Draft version April 25, 2023 年使用
AASTeX631 中的 LATEX 默认样式排版

arXiv:2304.12048v1 [astro-ph.EP] 24 Apr 2023

用于建模且与实验数据一致的新型化合物与混合键能溅射模型

Noah Jäggi Andreas Mutzke,[2] Herbert Biber ,[3] Johannes Brötzner ,[3] Paul Stefan Szabo ,[4] Friedrich Aumayr ,[3] Peter Wurz ,[1] and André Galli

[1] *Physikalisches Institut, University of Bern, Sidlerstrasse 5, CH-3012 Bern, Switzerland*
[2] *Max Planck Institute for Plasma Physics (IPP), D-17491 Greifswald, Germany*
[3] *Institute of Applied Physics, TU Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10/E134, A-1040 Vienna, Austria*
[4] *Space Sciences Laboratory, University of California, 7 Gauss Way, Berkeley, 94720 CA, USA*

提交至《行星科学杂志》

摘要

遭受太阳风溅射的岩质行星和卫星不断向其包围的外逸层补充喷出的中性原子。为了了解喷出物的数量和性质，研究人员主要使用成熟的二元碰撞近似蒙特卡罗代码，例如采用默认设置的 TRIM。随后出现了 SDTrimSP 等改进模型；结合新的实验数据，这些模型对原有假设提出了质疑。我们介绍一种混合模型，将先前的表面结合方法与一种类似于Hofs¨ass & Stegmaier (2022年)的全新体相结合模型相结合。此外，我们扩展了模型的实现方式，将矿物化合物（如氧化物或硫化物）中的自由组分与束缚组分区分开来。使用氧化物和硫化物还能正确设定矿物的质量密度；此前，这一功能仅能通过手动设定各元素的原子密度来实现。因此，所用的所有能量和密度均基于列表数据，只需极少的用户输入，也无需拟合参数。我们发现，对于最高达 45° （相对于表面法线）的入射角，新实现的混合模型与先前发表的溅射产额达到了前所未有的一致性。对于顽火辉石 MgSiO 中溅射质量的角分布，模型结果与最新实验数据吻合良好[3] 。能量分布再现了氧化金属实验数据所呈现的趋势。未来的矿物实验数据预计也会呈现类似趋势。因此，该模型能够满足岩质天体外逸层建模的广泛适用性和易用性需求。

关键词： 太阳风、外逸层、水星（行星）、月球、溅射

1. 引言

近年来，人们开展了多项研究，以更好地约束暴露于高能太阳风离子下的岩质行星天体的侵蚀过程。这包括研究表面粗糙度（Biber 等人（2022））和孔隙率（Szabo 等，2022b）的影响，开展离子辐照实验并进行质量产额测量（例如，Hijazi等，2017年；Szabo等，2018年，2020a；Biber 等人（2022）），以及基于理论提出新的表面与体结合能模型（Hofs¨ass & Stegmaier 2022；Morrissey等，2022年）。在本研究中，我们讨论密度参数及其在 SDTrimSP 中的纳入方式（Mutzke 等，2019），以及一种新的混合结合能模型。该模型无需调整输入参数，即可可靠地完全重现实验溅射产额。这一新方法将为

通讯作者： Noah J¨
aggi noah.jaeggi@unibe.ch

模拟离子溅射对外逸层的贡献提供有价值的Pfleger et al. 2015；Suzuki et al. 2020；Killen et al.2022；Kazakovetal. 2022）工具。

1.1. 暴露的岩石表面的空间风化

暴露在太空中的天体会受到太阳风辐照。太阳风的主要成分氢$^{+}$和氦$^{2+}$的动能约为 1 千电子伏特/原子质量单位，相当于约 440 千米/秒（Wurz 2005；Gershman 等人（2012）；Winslow 等人（2013）；Baker 等人（2013））。当撞击表面时，大多数离子会被中和并进入样品，其中一部分会以中性粒子甚至离子的形式发生反射（Lue 等人（2011）；Vorburger 等人（2013））。进入样品的离子会引发碰撞级联，并可能将粒子以超热能量从近表面区域溅射出来。这一过程会改变表面成分并产生晶格缺陷，进而导致非晶化（Betz & Wien 1994；Loeffler 等人（2009）；Dukes 等人（2011）；Domingue 等人（2014））。

离子溅射会从表面释放出原子，其典型速度显著低于入射离子（例如 Thompson 1968），但仍足以形成延展的外逸层，其中相当一部分原子的速度超过包括月球（2.4 km/s）和水星（4.3 km/s）在内的任何小天体的逃逸速度（例如，Wurzet al. 2007、2010年）。这种外逸层使地面观测站以及月球上的 LADEE 和 LRO 等空间探测任务（Paige etal. 2010；Elphic et al. 2014）和水星上的 MESSENGER（Solomon et al. 2001；McNutt Jret al. 2018）或未来的 BepiColombo（Benkhoff et al. 2010；Milillo et al. 2020；Orsini et al. 2020）能够对其进行探测。这些观测数据早期被用于根据预期对外逸层产生贡献的四个主要过程，自洽地建立水星表面成分模型：太阳风离子溅射、微流星体撞击汽化、光子激发解吸和热解吸（Madey et al. 2002；Mura et al. 2009；Wurz et al.2010；Gamborino & Wurz2018；Wurz et al. 2022年）。

区分源自表面的外逸层物种所必需的一项重要信息，是喷出物质特定于过程的能量分布。例如，太阳风离子溅射和微流星体撞击汽化都参与为水星外逸层中的高能粒子群提供难熔物种（如钙和镁），而光子激发解吸则主导高能挥发性和中等挥发性物种（即钠、钾和硫）的供给 Mangano 等 (2007年); Cassidy 等 (2015年); Schaible 等 (2020年); Janches 等 (2021年); Grava 等 (2021年）。正如导致这些过程的粒子的通量或沉降率仍在进一步约束中一样（即水星尖点区太阳风溅射中的质子沉降，见 Fatemi 等 2020年； Raines 等 2022年； Glass 等 2022年），对基础物理的理解也仍在不断完善。在月球上，沉降率似乎相对容易计算，但月球穿过地球磁尾以及局部地壳磁场的存在，使该系统变得更加复杂（例如，Lue 等 2011年； Poppe 等 2018年； N´enon 和 Poppe 2020年）。

1.2. 溅射模型

为了高效地对离子诱导溅射进行建模，通常会使用二元碰撞近似（BCA）模型。二元碰撞近似代码会跟踪粒子在样品中的运动过程及其引起的反冲粒子，而这些反冲粒子也会在整个样品中被持续跟踪。目前有许多不同的模型可供使用，但我们将重点关注基于蒙特卡罗、应用最为广泛的 TRIM 代码（Biersack 和 Haggmark 1980），该代码包含于 SRIM软件包（Ziegler 等，2010）中；此外还将关注其后继者 SDTrimSP（Mutzke 等，2019）。SDTrimSP 是静态 TRIM.SP（Biersack 与 Eckstein（1984））和动态 TRYDIN（M¨oller &Eckstein 1984）的整合改进版本。

研究表明，与矿物的实验产额相比，TRIM 会高估溅射产额（Szabo等，2018年）。外逸层建模人员需要更加准确、符合当前溅射最新认识的输入数据。针对如何最佳地重现实验数据，已有多项建议。以下介绍了奠定当前先进溅射建模预期及其局限性的主要贡献。

- Schaible 等 （2017）调整了氧结合能，以更好地拟合早期关于 Al 溅射的实验数据$_2O_3$ 和 SiO_2 （Roth 等 1979；Ken Knight 和 Wehner 1967）。提高氧结合能会降低氧产额，但不足以显著改善拟合效果。

- Szabo 等 (2020a) 指出，要使受照射样品的质量产额与 SDTrimSP 最为吻合，可采取以下措施：a) 调整原子密度以获得适当的样品密度；b) 将氧的表面结合能（SBE）调整为 6.5 电子伏特；c) 将各元素的表面结合能（SBE）设为样品中所有元素表面结合能的平均值。由此得到的表面结合能高度依赖于氧浓度。

样品（附录 A）。尽管我们发现这些参数对各种硅酸盐都较为适用，但这些修正是否具有普遍性仍值得怀疑。

• Morrissey 等（2022年）使用分子动力学确定了表面结合能，并指出，由于单一组分结合能增加，所有表面物种的溅射产额均有所降低。然而，物种特异性表面结合能的获取受到限制，使这些结果无法应用于广泛的矿物。每种目标矿物体系的原子间势可用性有限，也是造成这一问题的原因。

• Hofs¨ass 与 Stegmaier（2022年）提出完全忽略表面结合能，转而仅使用列表数据中的体结合能。这样，离开样品的粒子无需克服表面势，而是在每次反冲过程中损失能量。尽管他们仅使用列表数据设定体结合能，并为粒子追踪的截止能量提出了合理的物理约束，但仍需采用未公开说明程度的注入，才能与实验数据取得良好一致。

