライオポンプ面積で積分したものである. ここで, 5.2.2 項で求めたビームターゲット頂角 $\theta_{\text{cone}} = 48.65$ の円錐型 Al ターゲットをチャンバ下流に設置した設備を想定する. ビームターゲット材質は Al とし, プルーフ粒子の反射は第 3 章で求めた Al ターゲットでの反射モデルに従う. プルーフ粒子はターゲットアスペクト比 0.67 で決まるホールスラスト位置から 5.1 節で与えたプルーフモデルに従って噴射する. 上記の条件で計算される, ビームターゲットで反射してチャンバ側壁面に到達する流量の確率密度分布を Figure 5.6 に示す. 横軸はビームターゲット端からの距離をビームターゲット直径で規格化した値である. ここで, すべての粒子が鏡面反射するならば, ピーク角度 θ_{peak} で噴射されたプルーフイオンが, 頂角 θ_{cone} の円錐型ビームターゲット表面で鏡面反射してチャンバ壁面に到達する位置に流量到達確率密度のピークが来る. この鏡面反射条件下で与えられるピーク位置 x_{sp} は

$$x_{\text{sp}} = \frac{1 - (2l_{\text{ta}}/d_{\text{ta}}) \tan \theta_{\text{peak}}}{\tan \theta_{\text{cone}} - \tan \theta_{\text{peak}}}, \quad (5.9)$$

で与えられる. 式(5.9)に $\theta_{\text{peak}} = 7.3$, $\theta_{\text{cone}} = 48.65$ を代入して得られる x_{sp} を Figure 5.6 に点線で示す. 流量到達確率密度のピーク位置は, x_{sp} よりチャンバ下流にあることがわかる. これは, 反射粒子の分布はプルーフイオンがビームターゲットに入射する角度 θ_{int} が大きいほど, 反射粒子の分布の広がりが小さくなることが原因である.

クライオポンプの位置を流量到達確率密度のピーク位置 x_{peak} に設定することで, η_p を最

大化できる。ここで、市販のクライオポンプとして広く用いられている直径 30 インチの 2 段型円筒形クライオポンプ (ULVAC 製 U30H) を用いた場合を設置する場合を考える。チャンバ側壁面に対するクライオポンプの幅が占める割合は、チャンバのアスペクト比が一定の場合、チャンバ直径に依存する。ここでは、チャンバ直径として $d_c = 2, 3, 6 \text{ m}$ の 3 条件を考える。それぞれの直径の場合に、クライオポンプ中心位置をピーク位置 x_{peak} に設定した場合にクライオポンプが占める幅を Figure 5.6 に青, 緑, 黄色の四角でそれぞれ示す。チャンバ直径が小さいほうが、クライオポンプが占める幅は相対的に大きくなり、より多くの粒子を捕集できる。

次に ϵ_{total} について、これはクライオポンプに入る流入粒子の流入角度分布と $\epsilon(\theta)$ の積分で与えられる。ここでは、クライオポンプの直径程度のダクトを接続してクライオポンプをチャンバに取り付けることを想定する。チャンバ直径 $d_c = 2, 3, 6 \text{ m}$ の 3 条件について、それぞれ計算される ϵ_{total} は 0.780, 0.782, 0.785 であり、クライオポンプへの粒子の流入角度が平均して 10 度以下になっている。チャンバ直径が小さいほど、クライオポンプの幅が相対的に大きくなるため、流入角度の大きい粒子もクライオポンプに流入しやすくなる。そのため ϵ_{total} が低下する。

Table 5.1 に $d_c = 2, 3, 6 \text{ m}$ の 3 条件で計算された η_p , ϵ_{total} および投入流量に対するクライオポンプで直接排気される流量の割合 $\dot{m}_p/\dot{m}_{\text{in}}$ をまとめた。ここで推進剤利用効率 $\eta_u = 0.9$, ビームターゲットに到達する割合 $\eta_{\text{ta}} = 0.7$ として計算している。チャンバ直径が 2 m の時、流入流量の 4 割がクライオポンプで直接排気される。これは同じ排気量の時、およそ 1.6 倍の流量が使用可能となることに相当する。また、チャンバ直径が 6 m と大きい場合、相対的にクライオポンプ幅が小さくなるためクライオポンプに直接排気される流量の割合が減っているが、大きなチャンバではクライオポンプを並列に追加することでこれを増やすことができる。ただし、クライオポンプを並列に追加する場合、クライオポンプ間の距離をあける必要が出てくるため、設置位置は上記のクライオポンプ 1 台の場合と異なり、クライオポンプ 2 台の面積から計算される η_p が最大となる位置としたほうが良い。

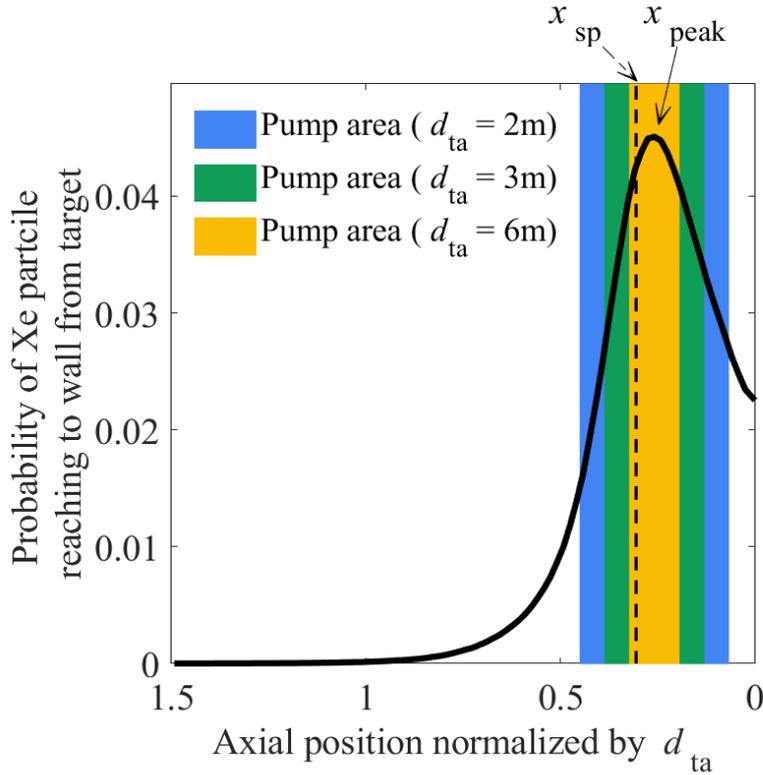


Figure 5.6. Probability distribution of Xe particle flow reaching to wall from beam target. The axial position from beam target end is normalized by beam target diameter.

Table 5.1. Proportion of directly pumped mass flow rate to input mass flow rate. Here, $\eta_u = 0.9$, $\eta_{ta} = 0.7$, and $s_p = 1$.

Chamber diameter d_c , m	Particle collection efficiency η_p	Total pump capture coefficient ϵ_{total}	Proportion of directly pumped mass flow rate \dot{m}_p/\dot{m}_{in}
2	0.79	0.78	0.39
3	0.59	0.78	0.29
6	0.30	0.79	0.15

クライオポンプは冷却が必須であるため、クライオポンプに加わる熱負荷に注意する必要がある。クライオポンプに流入する熱負荷のうち主要なものは以下の3つである。

1. クライオポンプに流入する粒子の運動エネルギー
2. チャンバ壁およびビームターゲットからの輻射熱
3. クライオパネル表面で吸着、凝縮した粒子によって生じる吸着熱および凝縮熱

ここではまず 1 つ目のクライオポンプに流入する粒子の運動エネルギーによって生じる熱負荷について考察する．ビームターゲットで反射した粒子がクライオポンプに到達する際、1 回の反射では壁面と完全にエネルギー適応せず、粒子は一定の割合の運動エネルギーを保存している．そこで、ビームターゲットで反射した粒子がチャンバ側壁面に運ぶエネルギー密度を計算した．計算されたエネルギー密度分布を Figure 5.7 に実線で示す．これは $\dot{m}_{\text{th}} = \text{mg/s}$, $\eta_u = 0.9$, $\eta_{\text{ta}} = 0.7$ の条件で計算した値である．また、粒子 1 個当たりのエネルギー分布を破線で示す．エネルギー密度は Figure 5.6 に示す流量到達確率密度とこのエネルギー分布の積で分布が与えられる．第 3 章で明らかとなった Xe 粒子の金属ターゲット表面反射特性より、Xe 粒子のビームターゲットへの入射角が大きくなるほど、運動エネルギーが保存される．そのため、ビームターゲットへの入射角が大きい粒子がより集まるチャンバ下流側にエネルギー密度のピーク位置が来ている．