• Biber 等（2022年）使用自行开发的光线追踪代码 SPRAY（Cupak 等，2021），结合 SDTrimSP 数据和原子力显微镜图像，讨论了表面粗糙度对粉末压片和平面玻璃态薄膜溅射产额的影响。他们发现，粗糙的压片表面会降低产额，尤其是在浅入射角下（相对于表面法线大于 $45°$ ）。这种产额降低的原因与表面粗糙度导致局部入射角变浅、遮蔽以及材料再沉积有关。有关粗糙表面溅射模型的详细综述，参见 K¨ustner 等（1998）和 Arredondo 等（2019）。

所有这些模型在密度、结合能、截止能量或粗糙度方面都需要不同程度地调整参数。为了充分描述真实表面上的溅射过程，必须考虑粗糙度。本研究未考虑这一效应，因为我们关注的是样品内部的基本溅射物理过程，而该过程不受影响入射离子和喷出物轨迹的属性左右。因此，我们将结果与实验薄膜数据进行比较，这些数据被视为来自平坦表面 Biber 等 (2022年)。我们提出了一种新的化合物模型，用于获得现实的初始矿物密度；同时提出一种混合结合能模型，以列表数据为基础提高结合能，从而再现实验结果。

2. 计算方法

2.1. 模型参数

使用 SDTrimSP 计算了多种不同模型的角度相关溅射产额，并与大量实验数据进行比较。为在 SDTrimSP 中获得良好的统计结果，我们针对 7.7×10^6 至 31×10^6个入射粒子进行建模，涵盖 19 种入射角；这些入射角相对于表面法线，范围从 $0°$ 到 $89°$ （Mutzke 等，2019）。步长设置为逐渐减小：在入射方向接近表面法线时，初始步长为 $10°$ ；对于 80–$88°$ 的入射角，步长降至 $2°$。我们收集了最多 10^6 个离开样品的反冲粒子，并根据最后 10^5 个反冲粒子进行统计。数据包含物种名称、终止能量、方位角和天顶角。本文各图所示数据的拟合方法见第 2.5 节。所有 SDTrimSP 计算均采用非弹性损失模型七（inel = 7），该模型基于 Lindhard-Scharff 阻止本领模型（Lindhard 与 Scharff 1961）确定样品中的非弹性损失，除非有可用的修正数据（例如，Ziegler 与 Biersack 1985 中关于氢和氦的表格）。关于 SDTrimSP 的详细说明，建议读者参阅相关文献（例如，Mutzke 等，2019）。

受辐照样品的表面成分在达到平衡之前表现出明显的注量依赖性。这一点已由 Baretzky 等 (1992) 针对氧化物 Ta_2O_5, 进行了展示；Szabo 等 (2020b) 则以矿物实验溅射数据的注量依赖性形式进行了说明。此外，使用 SDTrimSP 的动态模式能够最佳地再现实验溅射产额（Szabo 等 2020b）。因此，本文中的所有计算均采用 SDTrimSP 的动态模式进行，所得结果对应于与入射离子达到平衡的表面产生的喷出物。对于氦辐照，注量设为 750 at./$\mathring{A}^3$ 而氢辐照所需的注量最高可达 3000 at./$\mathring{A}^3$ （或 $3 \times 10^{19}\,\mathrm{at./cm^3}$），在某些模型中采用法向入射。动态模式允许样品随离子注量发生变化，并且能够最佳地模拟样品成分与太阳风离子达到平衡的过程，从而再现实验溅射产额的注量依赖性。具体而言，SDTrimSP 中的样品具有

无限横向范围，垂直方向上则包含有限数量的层。在本研究中，所有层最初均具有相同的组成集合，厚度为 10 Å。每经过一个约由 10^5 个撞击粒子组成的注量步长，样品内各层便会根据上一个步长中损失或获得的组分进行更新。

直接比较了 SRIM 与 SDTrimSP 在质量产额（amu ion^{-1}）方面的计算结果。在 SRIM（Ziegler 等 2010）中，我们模拟了 10^5 入射氢离子和氦离子，以获得静态溅射产额结果并取得良好的统计数据。我们采用了“单层碰撞步长/表面溅射”损伤模型。矿物密度设为默认密度，该密度由 SRIM 根据元素组分的原子密度参数计算得出（与 SDTrimSP 中基于列表数据得到的密度相当，见表 ρ_{atomic}，1）。

现在我们将介绍几项用于模拟矿物溅射的特定参数设置，包括 SDTrimSP 的动态模式、引入结合能的不同方式（其中包括我们新增的方法），以及一种校正样品密度的新方法。

2.2. 结合能

粒子从表面移除的效率，即溅射产额，部分取决于系统的总结合能。二体碰撞近似模型通常采用两种结合能：表面结合能（SBE）和体结合能（BBE）。前者表现为一种表面势，粒子必须克服该势才能离开样品。后者则是从每个反冲粒子的能量中扣除的能量，用于模拟 SDTrimSP 这一不考虑矿物晶格的模型中相邻原子之间的相互作用。在保持结合能总和不变的同时，可以获得恒定的产额（M¨oller 和 Posselt 2001）。下面简要介绍三种不同的结合能模型，其中两种（纯 SBE 或 BBE 模型）已广泛应用，另一种则将二者结合起来（SBE + BBE）。这些模型汇总于表 2。

2.2.1. *SB: Surface binding model*

表面结合（SB）模型是 TRIM 和 SDTrimSP 的默认计算模型。在此方法中，只有当粒子的动能超过表面结合能时，它才能离开样品。能量损失通过碰撞期间的弹性能量传递和非弹性电子损失发生。

虽然表面结合能是由相邻原子的吸引力决定的能量（Sigmund 1969；Gades& Urbassek1992），但通常会将表面结合能近似为原子升华焓（ΔH_S）。例外是气体，其表面结合能依据解离焓确定。例如，纯氧不会形成固体，因此使用氧的解离焓 ΔH_{diss}（O_2），而非升华焓。Hobler 和 Morrissey 表明，对于硅和钠，原子升华焓会严重低估从晶体结构中移除一个原子所需的能量（Hobler 2013；Morrissey 等 2022）。这是通过分子动力学（MD）计算确定的，此类计算会考虑原子之间的化学键。迄今为止，这一结果仅在霞石（$NaAlSiO_4$，Martinez 等 2017）中得到初步验证；其中溅射出的次级钠$^+$ 离子在约 2.4 电子伏特处的能量分布出现峰值，据此推定钠的表面结合能为 4.8 电子伏特（Morrissey 等 2022）。这一数值是表列值 1.1 电子伏特的 4.3 倍。有趣的是，Martinez 等（2017）关于次级钾$^+$ 离子的结果表明，钾的表面结合能可能为 4 电子伏特，同样是表列值 0.93 电子伏特的 4.3 倍。Morrissey 等（2022）还发现，在斜长石——行星表面上主要的含钠矿物——中，钠端元钠长石（$NaAlSi_3O_8$）的表面结合能增至 7.9 电子伏特，这会使钠长石的钠溅射产额降低 15 倍。因此，分子动力学结果表明，表面结合能与钠配位数（相邻原子的数量）呈正相关。

受损表面的表面结合能（SBE），或者如Hofs¨ass & Stegmaier（2022年所述，矿物晶胞的非标准取向与分子动力学模拟中采用的理想条件有何不同，目前尚不清楚。此外，二次离子的能量分布未必能代表相应的中性粒子，因为溅射粒子的中和过程取决于能量，这可能导致离子能量分布明显向低能方向偏移（Benninghoven et al. 1987；Van der Heide 2014）。另一个增加中性粒子与离子能量分布之间关联不确定性的例子来自Betz (1987)：他指出，持续氧化的钡表面溅射出的基态钡，与亚稳态钡（源自短寿命激发态钡的衰变）以及未氧化表面产生的钡离子相吻合。未氧化表面产生的基态钡表现出明显较低的峰值能量，这可能与 ΔH_S有关。离子、亚稳态原子和基态原子的能量分布彼此吻合，并且超过 ΔH_S。离子和亚稳态原子具有较高能量，被认为是由基质依赖的电离过程造成的（例如，Dukes& Baragiola2015）；而能量升高

氧化样品溅射出的基态原子能量升高，迄今仍未得到充分理解，而且取决于处理方式，例如最初进行一次氧化，或如Betz (1987)所述持续氧化。可以确定的是，原子的位移和移除会改变样品内的化学键，进而改变配位数，因此也会改变移除原子所需克服的结合能。样品中原子之间的原子间势最终会远离平衡状态，而由于计算负荷较大，分子动力学模拟通常会忽略这一点（Behrisch & Eckstein 2007）。最后，Hobler (2013)比较了分子动力学与二体碰撞近似（BCA）的结果，并得出结论：即使不考虑矿物的晶体结构，二体碰撞近似中的升华焓近似也能很好地再现实验数据。其原因在于，在分子动力学模拟中，产额的增加与缺陷产生的增加相关联，而后者最终抵消了较高表面结合能（SBE）的影响。对于分子动力学模型所预测的较高表面结合能，应谨慎看待；但可以确定的是，为了最佳拟合实验数据，必须使样品内的能量损失总体增加。

2.2.2. *BB: Bulk binding model*

体结合（BB）模型最近由Hofs¨ass & Stegmaier （2022年）提出。该模型将 SBE 设为零，同时为每个组分设定一个 BBE；组分要从其样品中释放出来，必须克服该 BBE，而该能量会在每次反冲过程中损失。对于单组分样品，作者采用了升华焓（E_s）（即表面结合模型中用作 SBE 的表列值）。对于二元化合物，例如矿物中的氧化物和硫化物，在克服每个组分的升华焓之前，还必须先克服生成焓（ΔH_f），从而增加样品中的能量损失（如Dullni 1984早先所提出的那样）。

在 SDTrimSP 中，BB模型的实现方式与上述类似，但略有不同。在确定 E_{bulk} （表 2）时，会忽略在标准条件下形成气体的物种的升华焓。这基于这样的假设：例如，分解 SiO_2时，氧已经处于气态，因此无需升华，而硅则不同。以 E_{bulk} （或 BBEs）为例，二元化合物 SiO_2 中各元素的数值在 SDTrimSP 中实现为：

$$\begin{aligned} E_{bulk}(\mathrm{Si}) &= E_s(\mathrm{Si}) + \frac{\Delta H_f(\mathrm{SiO_2})}{m+n} \\ &= 4.664\,\mathrm{eV} + \frac{9.441\,\mathrm{eV}}{3} = 7.701\,\mathrm{eV} \\ E_{bulk}(\mathrm{O}) &= \frac{\Delta H_f(\mathrm{SiO_2})}{m+n} \\ &= \frac{9.441\,\mathrm{eV}}{3} = 3.147\,\mathrm{eV}, \end{aligned} \tag{1}$$

其中 m 和 n 分别为化合物（Si_mO_n）中硅和氧的组分数。在 SDTrimSP 中，该模型以表面结合模型八（isbv $= 8$）实现，但仅在使用第2.4.2节介绍的新密度模型时可用。

将 SBE 设为零且仅使用体结合能（BBE）的一个副作用是缺少平面吸引势，因此溅射粒子不会向更大的发射角发生折射（Roth 等（1983）；Gades & Urbassek 1992；Jackson 1975；Hofs¨ass & Stegmaier 2022）。粒子离开样品表面时，若必须克服表面势，其折射程度与粒子能量相对于必须克服的势能之比成正比（Thompson 1968；Sigmund 1969）：

$$\sin(\theta_1) = \sqrt{\frac{E_0}{E_0 - E_{\mathrm{sbe}}}}\sin(\theta_0), \tag{2}$$

其中入射能量为 E_0，表面结合能为 E_{sbe}，原子穿过表面势垒的角度为 θ_1，原子的初始入射角为 θ_0。相比之下，在BB模型中，化合物内部释放的任何粒子都可以自由穿过表面，与其能量无关。

在二体碰撞近似计算中，会为每种物种设定一个截止能量（E_{cutoff}），用于确定反冲粒子何时被视为“静止”且不再引发碰撞。在SB模型中， E_{cutoff} 被选定为样品中所有物种最低非零E_s 以下0.1电子伏特。选择更低的 E_{cutoff} 会增加计算时间，因为入射粒子在被视为静止之前会在样品中穿行得更深。在本研究中，更长的入射粒子路径并不重要，因为低于 E_{cutoff} 的反冲粒子不会对溅射产额产生贡献。来自

样品内部的任何反冲粒子都需要超过SBE，才能以 E_{ejecta} 的能量离开化合物

$$E_{\mathrm{ejecta}} = E_{\mathrm{recoil}} - \mathrm{SBE}. \tag{3}$$

这解释了为什么 E_{cutoff} 不应设定为高于任何给定组分的 SBE。速度过低、无法克服 SBE 的相对重物种反冲粒子，仍能够使较轻物种发生反冲，使其动能超过自身的 SBE。

然而，对于 BB 模型，每次碰撞时都会减去 BBE，此后反冲粒子离开样品时，其能量不再改变。因此，该能量可以任意小，为保证收敛，必须通过截止能量加以限制。设定截止能量后， E_{ejecta} 不能低于截止能量 E_{cutoff}

$$E_{\mathrm{ejecta}} \geq E_{\mathrm{cutoff}}. \tag{4}$$

Hofsass & Stegmaier ¨提出的建议方法(2022年是：为了获得最接近实验数据的最佳结果，应将截止能量（E_{cutoff}）设置为体相结合模型中原子 E_s 的 1/2 到 1/8.5 之间（作者因此倾向于采用 1/3，这也是 SDTrimSP 中 BB模型的默认设置）。缺少 SBE 以及使用 BBE 和 E_{cutoff} 对溅射粒子的能量分布所产生的影响是显而易见的，因为溅射原子的低能尾部会在给定的 E_{cutoff}处被截断，并且看不到 Thompson 分布（Thompson1968）（图1）。以 SiO_2, 为例，我们得到

$$\begin{aligned} E_{\mathrm{cutoff}}(\mathrm{O}) &= \frac{E_s(\mathrm{O})}{3} = 0.861\,\mathrm{eV} \\ E_{\mathrm{cutoff}}(\mathrm{Si}) &= \frac{E_s(\mathrm{Si})}{3} = 1.555\,\mathrm{eV}. \end{aligned} \tag{5}$$

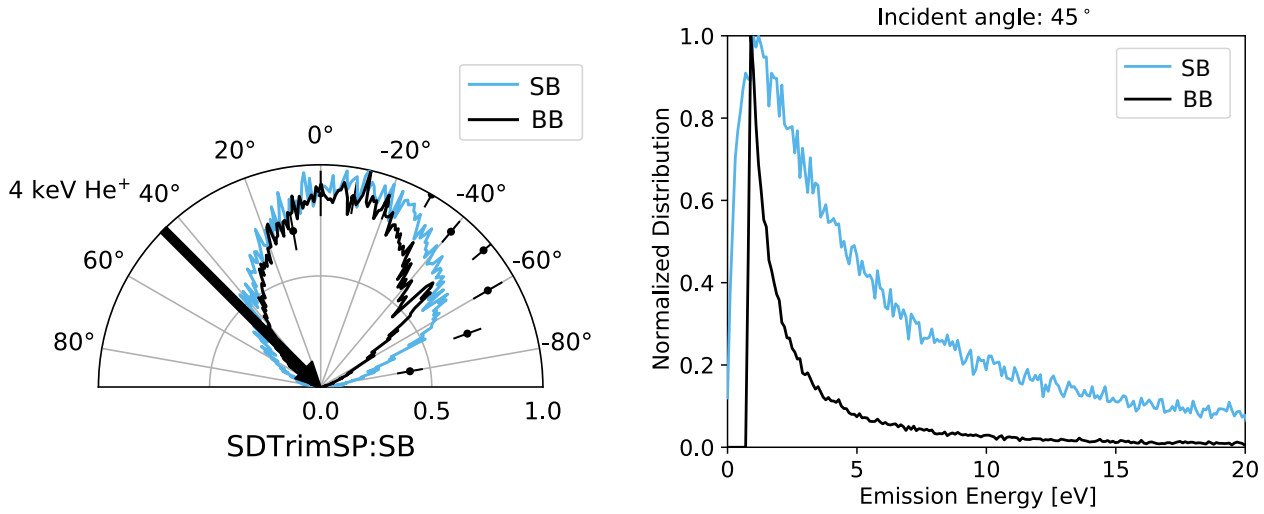

图 1. 辐照顽火辉石（$MgSiO_3$）在入射角为 $45°$ 、能量为 4 千电子伏特的氦离子轰击下，总溅射质量产额的角分布（左）和溅射氧的能量分布（右）的模型比较。体相结合模型（BB，黑线）基于纯体相结合能（BBE）假设。由于缺少表面结合能（SBE），粒子无法向表面方向散射，导致喷出物优先沿表面法线方向射出。BB 模型的能量分布不呈现 Thompson 分布的特征，而是从元素特定的截止能量 $\Delta H_s/3$开始单调递减。作为比较所示的表面结合模型（SB，浅蓝线）采用 SBE 而非 BBE 计算。实验数据来自薄膜辐照（Biber 等人（2022））， 并归一化至 $y_{\max} = 1$ ，误差为一个标准差。

2.3. *HB*：新的混合结合能模型

表面的平面势是一个问题，因为其强度需要超过原子升华焓，才能正确再现实验数据。然而，先前的能量分布测量（Betz & Wien1994；Samartsev& Wucher 2006；Martinezetal.2017）支持这种表面势的存在。此外，被 O_2 层覆盖的金属会表现出能量峰展宽以及向更高能量方向的轻微偏移（Dullni 1984；Wucher &Oechsner1986，1988）。因此，BB模型仅适用于二元金属化合物的溅射；对于这类化合物，观测到的能量分布呈单调下降趋势，能量峰接近于零（Szymo´nski 1981）。因此，对于含氧化物矿物，我们预计能量分布会按照可用氧的含量成比例地受到影响。SB模型和 BB模型都无法将这一点考虑在内，因此需要一种新模型。