ここで、クライオポンプ U30H の面積 (0.45 m^2) を用いて計算されるエネルギーは、 $d_c = 2, 3, 6 \text{ m}$ それぞれに対して $3 \text{ W}, 2 \text{ W}, 1 \text{ W}$ であった．ホールスラスト流量 2 mg/s はホールスラスト作動電圧 300 V とすればホールスラスト投入電力に換算しておおよそ 0.6 kW となる．ビームターゲットによる誘導効果により、小さいチャンバではホールスラスト投入電力の 0.5% の熱量が直接クライオポンプに流入することとなる．

残りの 2 つの熱負荷のうち、3 つ目の吸着熱および凝縮熱は、2 つ目の輻射熱と比べて十分に小さいため、輻射熱のみを議論する．円錐型ビームターゲットを設置し、ターゲット近傍の側壁面にクライオポンプを配置した場合、輻射熱による熱流束は同心円状の 2 本の円柱間の熱流束で与えられる．

$$q_{\text{heat}} = \frac{\sigma_{\text{SB}} \epsilon_{\text{rad,p}} \epsilon_{\text{rad,ta}} (T_{\text{ta}}^4 - T_{\text{p}}^4)}{\epsilon_{\text{rad,ta}} + \frac{S_{\text{p}}}{S_{\text{ta}}} (1 - \epsilon_{\text{rad,ta}}) \epsilon_{\text{rad,p}}}, \quad (5.10)$$

ここで、 S は表面積、 T は温度、 ϵ_{rad} は放射率、 σ_{SB} はステファン・ボルツマン定数である．クライオポンプの表面積がビームターゲットの表面積よりもはるかに小さい場合には、

$$q_{\text{heat}} = \sigma_{\text{SB}} \epsilon_{\text{rad,p}} \epsilon_{\text{rad,ta}} (T_{\text{ta}}^4 - T_{\text{p}}^4), \quad (5.11)$$

となる[108]．

通常、クライオポンプの第 1 段目は汚れなどにより、放射率が 1 に近くなる[108]．そこで放射率を 1 とし、 $T_{\text{ta}} = 300 \text{ K}$, $T_{\text{p}} = 80 \text{ K}$ のとき、計算される熱流束は 457 W/m^2 である．クライオポンプ U30H の面積で計算すると、輻射熱は 207 W となる．クライオポンプの第 1 段目に低放射率の金属やコーティングがなされていてきれいな状態に保たれている場合、輻射熱はより小さくなる．クライオポンプに流入する粒子の運動エネルギーによる熱量と比べると、ホールスラスト投入電力 0.6 kW の場合は輻射熱が支配的であるといえる．一方、粒子の運動エネルギーはホールスラスト投入電力に比例して増加すると考えられるため、投入電力が 6 kW の場合、粒子の運動エネルギーによる熱量は数十 W となり、クライオポ

ンプの第1段目の輻射率が0.1程度と小さい場合では輻射熱と同等かそれ以上となる。

なお、ビームターゲットにはホールスラストのプルームイオンが衝突することによって熱が流入し、温度が上昇することが考えられるが、ここでは冷却によってビームターゲット温度は300 Kに保たれていると想定している。ビームターゲットを冷却しない場合、ビームターゲットの温度が上昇してクライオポンプに入る輻射熱が大きくなることが想定される。

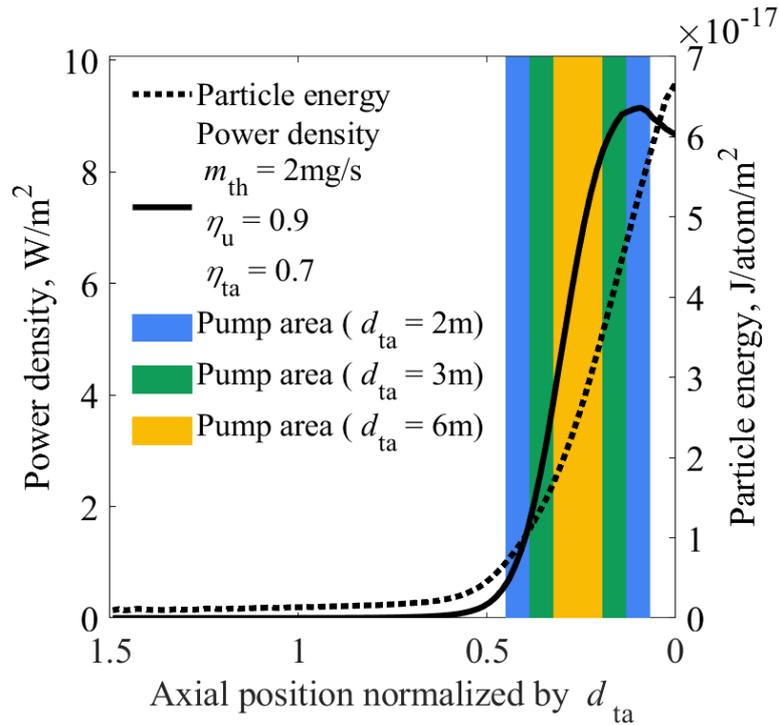


Figure 5.7. Power density carried by particles from target to wall (left) and particle energy distribution (right).

5.3 モデルケースによる逆流粒子抑制効果検証

5.3.1 2D3V-DSMC 計算モデル

モデルケースとして、IHI のスペースチャンバをモデルとしたモデルチャンバを計算対象とした。計算モデルを Figure 5.8 に示す。チャンバ直径 2 m、チャンバ長さ 3 m、アスペクト比が 0.67 の容器に、直径 30 インチ (0.76 m) の U30H クライオポンプがチャンバ下流に設置されており、クライオポンプ中心位置は上流から 2.35 m に位置している。モデルチャンバではチャンバ円周上のクライオポンプ位置に 2 台の U30H がダクトを介して取り付け

られている。チャンバ円周上のクライオポンプ設置領域に対してクライオポンプが占める面積の割合 s_p は 0.19 である。計算モデルは軸対称のため、クライオポンプ領域に到達した粒子のうち、19%だけがクライオポンプに流入する条件設定とした。粒子の流入位置は実際のスラストスタンドの位置に合わせて、上流から 0.3 m とした。流入流量は 2 mg/s とした。粒子の初期速度は Xe^+ が作動電圧 300 V で加速されたものとして与えており、速度分布および多価イオンの影響は考慮していない。速度ベクトルの角度を 5.1 節で導入した疑似フォークト関数で与えることで、点光源から発散するビームとして流入させた。推進剤利用効率を 90% に設定し、流入粒子の 90% はイオンビームとして 5.1 節で導入した SPT-100 のブルームモデルから、残りは未燃の推進剤中性粒子として 500 K のマクスウェル分布から確率的に抽出して与えた。この条件では $\eta_{ta} = 0.74$ である。ここでブルームイオンは無衝突を仮定している。またチャンバ内に存在する中性粒子との電荷衝突も計算には含まれていない。電荷交換衝突は現実には無視できない頻度で起きていることが確認されているが、本計算ではイオンがビームターゲット表面に衝突するまでに電荷を失ったとしても、エネルギーを失っていないければビームターゲット表面での粒子反射モデルに違いはなく、その後の計算に影響がないと考えられるためである。

境界条件はビームターゲット表面およびチャンバ壁面での粒子の反射とクライオポンプによる排気である。ビームターゲットは①円錐型 Al ターゲット、②平板 Al ターゲット、③逆円錐型 Ti ターゲット、の 3 種類の条件で計算した。1 つ目の円錐型ビームターゲットの頂角は 5.2.2 項で導入したビームターゲット頂角で与えた。ビームターゲットの位置はチャンバ下流端がビームターゲット下流端に来るように設置した。クライオポンプの位置はチャンバ下流から 0.65 m に位置されており、粒子到達確率密度のピーク位置はクライオポンプ位置より 0.08 m 下流に位置しているが、ピーク位置はクライオポンプ幅の間に含まれており、 η_p は 0.76 と計算される。2 つ目の平板 Al ターゲットは 1 つ目のビームターゲットの効果を検証するための比較対象であり、ビームターゲットから発生する粒子束はチャンバ上流に向かってくる。3 つ目の逆円錐型 Ti ターゲットは、ISAS の HTDT で使用されているビームターゲットをモデル化したものである[18]。ビームターゲット表面での反射粒子の速度分布は第 3 章の MD で求められた Al, Ti の反射分布を再現する拡張 CLL モデルを用いた。その他のチャンバ壁面は不純物などが付着している汚れた表面を想定し、適応係数 α が 0.9 のマクスウェルモデルを用いた。また壁面温度は 300 K とした。クライオポンプでの排気では、第 4 章で求めた 2 段型クライオポンプに対する粒子の流入角度に依存したポンプ係数を用いた。このポンプ係数は粒子の流入角度によって 0.26 から 0.8 まで変化する。2 段型の場合、80 K で保持されている 1 段目に衝突した Xe は吸着されず反射するため、クライオポンプとの反射では壁面温度 80 K の反射とした。