我们引入了一种混合结合能模型（HB），该模型使用元素的升华焓作为 SBE，并使用化合物的生成焓作为 BBE。因此，这些能量既代表必须克服的表面势，也代表样品内部的化学键；在原子发生迁移之前，必须先断开这些化学键。该模型完全基于列表数据，就像 Hofs¨ass & Stegmaier (2022年) 的体相结合模型一样，但无需特定的 E_{cutoff} 即可最佳地再现溅射产额和能量分布。因此，与以往用于获得增大的结合能的方法相比，该模型是一种很有前景的替代方案。

例如，二元化合物 SiO_2 的 SBE 和 BBE 为

$$\begin{aligned} E_{surf}(\mathrm{Si}) &= E_s(\mathrm{Si}) = 4.664\,\mathrm{eV} \\ E_{bulk}(\mathrm{Si}) &= \frac{\Delta H_f(\mathrm{SiO_2})}{m+n} \\ &= \frac{9.441\,\mathrm{eV}}{3} = 3.147\,\mathrm{eV} \\ E_{surf}(\mathrm{O}) &= \frac{\Delta H_{diss}(\mathrm{O_2})}{2} = 2.582\,\mathrm{eV} \\ E_{bulk}(\mathrm{O}) &= \frac{\Delta H_f(\mathrm{SiO_2})}{m+n} \\ &= \frac{9.441\,\mathrm{eV}}{3} = 3.147\,\mathrm{eV}. \end{aligned} \tag{6}$$

仅根据二元化合物确定的体结合能，只有在假设每种元素在整个辐照过程中始终保持结合的情况下才成立。但实际情况自然并非如此，因此最终促成了更复杂的化合物模型的实现。

2.4. 新化合物模型

我们提出了一种用于样品组成的简单模型，具有两个用途。它可以区分化学结合的原子和“自由的”原子（未发生化学结合），并利用化合物（即氧化物和硫化物）的数据，合理近似矿物的实际质量密度。使用此化合物模型来区分结合原子与未结合原子以及密度的模拟名称，会标记为“-C”（HB-C，表示化合物模型与混合模型的组合；表 2）。

2.4.1. *Discriminate between bound and free atoms*

与使用单个原子不同，初始条件将每个原子视为与其各自的化合物结合——例如，硅和氧在 SiO 中结合$_2$。如果发生碰撞，且反冲能量足以克服体相结合能，则结合的原子会解除结合。分解化合物产生的原子种类不再具有化学结合能（体结合能 $= 0$，表2）。如果碰撞后的剩余能量足够大，靶原子就能够穿过样品移动。随后，该原子要么停下并尝试重新形成化学键，要么被溅射出去。为防止原子种类大量积累，只要条件允许，自由原子就会重新反应形成最初设定的化合物。在当前的 SDTrimSP实现中，在可用氧的条件下，优先重新形成生成焓最高的化合物。这会产生预期效果，即氧几乎不会以自由原子的形式存在。在 SDTrimSP 中，化合物混合模型被实现为表面结合模型四（isbv $= 4$）。在非化合物模型 BB 和 HB 中，由于原子模型无法区分结合组分和自由组分，样品中的每个组分都具有固定的体结合能（表 2）。因此，它们的行为与

其化合物对应模型（BB-C 和 HB-C）并不相同，尤其是在 HB 与 HB-C 的能量和角分布方面存在显著差异（第3节）。

2.4.2. *Set atomic density with compounds*

研究发现，矿物溅射产额的最佳拟合模型不仅要求提高结合能（正如Dullni 1984等研究中已有所提示），还需要一个能够反映真实材料性质的精确模型，其中包括原子密度（例如Szabo 等，2020a）。在 SDTrimSP 和 TRIM 中，确定密度的默认方法是使用原子种类的列表数据。在（Szabo 等，2020a）中，作者遵循 M¨oller & Posselt (2001) 的方法，并基于原子密度列表数据计算硅灰石（硫化钙SiO_3）的密度，结果为 0.0376 个原子 $^{\circ}A^{-3}$。将氧的密度提高 ρ_O 至 0.7 个原子 $^{\circ}A^{-3}$（初始值为 0.04 $^{\circ}A^{-3}$）后，得到的体密度更接近硅灰石的密度 0.07412 个原子 $^{\circ}A^{-3}$，对应于 2.86 g cm^{-3}。该值相对于 ρ_O 而言超过典型原子密度一个数量级以上。因此，在动力学建模中，移除氧会导致化合物表面密度发生不成比例的变化，相较于移除其他任何元素时更为显著。为避免这种情况，我们提出根据化合物的原子密度列表数据计算矿物密度，因为化合物是构成矿物的简化基本单元。

在 SDTrimSP 中，样品中每一层的密度根据其组分的密度计算，th

$$\rho = \left(\sum_{1}^{n} \frac{X_n}{\rho_n} \right)^{-1}, \tag{7}$$

其中 ρ 是样品的密度，X_n 是原子分数，ρ_n 是 n^{th} 组分的密度。

原子密度和原子分数决定了体密度，因此也决定了样品中两个原子之间的平均自由程。SDTrimSP 中的平均自由程 μ 表示为

$$\mu = \rho^{-1/3}. \tag{8}$$

在 SDTrimSP 等二体碰撞近似模拟中，离子在样品中运动时，会通过核相互作用和电子相互作用逐渐损失能量，这些相互作用会影响其运动（例如，Eckstein 1991）。入射离子行进距离 μ 后会发生碰撞（Eckstein1991；Mutzke 等，2019）。高密度样品的 μ 较小，而且由于电子阻止的影响减弱，两次碰撞之间保留的能量更多。

密度的另一个影响是原子之间的距离，因此它会影响碰撞过程中的可传递能量。该能量与入射粒子和静止粒子中心之间的距离成反比。发生碰撞的最远距离是最大碰撞参数，此时能量传递达到最小值

$$p_{\max} = \mu(2\pi)^{-1/2}. \tag{9}$$

随着 μ 减小，原子间距以及平均碰撞参数也会减小，因此最小可传递能量会增大。因此，较高的密度会通过反冲粒子减少低能溅射粒子的数量，并且由于能量损失更快而降低反冲粒子的数量。

相关造岩矿物的矿物密度和计算得出的平均自由程列于表1。例如，对于顽火辉石（$\rho_{\text{En}} \sim 3.20$ g cm^{-3}），默认的原子模型将得出

$$\begin{aligned}
\rho_{\text{En}} &= \left(\frac{X_{\text{Mg}}}{\rho_{\text{Mg}}} + \frac{X_{\text{Si}}}{\rho_{\text{Si}}} + \frac{X_{\text{O}}}{\rho_{\text{O}}} \right)^{-1} \\
\rho_{\text{En}} &= \left(\frac{0.2}{0.0431} + \frac{0.2}{0.0499} + \frac{0.6}{0.0429} \right)^{-1} \text{ at A}^{-3} \\
&= 0.0442 \text{ at A}^{-3} \\
&= 1.47 \text{ g cm}^{-3},
\end{aligned} \tag{10}$$

表1. 主要岩石组成　　矿物，用于表征由火山矿物组成的未知行星表面　　ls

类别	矿物	公式	ρ_{ref}		$\rho_{\text{compounds}}$		$\Delta\mu_{\text{compounds}}$	ρ_{atomic}		$\Delta\mu_{\text{atomic}}$
			(g/cm^3)	(at/ $^\circ$A^3)	(g/cm^3)	(at/ $^\circ$A^3)	(1)	(g/cm^3)	(at/ $^\circ$A^3)	(1)
斜长石	正长石	KAl硅$_3$氧$_8$	2.56	0.0723	2.67	0.0754	-1%	1.36	0.0384	23%
	钠长石	NaAlSi$_3$O $_8$	2.62	0.0786	2.70	0.0808	-1%	1.43	0.0429	22%
	钙长石	CaAl$_2$硅$_2$O $_8$	2.73	0.0768	2.99	0.0840	-3%	1.53	0.0429	21%
	霞石	NaAlSiO$_4$	2.59	0.0747	2.84	0.0820	-3%	1.44	0.0414	22%
辉石	硅灰石	CaSiO$_3$	2.93	0.0760	2.91	0.0755	0%	1.45	0.0375	26%
	透辉石	Ca镁硅$_2$氧$_6$	3.40	0.0946	2.97	0.0827	5%	1.46	0.0405	33%
	顽火辉石	镁$_2$硅$_2$氧$_6$	3.20	0.0960	3.05	0.0913	2%	1.47	0.0441	30%
	铁硅灰石	Fe$_2$Si$_2$氧 $_6$	3.95	0.0902	3.82	0.0872	1%	2.15	0.0491	22%
橄榄石	镁橄榄石	镁$_2$硅氧$_4$	3.27	0.0980	3.21	0.0960	1%	1.46	0.0438	31%
	铁橄榄石	Fe$_2$硅氧$_4$	4.39	0.0908	4.64	0.0900	0%	2.48	0.0512	21%
氧化物	钛铁矿	FeTiO $_3$	4.72	0.0937	4.83	0.0959	-1%	2.54	0.0504	23%
	石英	SiO_2	2.65	0.0797	2.65	0.0797	0%	1.51	0.0454	21%
硫化物	陨硫铁	FeS	4.61	0.0632	4.61	0.0632	0%	3.89	0.0533	6%
	尼宁格石	MgS	2.68	0.0573	2.68	0.0573	0%	1.91	0.0408	12%
	MnS	MnS	3.99	0.0552	3.99	0.0552	0%	3.80	0.0526	2%
	CrS	CrS	4.89	0.0701	4.89	0.0701	0%	3.70	0.0530	10%
	TiS	TiS	3.85	0.0580	3.85	0.0580	0%	3.07	0.0462	8%
	CaS	CaS	2.59	0.0432	2.59	0.0432	0%	1.74	0.0290	14%
配件	尖晶石	镁铝$_2$氧$_4$	3.64	0.1078	3.77	0.1115	-1%	1.58	0.0468	32%
	铬铁矿	铁铬$_2$氧 $_4$	4.79	0.0902	5.29	0.0996	-3%	2.88	0.0543	18%

NOTE—平均自由程长度的差异（$\mu = \rho^{-1/3}$）计算如下：$\Delta\mu = \mu/\mu_{\text{ref}} - 1$；密度缩写如下：$\rho_{\text{ref}}$ – 根据 Webmineral 上常见的典型矿物密度（另见，例如 Deer 等（1992））计算质量密度和原子密度；$\rho_{\text{compounds}}$ – 根据纯化合物性质中的氧化物和硫化物列表数据计算的密度；ρ_{atomic} – 根据 SDTrimSP 表中包含的、基于单原子固体的原子数据计算的密度。

而使用元素列表数据的化合物模型则会得出

$$\begin{aligned}\rho_{\text{En}} &= \left(\frac{X_{\text{MgO}}}{\rho_{\text{MgO}}} + \frac{X_{\text{SiO2}}}{\rho_{\text{SiO2}}}\right)^{-1} \\ \rho_{\text{En}} &= \left(\frac{0.5}{0.1070} + \frac{0.5}{0.0797}\right)^{-1} \text{ at A}^{-3} \\ &= 0.0913 \text{ at A}^{-3} \\ &= 3.05 \text{ g cm}^{-3}.\end{aligned} \tag{11}$$

此示例以及表 1 中的结果表明，使用化合物数据能够再现符合实际的矿物密度，从而较好地重现样品内的平均自由程。表 1 还显示，与默认的原子模型相比，无需任何手动调整即可近似得到密度。结合混合结合能模型，这是在蒙特卡罗二体碰撞近似代码（例如 SDTrimSP）中正确近似氧化物和氧化物衍生矿物的第一步。

表 2. 不同的能量和密度模型及其参数

	SDTrimSP 模型预设					手动设置的模型	
	SB	SB-C	BB	BB-C	HB-C	BB_0^*	HB*
SBE	ΔH_{sub}	ΔH_{sub}	0	0	ΔH_{sub}	0	ΔH_{sub}
$BBE_{\mathrm{f}}^{\dagger}$	0	0	ΔH_{sub}	0	0	ΔH_{sub} +CBE	CBE
$BBE_{\mathrm{b}}^{\dagger}$	-	0	-	ΔH_{sub} +CBE	CBE	-	-
ρ_{f}	原子的	原子的	原子的	原子的	原子的	原子的	原子的
ρ_{b}	-	化合物	-	化合物	化合物	-	-
E_{cutoff}	$< \Delta H_{\mathrm{sub}}$	$< \Delta H_{\mathrm{sub}}$	$\Delta H_{\mathrm{sub}}/3$	$\Delta H_{\mathrm{sub}}/3$	$< \Delta H_{\mathrm{sub}}$	$\Delta H_{\mathrm{sub}}/3$	$< \Delta H_{\mathrm{sub}}$
isbv	1	1	8	8	4	1	1

NOTE—缩写：SBE – 表面结合能；BBE – 体结合能；f – “自由的”、未结合原子；b – 化合物结合原子；CBE – 化学结合能： $\Delta H_f/(m+n)$，其中 m 和 n 分别为化合物中阳离子和阴离子的数量； E_{cutoff} – 截止能量； ΔH_{sub} – 升华焓； ΔH_f – 二元化合物的生成焓；isbv – SDTrimSP 输入文件中的模型编号。

*每个组分在密度方面均视为未结合，而在BBE（已分配CBE）方面视为已结合。BB_0 模型是原始的Hofs¨ass & Stegmaier(2022年）模型。HB模型仅用于展示密度独立于混合结合能模型时所产生的影响。

†对于氧， ΔH_{sub} 被忽略，仅在可能的情况下将CBE用作BBE。

2.5. 拟合模拟数据

按元素和质量建模的溅射产额采用基于Yamamura 等人(1983年)公式的Eckstein 和 Preuss 2003年拟合：

$$\begin{aligned} Y(\alpha) =& Y(0)\left\{\cos\left[\left(\frac{\alpha}{\alpha_0}\frac{\pi}{2}\right)^{c}\right]\right\}^{-f} \times \\ & \exp\left\{b\left(1-1\Big/\cos\left[\left(\frac{\alpha}{\alpha_0}\frac{\pi}{2}\right)^{c}\right]\right)\right\}, \end{aligned} \tag{12}$$

拟合参数为 b、 c 和 f，入射角为 α。 α_0 的值选为 $\pi/2$，而不是通过以下方式计算：

$$\alpha_0 = \pi - \arccos\sqrt{\frac{1}{1+E_0/E_{sp}}} \geq \frac{\pi}{2}, \tag{13}$$

因为这需要已知或假设入射粒子结合能 E_{sp}，而对于典型的太阳风能量 E_0（处于千电子伏特范围）以及 E_{sp}（处于电子伏特范围），这样做只会导致与 $\alpha_0 = \pi/2$之间出现微小偏差。

对于溅射粒子的角分布，采用根据（Hofs¨ass & Stegmaier 2022年）改进的余弦拟合函数拟合数据，以考虑溅射粒子的非对称特性。方程组如下：

$$f(\phi)\begin{cases} A\cos^{m}\left(\frac{\pi}{2}\left(\frac{\pi+2\phi}{\pi+2\phi_{\mathrm{tilt}}}-1\right)\right) & \phi \leq \phi_{\mathrm{tilt}} \\ A\cos^{n}\left(\frac{\pi}{2}\left(1-\frac{\pi-2\phi}{\pi-2\phi_{\mathrm{tilt}}}\right)\right) & \phi \geq \phi_{\mathrm{tilt}}, \end{cases} \tag{14}$$

缩放因子为 A、倾斜角为 ϕ_{tilt}、指数为 m 和 n，以及角度为 ϕ。

能量分布数据采用 Thompson 分布进行拟合（Thompson 1968），

$$f(E) = S\frac{E}{(E+E_0)^3}, \tag{15}$$

缩放因子为 S，溅射原子逃逸表面前移除的能量为 E_0 （考虑纯SB模型时约为表面结合能），溅射原子的能量为 E。能量峰位于$E \approx E_0/2$。

3. 结果

任何新提出的模型的有效性，最终都只能通过实验数据来验证；这些数据需关注溅射材料的物种组成分析，以及其角分布和能量分布。目前，我们只能将以每个入射离子的质量（amu/ion）表示的实验溅射产额数据及其角分布与模型输出进行比较。模型计算得到的产额组成符合化学计量比。较轻的物种最初会以超化学计量的方式溅射出来。随着注量增加、轻物种丰度降低，溅射产额的组成逐渐接近样品的初始化学计量比；显然，这并不等同于平衡时的样品表面组成。我们知道，实验室数据对应的注量已达到辐照平衡。就本研究而言，我们假设实验室测得的产额组成确实符合化学计量比。

3.1. *HB-C*模型与实验数据

我们首先介绍新实现的混合结合能模型（其中包含化合物模型，即 HB-C）的能力。因此，在质量产额方面，Szabo 等(2020a)方法与 HB-C模型的结果基本相同，并且都能较好地再现实验数据（图 2）。两者最大的差异在于角分布和能量分布。较高的表面结合能会增强表面发生的折射，从而使角分布更加分散。图 3 展示了这一现象：在本研究展示的所有模型结果中，表面结合能最高的 Szabo 等(2020a)方法产生了最大的倾斜角（27°入射角为 45°），其角分布也比所有其他模型都更宽（指数为 $m = 4.9$ 和 $n = 1.4$，针对硅灰石上的氦$^+$ ）。Szabo 等(2020a)方法所得到的均匀、与原子无关的能量分布，是对每种物种使用相同表面结合能的结果（图 3）。