DSMC の計算手法には最大衝突数法を用いた。本計算ではチャンバ内に残存する中性粒子とホールスラストから噴射される未燃推進剤との間で速度差があることを考慮し、衝突

断面積の計算には弾性衝突モデルの一つである VHS (Variable Hard Sphere) モデルを使用した。VHS モデルの衝突断面積は直径 d_{VHS} を用いて πd_{VHS}^2 で与えられる。直径 d_{VHS} は衝突粒子対の相対速度 g に依存し、

$$d_{\text{VHS}} = d_r \left(\frac{g_r}{g} \right)^{\omega-1/2}, \quad (5.12)$$

で与えられる。ここで d_r , g_r , g はそれぞれ参照直径, 参照相対速度, 相対速度である。 ω は粘性係数の温度指数であり, $\omega = 0.5$ の場合は温度依存性がなくなり剛体球モデルとなる。平衡状態における直径は次式で与えられる。

$$d_{\text{VHS}} = d_r \left[\left\{ \frac{2k_B T_r}{mg^2} \right\}^{\omega-1/2} \frac{1}{\Gamma(5/2-\omega)} \right]^{1/2}, \quad (5.13)$$

ここで T_r は参照温度である。また Γ はガンマ関数であり次の積分で定義される。

$$\Gamma(s) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{s-1} dt. \quad (5.14)$$

Bird がまとめた Xe に関するパラメータを用いると [68], Xe 中性粒子同士の衝突断面積は

$$\sigma_{\text{VHS}} = \frac{4.45 \times 10^{-17}}{g^{0.7}}, \quad (5.15)$$

となる。最大衝突数法の計算で必要となる最大の相対速度 g_{max} は式(2.16)に未燃推進剤の温度 500 K を代入して与えた。

計算格子は 30×20 で各格子の体積が等しくなるように設定した。これにより、中心軸付近で格子の体積が大きくなり、格子内の計算粒子数が極端に少なくなることを防ぐことができる。計算格子内の粒子数は 20 個以上になるように設定した。計算では複数の粒子を一つの計算粒子としてみなす超粒子を使用し、計算領域内の計算粒子数は 50 万~150 万個になるよう、超粒子の大きさを 10^{12} ~ 10^{13} に設定した。時間刻みは粒子が一回の運動で計算格子をまたがないよう、 10^{-5} s とし、収束して十分なサンプリングが行えるよう、合計 5 s まで計算している。

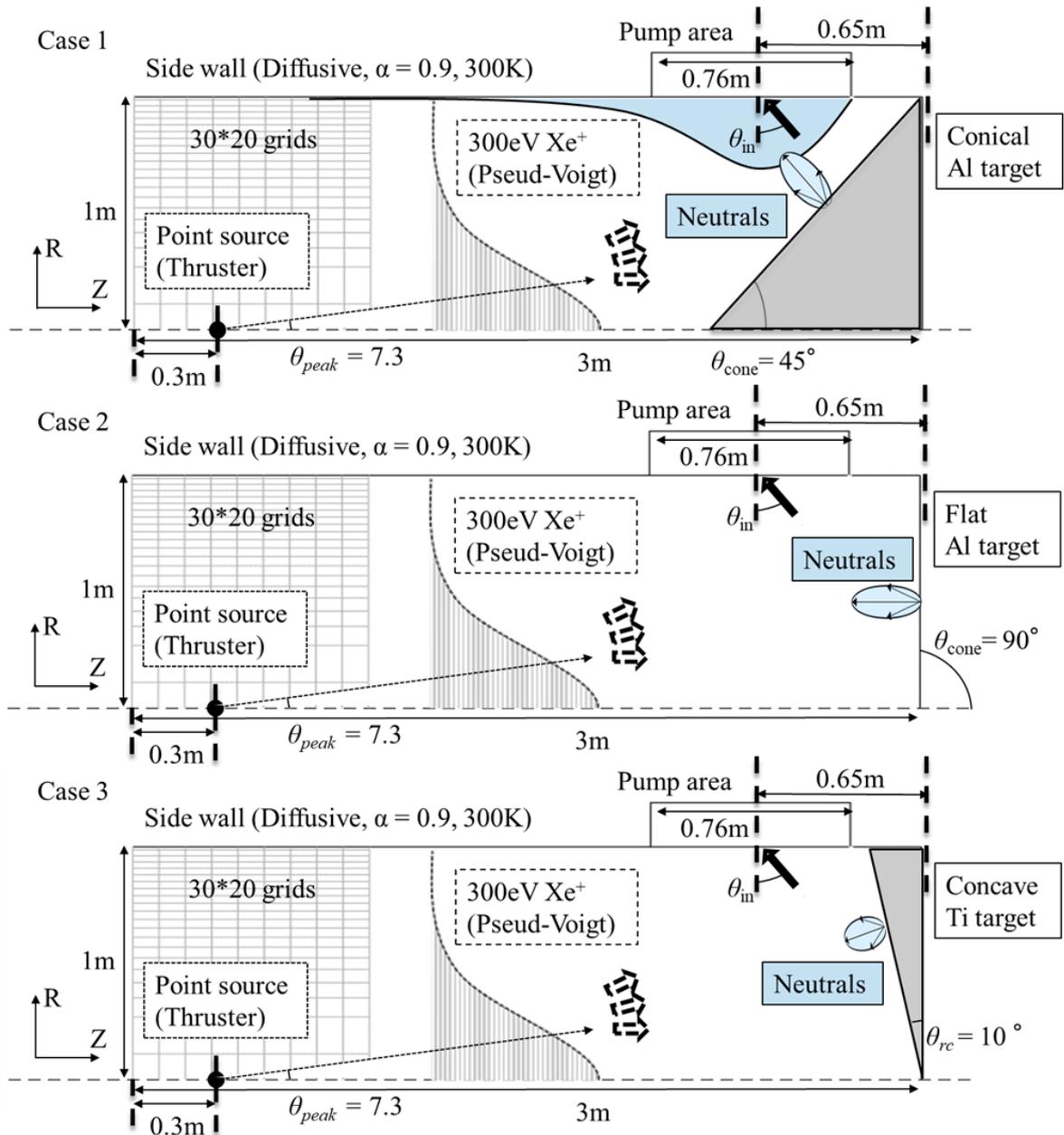


Figure 5.8. The schematic of 2D3V-DSMC simulation model. Three different beam targets are compared, conical Al target (case 1), flat Al target (case 2), and concave Ti target (case 3).

5.3.2 逆流粒子の抑制効果推定

ビームターゲット表面で反射した粒子の軌道変更が狙い通り達成できたかどうかを確認するため、プルームイオンとビームターゲットの衝突によって発生した中性粒子の粒子束をベクトルで可視化した。結果を Figure 5.9 に示す。ここで矢印の長さおよび色は粒子束の大きさを表しており、色は 3 つの計算条件のうちの最大の値で規格化されている。全部の条件において、ビームターゲットに到達して反射する質量流量は保存されており、粒子束の最大値に大きな差異はない。1 つ目の円錐型 Al ターゲットではベクトルがクライオポンプに向かっており、ホールスラストに向かう成分は非常に少ない。2 つ目の平板 Al ターゲットでは粒子はビームターゲット表面で若干広がるものの、チャンバ上流に向かって反射してしまうため、ビームターゲットからホールスラストに向かう粒子束が大きいことがわかる。3 つ目の逆円錐型 Ti ターゲットでは粒子の反射が拡散のようになり、クライオポンプへ粒子を誘導する効果はないものの、ホールスラストに直接向かう粒子は平板 Al ターゲットよりは少ない。