3.2. 所有模型比较

在图 4 中，我们将 HB-C模型与其他模型进行了比较，并对照了硅灰石和顽火辉石的实验溅射产额数据。显然，我们发现实验数据位于 HB-C模型和 HB模型之间。后者因此不区分样品中的束缚物种和未结合物种。最重要的是，在法向入射和接近法向入射时（$< 45°$），使用 HB-C模型可以重现实验数据。

3.2.1. 角分布

我们在图 5中，将 Biber 等（2022年）的实验角分布与顽火辉石的模型数据进行了比较。与实验数据吻合程度最高的是 HB模型，该模型由于样品中每种物种都具有较高的结合能，因此表现出最强的前向溅射程度（最大的倾斜角）。与 HB模型相比，结合能较低或没有结合能的情况——这包括 HB-C模型中的未结合物种——显示出明显降低的前向溅射程度。未显示 TRIM的角分布数据，因为其分布甚至比 BB模型更窄（图 1 Hofs¨ass & Stegmaier 2022年）。

3.2.2. 能量分布

尽管没有关于受照射顽火辉石的实验数据，我们仍在图 6 中展示了溅射喷出物的模拟能量分布。SB模型和SB-C模型显示出几乎相同的能量分布，而HB模型和HB-C模型中的低能粒子数量较少，因此峰形更宽。HB模型中溅射粒子更明显的高能尾部，是由于无论施加的注量达到何种程度，相关物种都经历了较大的BBE。相比之下，化合物模型（HB-C）能够形成游离镁，随后这些游离镁无需克服体结合能即可连续发生溅射。这反过来增加了能量分布中低能镁的数量，使其更接近SB-C模型。在HB-C模型中，镁能量分布的峰值为0.9电子伏特，而SB模型中为0.6电子伏特、HB模型中为1.8电子伏特，这正体现了这一点。

4. 讨论 4.1.

溅射产额

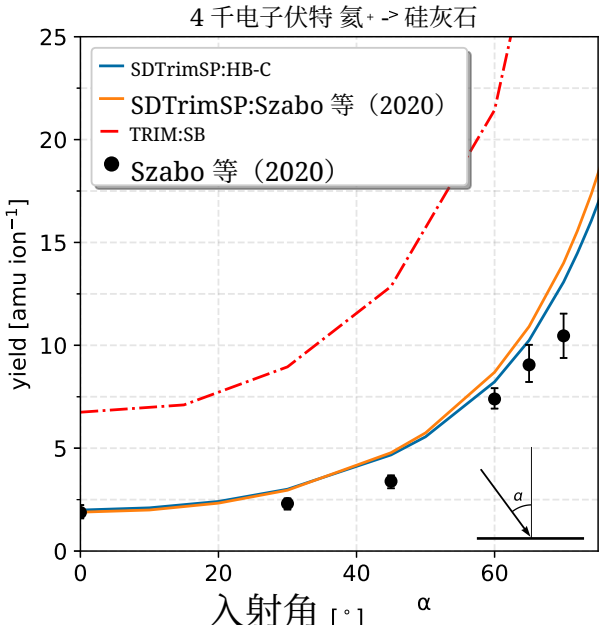

图2. 展示了用于拟合实验数据的初始方法（Szabo 等，2020a）与 HB-C 模型的一致性，其中包括 TRIM 模型结果 Biersack 和 Eckstein (1984)。缩写含义如下：HB——基于升华热的表面结合能（SBE），以及基于生成焓的体相结合能；C——根据化合物密度计算的密度，并区分未束缚物种和束缚物种。 Szabo 等 (2020a) 将所有组分的平均 SBE 提高到 O_{SBE} 6.5 电子伏特。为达到适当的硅灰石密度，他们相应地提高了 O 的原子密度。

我们证实，正确设定受照射样品的密度至关重要。图 4 清楚表明，在法向入射条件下，能够充分再现矿物密度的 HB-C模型对氢$^+$ 和氦$^+$ 辐照结果的拟合效果最佳。

H 辐照硅灰石薄膜的实验数据与 SDTrimSP 对平面表面溅射行为的预测存在显著偏差。迄今尚无法解释这一现象（Szabo等，2018年）。尽管如此，图4 中的所有实验数据在接近法向入射的条件下，与 HB-C 模型吻合良好，且至少可达 45°。这对于近似模拟真实粗糙表面的辐照很重要，因为在入射角低于 45° (K¨ustner 等，1998年；Biber 等人（2022）时，平面表面与粗糙表面之间的产额增强通常较小。这并非因为自然界中的撞击实际上以法向入射发生，而是因为表面粗糙度会使浅角入射离子的局部入射角减小，从而使质量产额分布趋于平缓。 Biber 等 (2022年) 在顽火辉石辐照实验中对此进行了讨论，且此前已有研究在粗糙的 Bo 和 Be 表面上展示了这一现象（ Gauthier 等，1990年；Roth 等，1991年；K¨ustner 等，1999年）。

4.2. 角分布

我们观察到，没有任何模型能够完全重现实验数据中出现的大极倾角（图 5）。最接近的是 HB 模型，该模型具有较高的 BBE，因此每次反冲都会迅速损失能量。较高的结合能会对长碰撞级联的碰撞运动学产生不利影响，并提高初级击出碰撞（即 Behrisch & Wittmaack 1991 中的图 2.6）在溅射材料角分布中的重要性。长碰撞级联产生的、更随机的喷出物会减少；这类喷出物原本会形成接近法线方向的分布。因此，角分布的倾斜程度增大。在二元合金中，无论是实验观察还是分子动力学模拟，都发现了这一现象。在这类合金中，从第二原子层溅射出的原子会形成朝向表面法线的角分布，而第一层发射原子的分布则较宽 Schwebel 等人 (1987)；Whitaker 等人 (1993)；Gnaser (1999)。除 HB 和 HB-C 模型外，所有模型在辐照平衡时都存在（如果有的话）体结合能较低的组分。样品内的能量损失

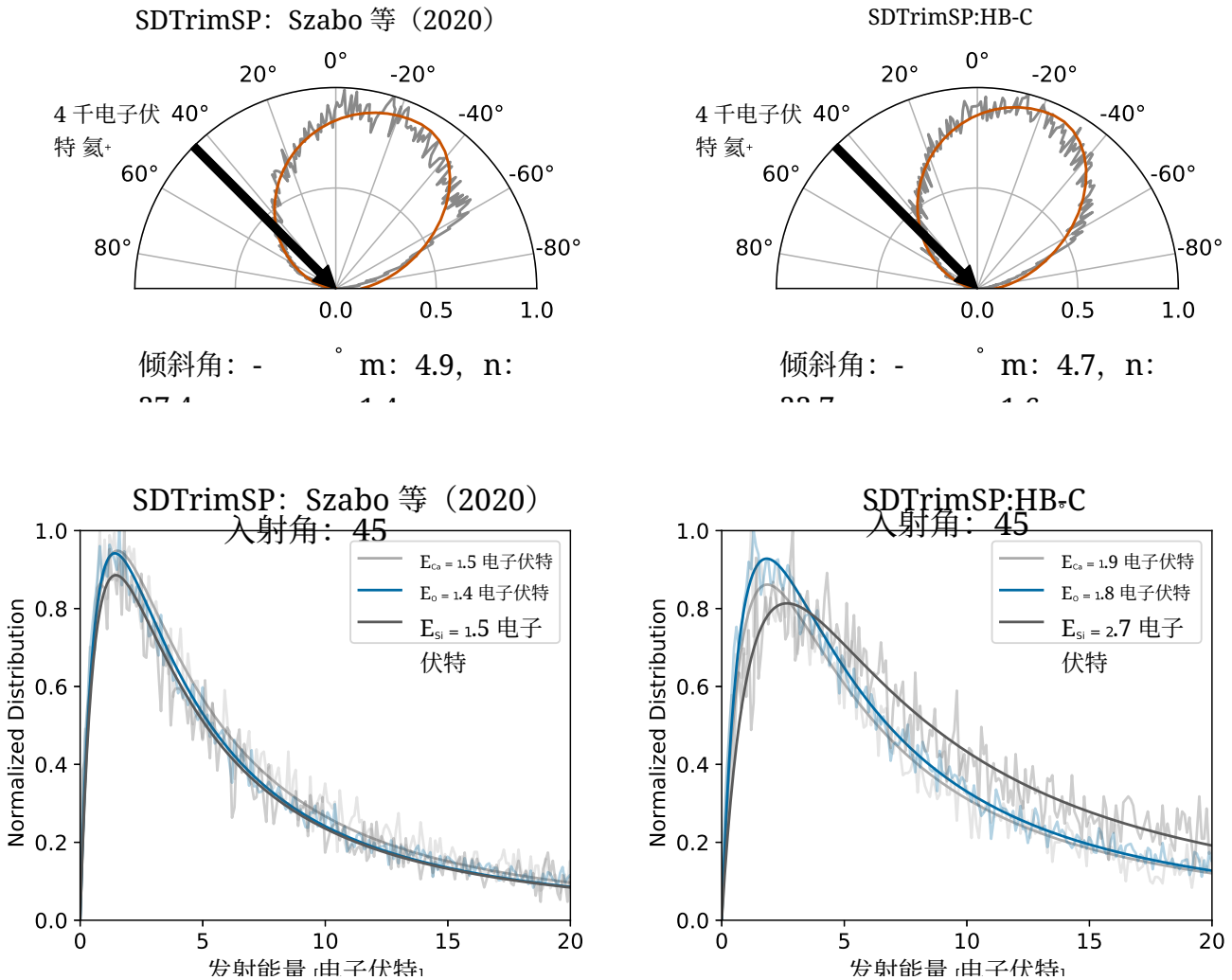

图3. 总溅射产额的角分布（灰色数据，橙色拟合）和溅射喷出物能量分布的建模结果。图例中的能量对应于Thompson拟合函数的峰值能量。由4千电子伏特氦辐照的硅灰石$^{+}$。 Szabo 等（2022年）将氧的表面结合能（SBE）提高至6.5电子伏特，对所有元素的表面结合能取平均，并提高氧的密度以达到硅灰石的初始密度。较大的表面结合能导致溅射粒子发生高度表面散射，而对结合能取平均则使所有物种具有相同的能量分布。HB-C模型同时使用表面结合能和体相结合能，在提高结合能的同时，根据氧化物化合物数据可靠地再现矿物密度，并区分化合物结合原子和未结合原子。

因此不太显著，这会减少第一层发射原子的贡献，并使喷出物形成更接近表面法线方向的近圆形羽流。

角分布的宽度由余弦拟合指数（m 和 n，图5）量化，也与表面结合能相关。在除Szabo 等（2022年）和Hofs¨ass 与 Stegmaier（2022年）提出的方法之外的所有建模方法中，所使用的表面结合能均相同，因此这些指数具有可比性。BB模型的角分布最窄（无表面势、无折射），其倾斜角也最低，并存在明显的前向溅射贡献，但该贡献不足以显著影响分布的倾斜程度。HB-C模型，尤其是HB模型，通过阻止随机分布的低能粒子离开表面，从而促成前向喷出物，导致更大的倾斜角；这一现象表现为在 $-60°$附近出现峰值。随着相对于表面法线的入射角增大（$> 45°$，未显示），单个击出反冲原子的数量会增加，与所选模型无关，从而增强

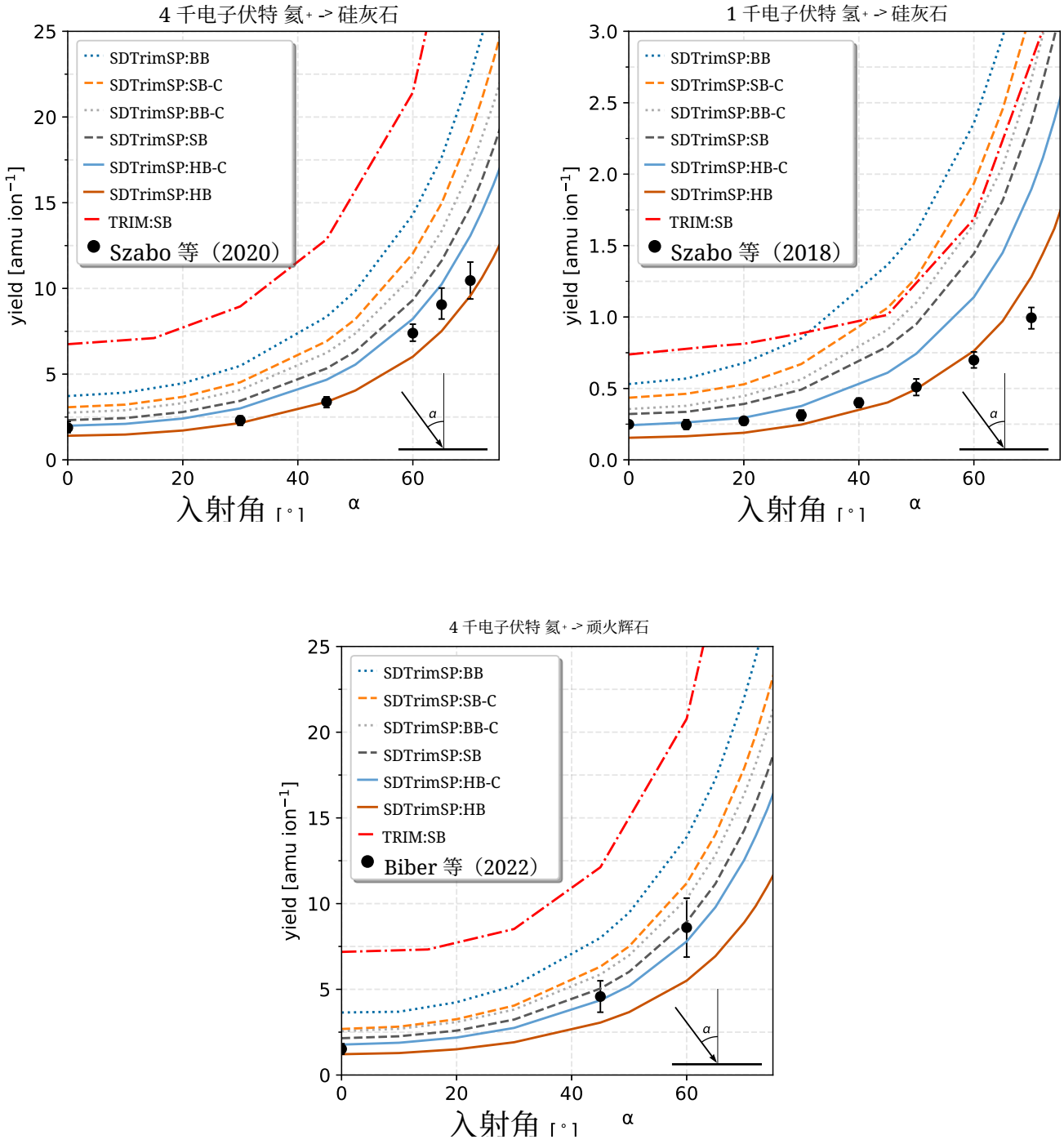

图4。 SDTrimSP模型结果与TRIM模型结果（红色点划线 Biersack 与 Eckstein（1984））以及以下实验数据的比较： Szabo 等（2018年）（H^+ 作用于硅灰石）、 Szabo 等 （2020a）（氦$^+$ 作用于硅灰石）以及 Biber 等 （2022年）（氦$^+$ 作用于顽火辉石）。在模型中考虑化合物（-C）时，可获得接近理想的矿物密度；而原子情况所表示的密度较低，约为化合物推导密度的一半。缩写和线型：SB——虚线，以表格列出的升华焓作为元素表面结合能；BB——点线，以表格列出的升华焓作为元素体相结合能；HB——实线，以表格列出的生成焓作为体相结合能，并以升华焓作为表面结合能；C——基于化合物密度计算密度，并区分化合物结合原子与未结合原子。