Table 5.2 にビームターゲットから直接ホールスラストに向かう粒子束によって生じる逆流流量 $\dot{m}_{\text{ing,d}}$ 、熱化した粒子による逆流流量 $\dot{m}_{\text{ing,t}}$ 、全逆流流量 \dot{m}_{ing} 、ホールスラスト周りのバルク圧力、およびバルク圧力から算出される実効排気速度をまとめた。ホールスラスト周りのバルク圧力は $\dot{m}_{\text{ing,t}}$ の発生源となる熱化した粒子による圧力であり、ホールスラストから直接噴射される未燃ガスによって生じる圧力の影響は含まれていない。円錐型 Al ターゲットを設置した場合の \dot{m}_{ing} は 0.106 mg/s であり、平板 Al ターゲットの場合の \dot{m}_{ing} の 81% に減少している。その内訳は、まず $\dot{m}_{\text{ing,d}}$ について、平板 Al ターゲットでは 0.012 mg/s と計算されるのに対し、円錐型 Al ターゲットでは 0.002 mg/s と前者の 1/6 に減少している。次に $\dot{m}_{\text{ing,t}}$ について、平板 Al ターゲットでは 0.118 mg/s であり、円錐型 Al ターゲットでは 0.104 mg/s と平板 Al ターゲットの 88% に減少した。 $\dot{m}_{\text{ing,t}}$ はチャンバ内のバルク圧力によって生じており、バルク圧力が低下していることがわかる。円錐型 Al ターゲットでは $\eta_u = 0.9$ 、 $\eta_{\text{ta}} = 0.74$ 、 $\eta_p = 0.76$ 、 $\epsilon_{\text{total}} = 0.78$ と計算され、式(5.8)より $\dot{m}_p/\dot{m}_{\text{th}} = 0.08$ となり、これは流入流量を 8% 減少することに相当する。この直接排気効果に加えて、ビームターゲットによってクライオポンプ周辺の数密度が増加したことにより、バルクの圧力減少が生じている。逆円錐型 Ti ターゲットの条件では、粒子を直接クライオポンプに誘導する効果がほとんどないにも関わらず、 $\dot{m}_{\text{ing,t}}$ は円錐型 Al ターゲットの時とほぼ同じ程度に低下している。

円錐型 Al ターゲットによる効果が最大限発揮されるのは、クライオポンプ面積比が 1、すなわちチャンバ円周上のクライオポンプ領域全周にクライオポンプが設置されている条件である。そこで同様のモデルチャンバにおいて、クライオポンプ面積比を 1 として計算した。結果を Table 5.3 に示す。円錐型 Al ターゲットを設置した場合の \dot{m}_{ing} は 0.015 mg/s であり、平板 Al ターゲットの場合の \dot{m}_{ing} の 37% に減少している。 $\dot{m}_{\text{ing,d}}$ はクライオポンプ面積比に影響を受けないため、クライオポンプ面積比が 0.19 の条件と同じ値である。 $\dot{m}_{\text{ing,t}}$ は

クライオポンプ面積比が 0.19 の条件から大きく減少しており，平板 Al ターゲットで 0.026 mg/s と計算されるのに対し，円錐型 Al ターゲットで 0.013 mg/s と前者の 50% に減少している．また $\dot{m}_{\text{ing,t}}$ の大幅な減少によって \dot{m}_{ing} に占める $\dot{m}_{\text{ing,d}}$ の割合が相対的に大きくなり，円錐型 Al ターゲットで $\dot{m}_{\text{ing,d}}$ を減少させることが重要となる．

またビームターゲットで反射した粒子がクライオポンプに運ぶエネルギーは，円錐型 Al ターゲットの場合で 1 台当たり 4.70 W と計算された．流入流量は 2 mg/s であり，作動電圧 300 V とすればホールスラスト投入電力はおおよそ 600 W であるため，ホールスラスト投入電力の 0.8% が円錐型 Al ターゲットによってクライオポンプに流入することになる．平板 Al ターゲット，逆円錐型 Ti ターゲットではそれぞれ 0.04 W，0.05 W と計算され，クライオポンプ面積比が大きいチャンバにおいては，逆円錐型 Ti ターゲットはエネルギーをダンプさせつつ逆流粒子抑制効果が得られるビームターゲットである．

ビームターゲットで粒子をクライオポンプに誘導する際，スパッタリングによって生じる粒子がクライオポンプに直接流入するとクライオポンプの内部を汚染してしまい，排気効率が低下する恐れがある．実際の運用ではスパッタ粒子の分布を考慮してビームターゲットを設計する必要がある．スパッタ率やスパッタ粒子の分布はイオンの入射角度，エネルギー依存性を示すため，特にビームターゲットに対して Xe イオンが角度をもって入射する場合は，スパッタ粒子の分布特性は反射 Xe 粒子の分布特性と大きく異なる可能性がある．本研究ではこのスパッタリングによる影響は評価できていないため，ビームターゲットの実用の際には別途検討する必要がある．

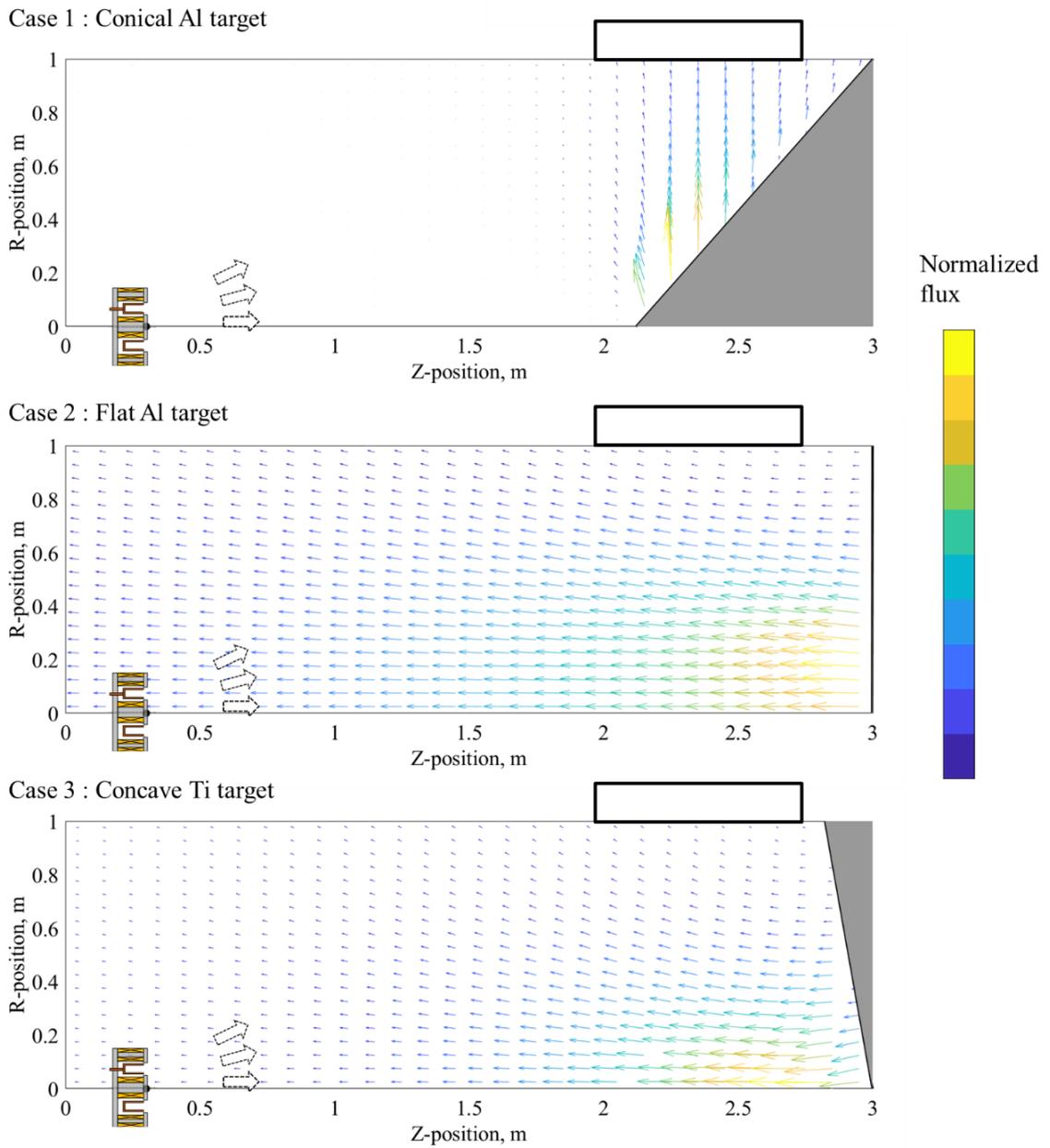


Figure 5.9. Backflow flux vectors from the beam target during Hall thruster operation. Three different beam targets are compared, conical Al target (case 1), flat Al target (case 2), and concave Ti target (case 3). Length of the arrows and colors stand for the magnitude of flux normalized by maximum of the three cases.

Table 5.2. Calculated ingestion mass flow rate and bulk pressure in the case of $s_p = 0.19$. Input mass flow rate is 2 mg/s.

Target type	Direct ingestion mass flow rate, mg/s	Thermal ingestion mass flow rate, mg/s	Total ingestion mass flow rate, mg/s	Bulk pressure, Pa	Effective pumping speed, l/s
Conical Al target	0.002	0.104	0.106	1.14E-03	30,249
Flat Al target	0.012	0.118	0.130	1.30E-03	26,563
Concave Ti target	0.008	0.105	0.113	1.15E-03	29,972

Table 5.3. Calculated ingestion mass flow rate and bulk pressure in the case of $s_p = 1.0$. Input mass flow rate is 2 mg/s.

Target type	Direct ingestion mass flow rate, mg/s	Thermal ingestion mass flow rate, mg/s	Total ingestion mass flow rate, mg/s	Bulk pressure, Pa	Effective pumping speed, l/s
Conical Al target	0.002	0.013	0.015	1.42E-04	244,307
Flat Al target	0.012	0.028	0.040	3.04E-04	113,737
Concave Ti target	0.008	0.022	0.030	2.39E-04	144,366

5.4 まとめ

本章では、ホールスラスタ地上試験で発生する逆流粒子の抑制を目的としたビームターゲットの設計指針と、その効果について議論した。ビームターゲットの設計指針として、第3章、第4章で明らかとなったXeイオンの金属ターゲット表面反射特性、およびクライオポンプのポンプ係数の粒子流入角度依存性から、ビームターゲットの材質はAlとし、ビームターゲット表面で反射した粒子がクライオポンプに流入する角度を0度（垂直入射）に近づける、という指針を置いた。その上で、ホールスラスタとビームターゲットの距離、ビームターゲットの頂角、クライオポンプの位置に関する設計指針として以下の結論が得られた。

- ホールスラスタのプルーム広がりを考慮すると、ホールスラスタとビームターゲットの距離に対するビームターゲット直径の比（ターゲットアスペクト比）が小さくなるほど、ビームターゲットに当たるプルームイオンの割合が低下する。SPT-100のプルーム分布の場合、ターゲットアスペクト比が0.67の時、プルームイオンの7割がビームターゲットに当たる。
- 円錐型ビームターゲットの頂角 θ_{cone} は、ホールスラスタのプルームイオンが持つピーク角度 θ_{peak} とビームターゲットで反射した粒子がクライオポンプに流入する角度 θ_{imp} の関数として表すことができる。ここでポンプ係数を最大化するため $\theta_{\text{imp}}=0$ を設計指針とすると、 θ_{peak} に対応する θ_{cone} が定まる。SPT-100のプルーム分布の場合、 $\theta_{\text{peak}}=7.3$ に対し、 $\theta_{\text{cone}}=46.85$ である。
- クライオポンプ位置はビームターゲットで反射した粒子のチャンバ側壁面上への到達確率密度分布のピーク位置とすることで、高い粒子収集効率を得られる。
- ビームターゲットからクライオポンプ1台当たりに入る粒子が運ぶエネルギーはチャンバのサイズが小さいほど大きくなるため、チャンバサイズが小さい場合はクライオポンプに入るエネルギーが大きくなる。ホールスラスタの投入電力が1kW以下と小さい場合は、ビームターゲットからの輻射による熱負荷が支配的となるが、投入電力が6kW程度でクライオポンプ第1段目の輻射率が0.1程度と小さい場合には、輻射熱と粒子が運ぶエネルギーは同程度になる。

次に、円錐型ビームターゲットを実際のチャンバに設置して得られる逆流粒子抑制効果を空間2次元・速度空間3次元のDSMC計算を行って評価した。その結果、以下の結論が得られた。

- IHIの直径2m長さ3mのスペースチャンバをモデルとし、幅30インチのクライオポンプがチャンバ全周に設定しているという理想的な条件では、円錐型Alターゲットを設置して計算された推進機への逆流粒子流量は、平板型Alターゲットが設置されている場合の37% (1/3) に低減する。

第6章 結論

本研究では、ホールスラスト地上試験で生じる逆流粒子の抑制手法の考案と数値解析による効果検証という目的に対し、円錐型ビームターゲットで反射した反射粒子をクライオポンプへ直接導く反射板として利用する方法を提案し、空間2次元・速度空間3次元のDSMC計算を実施して逆流粒子の抑制効果を評価した。

円錐型ビームターゲットで粒子を誘導する効果を最大化する設計指針を得るためには、ビームターゲット表面で生じる反射粒子の速度ベクトル分布、および誘導された粒子がクライオポンプで排気される確率（ポンプ係数）の入射角依存性を明らかにする必要がある。そこで、分子動力学計算によるXeイオンの金属ビームターゲット表面反射特性評価、および軸対称クライオポンプをモデル化したTPMC計算によるクライオポンプのポンプ係数の粒子流入角度依存性評価を実施し、それぞれについて以下の結論を得た。

- 300 eVで加速されたXeイオンが金属（Al, Ti）で反射して生じたXe粒子の反射フラックス分布はXeイオンの入射角度に依存し、3つのパラメータを用いた拡張CLLモデルで3次元分布が再現可能である。反射したXe粒子の散乱確率密度分布は拡散反射より指向性のある葉状分布を示し、ターゲット材質がTiの場合はAlの場合と比べてより拡散的な分布を示す。
- ポンプ係数は流入角度に依存し、ダクトが取り付けられている場合に粒子の流入角度への依存性が強くなる。

上記のXeイオンの金属ターゲット表面反射特性、クライオポンプのポンプ係数の粒子流入角度依存性に加え、ホールスラストのプルーム広がりを考慮し、円錐型ビームターゲットの設計指針について以下の結論を得た。

- ホールスラストとビームターゲットの距離に対するビームターゲット直径の比（ターゲットアスペクト比）が小さくなるほど、ビームターゲットに当たるプルームイオンの割合が低下する。
- 円錐型ビームターゲットの頂角 θ_{cone} は、ホールスラストのプルームイオンが持つピーク角度 θ_{peak} とビームターゲットで反射した粒子がクライオポンプに流入する角度 θ_{inp} の関数として表すことができる。ここでポンプ係数を最大化するため $\theta_{\text{inp}}=0$ を設計指針とすると、 θ_{peak} に対応する θ_{cone} が定まる。
- クライオポンプ位置はビームターゲットで反射した粒子のチャンバ側壁面上への到達確率密度分布のピーク位置とすることで高い粒子収集効率を得られる。
- クライオポンプへの熱負荷は、ホールスラストの投入電力が1 kW以下と小さい場合は、ビームターゲットからの輻射による熱負荷が支配的となるが、投入電力が

6 kW 程度でクライオポンプ第 1 段目の輻射率が 0.1 程度と小さい場合には、輻射熱と粒子が運ぶエネルギーは同程度になる。

最後に、空間 2 次元・速度空間 3 次元の DSMC 計算より、IHI の直径 2 m 長さ 3 m のスペースチャンバをモデルとし、幅 30 インチのクライオポンプがチャンバ全周に設定しているという条件下では、円錐型 AI ターゲットを設置して計算された推進機への逆流粒子流量は、平板型 AI ターゲットが設置されている場合の 37% (1/3) に低減するという結果が得られ、本研究で考案した手法によって逆流粒子が抑制されることを確認した。

本研究で示された円錐型ビームターゲットによる逆流粒子抑制手法は、今後の実験実証が課題であるが、ホールスラストおよび電気推進機の地上試験の信頼性向上に寄与することが期待される。

謝辞

本論文は様々な方々のお力添えのもとに完成いたしました。まず、熱心なご指導とご鞭撻を賜った指導教員の小紫公也教授に心より御礼申し上げます。社会人博士として再入学し、修士論文とは異なる研究テーマで研究をする機会をいただきました。時に興味関心で研究の脇道に逸れて進んでしまう私に、常に目的を意識して研究の筋道を立てることの重要性を辛抱強く教えていただきました。

小泉宏之准教授には輪講等で、数多くの貴重な助言をいただきました。研究発表の仕方や成果の主張の仕方など、大変参考になりました。深く感謝いたします。

川嶋嶺助教には本研究の大部分を占める数値計算技術に関してご懇篤な指導をいただきました。川嶋嶺助教のご指導なしには、数値計算による研究の経験が全くなかった私が本研究を遂行することは不可能でした。また論文執筆に際して論理的で的確なご助言は大変勉強になりました。ここに深謝の意を表します。

株式会社 IHI の上松さん、桑原さん、淵上さん、田代さん、徳良さん、袖子田さん、川崎君には社会人博士として仕事と研究を両立する上で大変お世話になりました。淵上さんにホールスラストの研究開発に従事する機会をいただき、米国の研究者と最前線で議論を交わして現場を先導するその姿を見て、社会人博士を取得したいという志が一層強くなりました。川崎君にはホールスラスト開発の業務を分担していただき、ジョージア工科大での試験などを進んで引き受けてくれたこと、大変感謝いたします。おかげで大学での研究活動に従事する時間を作ることができました。

ホールスラスト研究班で苦労を共にした朴さん、王さん、Sainadh さん、濱田君、水川君、竹内君、Bas さん、川畑君、ありがとうございます。研究班のセミナーは定期的に議論の時間を確保して研究の方向性を確認する重要な機会でした。朴さんには国際学会にて、その広い人脈による多くの出会いの機会をいただきました。非常に刺激的で、一緒に行く学会は良いモチベーションになりました。

活発な議論にお付き合いいただいた小紫・小泉研究室の皆様に感謝いたします。仕事を離れて研究室での自由な議論の時間は、時に研究のヒントを得られ、また良い息抜きとなる貴重なひと時でした。卒業することでこの時間とお別れを告げるのは非常に惜しくもあります。

最後に、いつも支えてくれる家族と友人たちに心から感謝いたします。妻の明るく献身的な支えがあったからこそ、最後まで研究をやり遂げることができました。これからの私の研究活動を通じて、まだ 0 歳の息子が飛び込んでいく世界の発展に貢献できるよう、さらなる精進を重ねていく決意を記し、本論文の謝辞といたします。

参考文献

- [1] D. Lev, R. M. Myers, K. M. Lemmer, J. Kolbeck, H. Koizumi, and K. Polzin, “The technological and commercial expansion of electric propulsion,” *Acta Astronautica*, vol. 159. Elsevier Ltd, pp. 213–227, 01–Jun–2019.
- [2] H. Watanabe *et al.*, “Performance Evaluation of a Two-Kilowatt Magnetically Shielded Hall Thruster,” *J. Propuls. Power*, vol. 36, no. 1, pp. 14–24, Jan. 2020.
- [3] I. Funaki *et al.*, “Development of a 6-kW-class Hall thruster for geostationary missions,” *Acta Astronaut.*, vol. 170, pp. 163–171, May 2020.
- [4] I. FUNAKI *et al.*, “1,000-hours Demonstration of a 6-kW-class Hall Thruster for All-Electric Propulsion Satellite,” *Trans. JAPAN Soc. Aeronaut. Sp. Sci. Aerosp. Technol. JAPAN*, vol. 17, no. 5, pp. 589–595, 2019.
- [5] S. CHO *et al.*, “Particle Simulation of High Specific Impulse Operation of Low-Erosion Magnetic Layer Type Hall Thrusters,” *Trans. JAPAN Soc. Aeronaut. Sp. Sci. Aerosp. Technol. JAPAN*, vol. 14, no. ists30, p. Pb_165–Pb_171, 2016.
- [6] Y. Hamada *et al.*, “Hall Thruster Development for Japanese Space Propulsion Programs,” *Trans. JSASS*, vol. 60, no. 5, pp. 320–326, 2017.
- [7] N. Yamamoto *et al.*, “Thrust Performance in a 5 kW Class Anode Layer Type Hall Thruster,” *Trans. JSASS Aerosp. Tech. Japan*, vol. 14, no. ists30, pp. 183–187, 2016.
- [8] T. Miyasaka *et al.*, “Interference effects of multi-head operation of anode layer Side by side (SBS) system,” *Vacuum*, vol. 136, pp. 184–189, Feb. 2017.
- [9] M. L. R. Walker and A. D. Gallimore, “Neutral density map of Hall thruster plume expansion in a vacuum chamber,” *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 76, no. 5, pp. 1–10, 2005.
- [10] J. D. Frieman, “Characterization of Background Neutral Flows in Vacuum Test Facilities and Impacts on Hall Effect Thruster Operation,” Georgia Institute of Technology, Doctoral Dissertation, 2017.
- [11] W. G. Tighe, W. A. Cox, N. A. Rongione, M. Nakles, A. Marotto, and R. Spektor, “Use of Real-Time Spectrum Analysis for EMI Characterization of a Safran Hall Thruster,” in *36rd International Electric Propulsion Conference*, 2019, p. IEPC–115–2019.

- [12] J. T. Yim, D. A. Herman, and J. M. Burt, "Modeling Analysis for NASA GRC Vacuum Facility 5 Upgrade," 2013.
- [13] R. W. Conversano, R. R. Hofer, M. J. Sekerak, H. Kamhawi, and P. Y. Peterson, "Performance Comparison of the 12.5 kW HERMeS Hall Thruster Technology Demonstration Units," in *52nd AIAA/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, 2016, p. AIAA-2016-4827.
- [14] A. Passaro, A. Vicini, and L. Biagioni, "Plasma thruster plume simulation: Effect of vacuum chamber environment," in *35th AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference*, 2004.
- [15] F. Scortecci, E. Bonelli, B. Michelozzi, F. Saito, S. Scaranzin, and A. Turco, "Performance of A Large Vacuum Facility for spacecraft propulsion testing," in *4th International Spacecraft Propulsion Conference*, 2004, p. 119.
- [16] F. Scortecci, E. Bonelli, S. Scaranzin, and M. Violetti, "Ground testing for high power electric propulsion-S/C interaction characterisation," in *14th Spacecraft Charging Technology Conference, ESA/ESTEC*, 2016, pp. 04-08.
- [17] S. F. Shang, G. B. Cai, D. Q. Zhu, and B. J. He, "Design of double-layer anti-sputtering targets for plume effects experimental system," *Sci. China Technol. Sci.*, vol. 59, no. 8, pp. 1265-1275, Aug. 2016.
- [18] K. Kinefuchi *et al.*, "Facility Effect Characterization of 6-kW Class Hall Thruster in Newly Developed High Power EP Test Facility," in *AIAA/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference 2018*, 2018, p. AIAA 2018-4510.
- [19] D. L. Brown, M. L. R. Walker, J. Szabo, W. Huang, and J. E. Foster, "Recommended practice for use of faraday probes in electric propulsion testing," *J. Propuls. Power*, vol. 33, no. 3, pp. 582-613, 2017.
- [20] J. W. Dankanich, M. W. Swiatek, and J. T. Yim, "A Step Towards Electric Propulsion Testing Standards: Pressure Measurements and Effective Pumping Speeds," in *48th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit 2012*, 2012, p. AIAA-2012-3737.
- [21] Jonathan A. Walker, "Electrical Facility Effects on Hall Effect Thruster Operation," 2016.
- [22] J. D. Frieman, S. T. King, M. L. R. Walker, V. Khayms, and D. King, "Role of a Conducting Vacuum Chamber in the Hall Effect Thruster Electrical Circuit," *J. Propuls. Power*, vol. 30, no. 6, pp. 1471-1479, Nov. 2014.
- [23] J. D. Frieman *et al.*, "Impact of Propellant Species on Hall Effect Thruster Electrical Facility Effects," *J. Propuls. Power*, vol. 34, no. 3, pp. 600-613, 2018.

- [24] J. D. Frieman, J. A. Walker, M. L. R. Walker, V. Khayms, and D. Q. King, "Electrical Facility Effects on Hall Thruster Cathode Coupling: Performance and Plume Properties," *J. Propuls. Power*, vol. 32, no. 1, pp. 251–264, 2016.
- [25] J. A. Walker, S. J. Langendorf, M. L. R. Walker, V. Khayms, D. King, and P. Pertson, "Electrical facility effects on hall current thrusters: Electron termination pathway manipulation," *J. Propuls. Power*, vol. 32, no. 6, pp. 1365–1377, 2016.
- [26] J. D. Frieman *et al.*, "Electrical facility effects on faraday probe measurements," *J. Propuls. Power*, vol. 34, no. 1, pp. 267–269, Jan. 2018.
- [27] B. M. Reid, "Empirically-Derived Corrections for Facility Effects in Performance and Plume Measurements of Hall Thrusters," in *34th International Electric Propulsion Conference, 2015*, p. IEPC-2015-362 /ISTS-2015-b-362.
- [28] T. Randolph, V. Kim, H. Kaufman, K. Kozubsky, V. Zhurin, and M. Day, "Facility Effects on Stationary Plasma Thruster Testing," in *23rd International Electric Propulsion Conference, 1993*, p. IEPC-93-93.
- [29] K. D. Diamant, R. Spektor, E. J. Beiting, J. A. Young, and T. J. Curtiss, "The Effects of Background Pressure on Hall Thruster Operation."
- [30] W. G. Tighe, R. Spektor, K. D. Diamant, and H. Kamhawi, "Effects of Background Pressure on the NASA 173M Hall Current Thruster Performance," in *Joint Conference of 30th ISTS, 34th IEPC and 6th NSAT, 2015*, p. IEPC-2015-152/ISTS-2015-b-152.
- [31] R. R. Hofer, P. Y. Peterson, and A. D. Gallimore, "Characterizing Vacuum Facility Backpressure Effects on the Performance of a Hall Thruster," in *27th International Electric Propulsion Conference, 2001*, pp. 15–19.
- [32] W. Huang, H. Kamhawi, and T. Haag, "Effect of Background Pressure on the Performance and Plume of the HiVHAc Hall Thruster," in *33rd International Electric Propulsion Conference, 2013*, p. IEPC-2013-058.
- [33] W. Huang, H. Kamhawi, and T. Haag, "Facility Effect Characterization Test of NASA's HERMeS Hall Thruster," *52nd AIAA/SAE/ASEE Jt. Propuls. Conf.*, pp. 1–31, 2016.
- [34] M. L. R. Walker, A. D. Gallimore, M. L. R. Walker, and A. D. Gallimore, "Performance Characteristics of a Cluster of 5-kW Laboratory Hall Thrusters," *J. Propuls. Power*, vol. 23, no. 1, pp. 35–43, Jan. 2007.

- [35] J. W. Dankanich, M. Walker, M. W. Swiatek, and J. T. Yim, "Recommended Practice for Pressure Measurement and Calculation of Effective Pumping Speed in Electric Propulsion Testing," *J. Propuls. Power*, vol. 33, no. 3, pp. 1–18, 2017.
- [36] J. T. Yim and J. M. Burt, "Characterization of Vacuum Facility Background Gas Through Simulation and Considerations for Electric Propulsion Ground Testing," in *51st AIAA/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, 2015, p. AIAA 2015–3825.
- [37] K. D. Diamant, R. Liang, and R. L. Corey, "The Effect of Background Pressure on SPT–100 Hall Thruster Performance," in *50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, 2014.
- [38] C. Cai, I. D. Boyd, and Q. Sun, "Free molecular background flow in a vacuum chamber equipped with two-sided pumps," *J. Vac. Sci. Technol. A J. Appl. Phys. J. Appl. Phys.*, vol. 24, no. 115, pp. 11101–203304, 2006.
- [39] W. A. Hargus, and M. A. Cappelli, "Laser-induced fluorescence measurements of velocity within a Hall discharge," *Appl. Phys. B Lasers Opt.*, vol. 72, no. 8, pp. 961–969, 2001.
- [40] E. J. Beiting and M. L. Garrett, "Facility for high-fidelity electromagnetic compatibility studies of electric thrusters," in *43rd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, 2007, vol. 4, pp. 3235–3244.
- [41] H. Kuninaka, S. Satori, I. Funaki, Y. Shimizu, and K. Toki+, "Endurance Test of Microwave Discharge Ion Thruster System for Asteroid Sample Return Mission MUSES–C," in *25th International Electric Propulsion Conference*, 1997, p. IEPC–97–137.
- [42] J. H. Gilland, G. J. Williams, J. M. Burt, and J. T. Yim, "Carbon back sputter modeling for hall thruster testing," in *52nd AIAA/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference, 2016*, 2016.
- [43] H. Zheng, G. Cai, L. Liu, S. Shang, and B. He, "Three-dimensional particle simulation of back-sputtered carbon in electric propulsion test facility," *Acta Astronaut.*, vol. 132, pp. 161–169, Mar. 2017.
- [44] B. Leonardo, P. Andrea, and A. Mariano, "Particle Simulation of Tailored Vacuum Pumping Configurations for Electric Propulsion Testing," in *4th International Symposium on Environmental Testing for Space Programmes*, 2001.
- [45] Y. Nakayama, "Propellant Flow Analysis within Electric Propulsion Test Facility," *Trans. JAPAN Soc. Aeronaut. Sp. Sci. Aerosp. Technol. JAPAN*, vol. 17, no. 3, pp. 276–281, 2019.
- [46] S. Roger, *Atomic and Ion Collisions in Solids and at Surfaces. Theory, Simulation, and Applications*. Cambridge University Press, 2005.

- [47] H. Winter, "Collisions of atoms and ions with surfaces under grazing incidence," *Phys. Rep.*, vol. 367, no. 5, pp. 387–582, 2002.
- [48] A. Redinger, Y. Rosandi, H. M. Urbassek, and T. Michely, "Grazing incidence ion erosion in the presence of adsorbates," *New J. Phys.*, vol. 11, 2009.
- [49] J. W. Rabalais, *Low energy ion-surface interactions*. Chichester, UK: Wiley, 1994.
- [50] H. F. Winters, H. J. Coufal, and W. Eckstein, "Influence of energy reflected from the target on thin film characteristics," *J. Vac. Sci. Technol. A*, vol. 11, pp. 657–663, 1993.
- [51] V. S. Chernysh, W. Eckstein, A. A. Haidarov, V. S. Kulikauskas, E. S. Mashkova, and V. A. Molchanov, "Angular distributions of particles sputtered from polycrystalline platinum by low-energy ions," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 164, pp. 755–761, 2000.
- [52] H. Gades and H. M. Urbassek, "Energy deposition, reflection and sputtering in hyperthermal rare-gas Cu bombardment," 1995.
- [53] J. Wayne Rabalais, "Low energy ion scattering and recoiling," *Surf. Sci.*, vol. 299–300, pp. 219–232, Jan. 1994.
- [54] J. Lu and C. G. Lee, "Numerical estimates for energy of sputtered target atoms and reflected Ar neutrals in sputter processes," *Vacuum*, vol. 86, no. 8, pp. 1134–1140, Feb. 2012.
- [55] X. W. Zhou, H. N. G. Wadley, and S. Sainathan, "Low energy sputtering of nickel by normally incident xenon ions," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 234, no. 4, pp. 441–457, Jul. 2005.
- [56] E. S. Wise, M. S. Liu, and T. Miller, "Sputtering of cubic metal crystals by low-energy xenon-ions," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 107, pp. 102–109, 2015.
- [57] G. Hobler and G. Betz, "On the useful range of application of molecular dynamics simulations in the recoil interaction approximation," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 180, no. 1–4, pp. 203–208, 2001.
- [58] H. H. Andersen, "Sputtering from atomic-collision cascades," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. B*, vol. 33, no. 1–4, pp. 466–473, 1988.
- [59] Y. Yamamura, "Contribution of anisotropic velocity distribution of recoil atoms to sputtering yields and angular distributions of sputtered atoms," *Radiat. Eff.*, vol. 55, no. 1–2, pp. 49–55, 1981.

- [60] Y. Yamamura and H. Tawara, "Energy dependence of ion-induced sputtering yields from monatomic solids at normal incidence," *At. Data Nucl. Data Tables*, vol. 62, no. 2, pp. 149–253, 1996.
- [61] Z. L. Zhang and L. Zhang, "Anisotropic angular distribution of sputtered atoms," *Radiat. Eff. Defects Solids*, vol. 159, no. 5, pp. 301–307, May 2004.
- [62] R. P. Doerner, D. G. Whyte, and D. M. Goebel, "Sputtering yield measurements during low energy xenon plasma bombardment," *J. Appl. Phys.*, vol. 93, no. 9, pp. 5816–5823, May 2003.
- [63] T. Muramoto and T. Hyakutake, "MD Study on Carbon Sputtering and Redeposition," *Trans. Japan Soc. Aeronaut. Sp. Sci. Aerosp. Technol. Japan*, vol. 10, no. ists28, pp. 97–101, 2012.
- [64] T. Kenmotsu and M. Wada, "Effects of Accumulation of Impurities into Target Materials for Sputtering," *Trans. Japan Soc. Simul. Technol.*, vol. 4, no. 4, pp. 153–159, 2012.
- [65] I. Funaki *et al.*, "1,000-hours Demonstration of a 6-kW-class Hall Thruster for All-Electric Propulsion Satellite," *Trans. Japan Soc. Aeronaut. Sp. Sci. Aerosp. Technol. Japan*, vol. 17, no. 5, pp. 589–595, 2019.
- [66] K. de Grys, C. Rayburn, F. Wilson, J. Fisher, L. Werthman, and V. Khayms, "BPT-4000 Multi-Mode 4.5 KW Hall Thruster Qualification Status," in *39th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit*, 2003.
- [67] 南部健一, 数值流体力学. 東京: 東大出版会, 1992.
- [68] G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. New York: Oxford Univ. Press, 1994.
- [69] K. Nanbu, "Direct Simulation Scheme Derived from the Boltzmann Equation. I. Monocomponent Gases," *J. Phys. Soc. Japan*, vol. 49, no. 5, pp. 2042–2049, Nov. 1980.
- [70] E. Roohi and S. Stefanov, "Collision partner selection schemes in DSMC: From micro/nano flows to hypersonic flows," *Phys. Rep.*, vol. 656, pp. 1–38, 2016.
- [71] M. Balooch, M. J. Cardillo, D. R. Miller, and R. E. Stickney, "Molecular beam study of the apparent activation barrier associated with adsorption and desorption of hydrogen on copper," *Surf. Sci.*, vol. 46, no. 2, pp. 358–392, Dec. 1974.
- [72] N. Yamanishi, Y. Matsumoto, and K. Shobatake, "Multistage gas-surface interaction model for the direct simulation Monte Carlo method," *Phys. Fluids*, vol. 11, pp. 3540–3552, 1999.
- [73] Lord and R. G., "Application of the Cercignani-Lampis Scattering Kernel to Direct Simulation Monte Carlo Calculations," *Rarefied Gas Dyn. 17th Int. Symp. Rarefied Gas Dyn. 1989*, pp. 1427–1433, 1989.

- [74] D. S. Watvisave, U. V. Bhandarkar, and B. P. Puranik, "Investigation of wall effects on flow characteristics of a high knudsen number nozzle," *Nanoscale Microscale Thermophys. Eng.*, 2013.
- [75] Z. Yar, M. Myint, Y. I. Khlopkov, Y. I. Khlopkov, and A. Y. Khlopkov, "Application of Gas-Surface Interaction Models in Rarefied Hypersonic Flows," *Phys. Tech. Sci.*, vol. 2014, no. 1, pp. 1-7, 2014.
- [76] A. Walker, P. Mehta, and J. Koller, "Drag Coefficient Model Using the Cercignani-Lampis-Lord Gas-Surface Interaction Model," *J. Spacecr. Rockets*, vol. 51, no. 5, pp. 1544-1563, 2014.
- [77] J. F. Padilla and I. D. Boyd, "Assessment of Gas-Surface Interaction Models in DSMC Analysis of Rarefied Hypersonic Flow," *J. Thermophys. Heat Transf.*, vol. 23, no. 1, pp. 96-105, 2009.
- [78] G. Zuppari, L. Morsa, R. Savino, M. Sippel, and T. Schwanekamp, "Rarefied aerodynamic characteristics of aero-space-planes: a comparative study of two gas-surface interaction models," *Eur. J. Mech. B/Fluids*, vol. 53, pp. 37-47, 2015.
- [79] I. Borges Sebastião, W. F. N. F. Santos, I. B. Sebastião, and W. F. N. F. Santos, "Gas-surface interaction impact on heat transfer and pressure distributions of a high speed microchannel flow," *Appl. Therm. Eng.*, vol. 62, no. 1, pp. 58-68, Jan. 2014.
- [80] M. O. Hedahl and R. G. Wilmoth, "Comparisons of the Maxwell and CLL Gas/Surface Interaction Models Using DSMC," 1995.
- [81] B. Y. Cao, J. Sun, M. Chen, and Z. Y. Guo, "Molecular momentum transport at fluid-solid interfaces in MEMS/NEMS: A review," *International Journal of Molecular Sciences*, vol. 10, no. 11, pp. 4638-4706, Nov-2009.
- [82] A. Agrawal and S. V. Prabhu, "Survey on measurement of tangential momentum accommodation coefficient," *J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film.*, vol. 26, no. 4, pp. 634-645, Jul. 2008.
- [83] E. D. Knechtel and W. C. Pitts, "Experimental momentum accommodation on metal surfaces of ions near and above earth-satellite speeds," in *Proceedings of the 6th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, 1969, pp. 1257-1278.
- [84] W. M. Trott, D. J. Rader, J. N. Castañeda, J. R. Torczynski, and M. A. Gallis, "Measurement of Gas-Surface Accommodation," *AIP Conf. Proc.*, vol. 1084, no. 1, p. 628, 2008.
- [85] N. Selden, N. Gimelshein, S. Gimelshein, and A. Ketsdever, "Analysis of accommodation coefficients of noble gases on aluminum surface with an experimental/computational method," *Phys. Fluids*, vol. 21, no. 7, p. 073101, Jul. 2009.

- [86] J. Sun and Z.-X. Li, “Two-dimensional molecular dynamic simulations on accommodation coefficients in nanochannels with various wall configurations,” *Comput. Fluids*, vol. 39, no. 8, pp. 1345–1352, 2010.
- [87] S. K. Prabha and S. P. Sathian, “Molecular-dynamics study of Poiseuille flow in a nanochannel and calculation of energy and momentum accommodation coefficients,” *Phys. Rev. E*, vol. 85, no. 4, p. 041201, 2012.
- [88] H. Yamaguchi, Y. Matsuda, and T. Niimi, “Molecular-dynamics study on characteristics of energy and tangential momentum accommodation coefficients,” *Phys. Rev. E*, vol. 96, no. 1, p. 013116, 2017.
- [89] 北川 浩, “分子動力学法の考え方,” 日本ゴム協会誌, vol. 72, no. 11, pp. 632–638, 1999.
- [90] 岡田勲 and 大澤映二, *分子シミュレーション入門岡田勲, 大澤映二 - 海文堂, 198*. 1989.
- [91] L. Bukonte, F. Djurabekova, J. Samela, K. Nordlund, S. A. Norris, and M. J. Aziz, “Comparison of molecular dynamics and binary collision approximation simulations for atom displacement analysis,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 297, pp. 23–28, 2013.
- [92] K. M. Beardmore and N. Grønbech-Jensen, “Efficient molecular dynamics scheme for predicting dopant implant profiles in semiconductors,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 153, no. 1–4, pp. 391–397, 1999.
- [93] “Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator, LAMMPS.” [Online]. Available: <http://lammps.sandia.gov>. [Accessed: 15-Aug-2019].
- [94] J. M. Winey, A. Kubota, and Y. M. Gupta, “A thermodynamic approach to determine accurate potentials for molecular dynamics simulations: Thermoelastic response of aluminum,” *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 17, no. 5, 2009.
- [95] M. I. Mendeleev, T. L. Underwood, and G. J. Ackland, “Development of an interatomic potential for the simulation of defects, plasticity, and phase transformations in titanium,” *J. Chem. Phys.*, vol. 145, no. 15, 2016.
- [96] “NIST Interatomic Potentials Repository Project.” [Online]. Available: <https://www.ctcms.nist.gov/potentials/>. [Accessed: 13-Jul-2020].
- [97] W. Huang, R. Shastry, D. A. Herman, G. C. Soulas, and H. Kamhawi, “A new method for analyzing near-field faraday probe data in hall thrusters,” in *49th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, 2013, p. AIAA 2013-4118.

- [98] A. Stukowski, "Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool," *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 18, no. 1, p. 015012, Dec. 2010.
- [99] D. L. Brown, "Investigation of low discharge voltage Hall thruster characteristics and evaluation of loss mechanisms," The University of Michigan, Doctoral Dissertation, 2009.
- [100] R. Pfandzelter, "Effects of defect structures at surfaces and thin films on grazing scattering of fast ions," *Phys. Rev. B – Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 57, no. 24, pp. 15496–15506, 1998.
- [101] Y. Rosandi, A. Redinger, T. Michely, and H. M. Urbassek, "Influence of a single adatom on sputtering at grazing incidence – A molecular-dynamics case study of 5 keV Ar impact on Pt (1 1 1)," *Surf. Sci.*, vol. 603, no. 2, pp. 320–325, 2009.
- [102] M. Tartz, T. Heyn, C. Bundesmann, C. Zimmermann, and H. Neumann, "Sputter yields of Mo, Ti, W, Al, Ag under xenon ion incidence," *Eur. Phys. J. D*, vol. 61, no. 3, pp. 587–592, 2011.
- [103] D. Rosenberg and G. K. Wehner, "Sputtering Yields for Low Energy He⁺, Kr⁺, and Xe⁺-Ion Bombardment," *J. Appl. Phys.*, vol. 33, no. 5, pp. 1842–1845, 1962.
- [104] G. Ito, R. Kawashima, K. Komurasaki, and H. Koizumi, "Incident angle dependence of reflected particles in low-energy xenon-ion impacts on metal surfaces," *Comput. Mater. Sci.*, 2020. –Accepted.
- [105] A. Bondi, "Van der waals volumes and radii," *J. Phys. Chem.*, vol. 68, no. 3, pp. 441–451, 1964.
- [106] G. Ito, R. Kawashima, K. Komurasaki, and H. Koizumi, "Inflow angular dependence of the capture coefficient in cryopumps," *Vacuum*, vol. 160, pp. 102–108, Feb. 2019.
- [107] O. A. Mitrofanova, R. Y. Gnizdor, V. M. Murashko, A. I. Koryakin, and A. N. Nesterenko, "New generation of SPT-100," in *32nd International Electric Propulsion Conference*, 2011, p. IEPC-2011-041.
- [108] C. E. Garner, J. R. Polk, J. R. Llophy, and K. Goodfellow, "Methods For Cryopumping Xenon," in *32th Joint Propulsion Conference*, 1996, p. AIAA-96-3206.