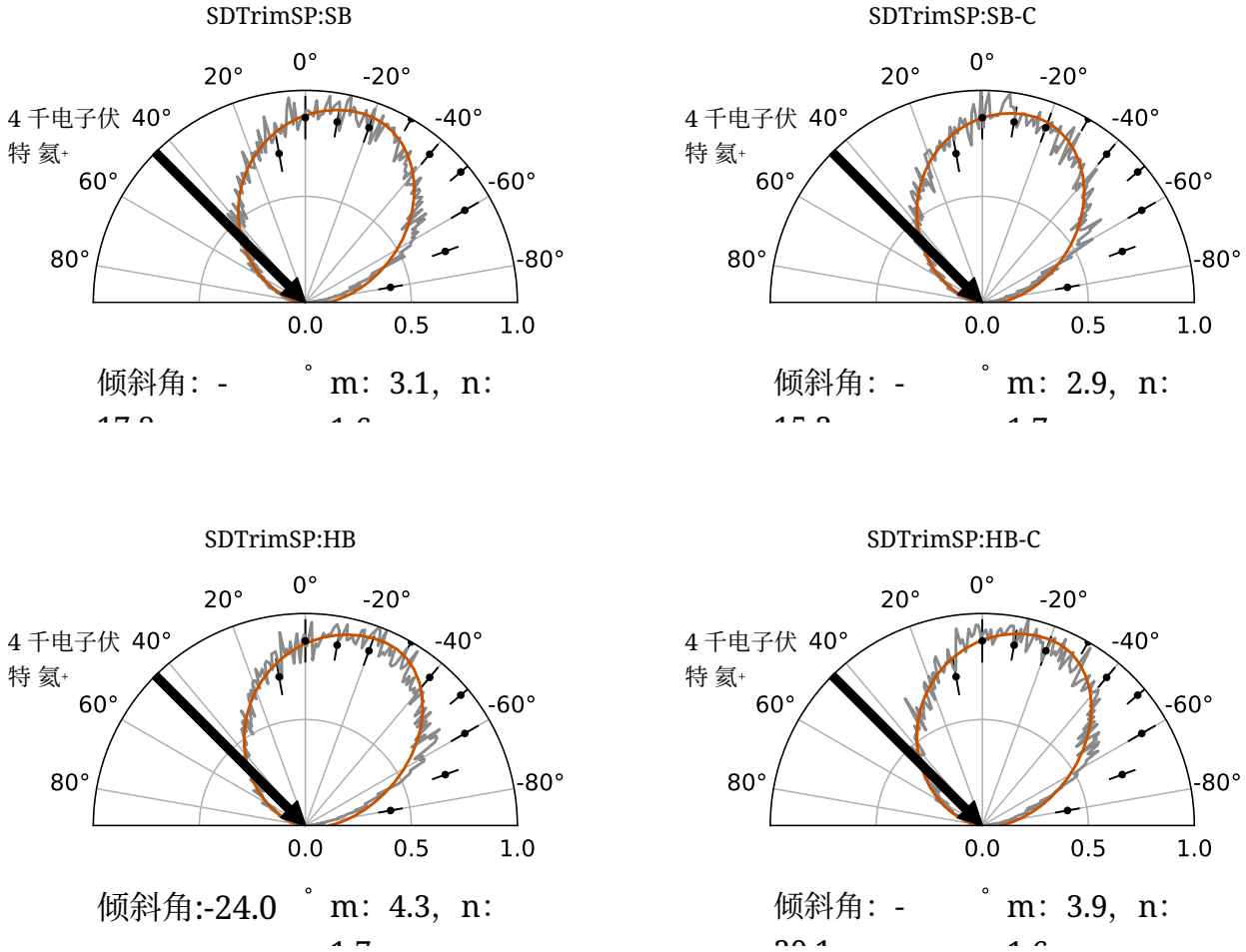

图 5. 4 千电子伏特氮辐照顽火辉石产生的总溅射产额的极向角分布$^+$ 在 45° 不同模型假设下的结果。化合物模型设定的较高密度使角分布略微变窄——这可以从余弦拟合中较小的 m 拟合指数（2.9 和 3.9）看出；原子模型对应的指数 m 分别为 3.1 和 4.3。如果元素在辐照过程中变为未结合状态（HB-C模型），与SB模型相比，体结合能（BBE）对倾斜角的影响较小（+2.3°）。如果元素保持结合状态，并具有恒定的体结合能和表面结合能（HB模型），则前向溅射更明显（SB模型倾斜角 +6.2°）。缩写：SB——将表列升华焓用作元素表面结合能；HB——将表列生成焓用作体相结合能，并将表列升华焓用作表面结合能；C——根据化合物密度计算密度，并区分化合物结合原子与未结合原子。薄膜辐照实验数据（Biber 等人（2022））归一化至 $y_{\max} = 1$，误差为一个标准差。

前向排列的喷出粒子的峰值大小。对于真实、粗糙和/或多孔样品而言，局部浅入射角不太可能对溅射产生贡献。这是因为在浅入射条件下观察到溅射产额显著降低，而这与遮蔽和再沉积过程有关（K¨ustner 等，1999；Cupak 等，2021；Biber 等人（2022）；Szabo 等，2022a）。因此，在浅入射角下出现的前向峰预计不会存在于风化层的溅射过程中。此外，对于非浅入射角，溅射粒子总量中的相应贡献可以忽略不计。

理论上，样品粗糙度可能是模型与实验数据之间存在差异的另一个原因。使用原子力显微镜分析了顽火辉石玻璃态薄膜的表面，结果认为其粗糙度可以忽略不计（Biber 等人（2022年））。此外，与较粗糙表面的角分布相比，

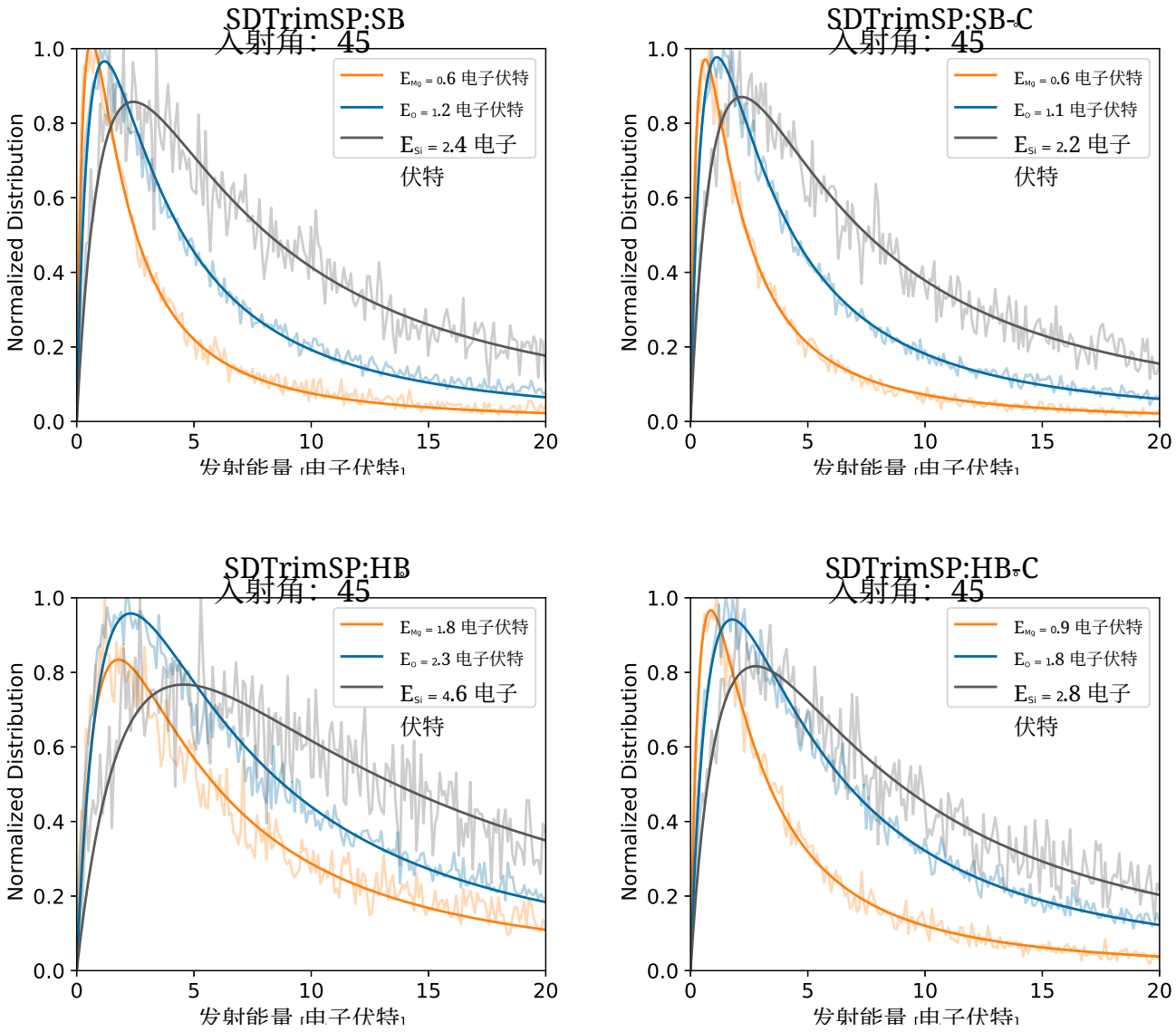

图 6。 以 4 千电子伏特氦$^+$ 以 45° 角度照射顽火辉石时，根据不同模型假设溅射元素的能量分布。图例中的能量对应于Thompson拟合函数的峰值能量。缩写：SBE – 以表面结合能表示的表格化升华焓；HB – 以体相结合能表示的表格化生成焓，以及以表面结合能表示的升华焓；C – 基于化合物密度计算的密度，并区分化合物结合原子与未结合原子。

薄膜角分布归一化后几乎完全相同（见Biber 等人（2022年）中的图 2 和图 3）。因此，粗糙度不太可能解释图5中所见的差异。

4.3. 能量分布

SB模型的粒子能量分布遵循汤普森分布，其峰值能量接近所采用表面结合能的 1/2。然而，HB模型达到的峰值能量约等于所采用的表面结合能（$E_s(Mg) = 1.5$、$E_s(O) = 2.6$和 $E_s(Si) = 4.7$），而HB-C模型显示出升高的能量，其更接近表面结合能/2。在表面结合能保持不变时，随着体结合能增加，能量分布的峰值会变宽（图6）。包含体结合能的模型会经历向更高能量方向的偏移，同时能量分布变宽，因为低能粒子不会被反射回样品中。这种行为遵循O_2覆盖金属

由Dullni （1984年）；Wucher& Oechsner （1986年）以及Wucher &Oechsner （1988年）开展的辐照实验。因此，通过汤普森分布拟合得到的能量分布峰值能量，并不对应于 ΔH_s 原子种类的升华焓，而是对应于存在的氧化物的生成焓 ΔH_f 与 ΔH_s （见Dullni 1984中的图3）。因此，在存在O_2的体系中，预期的能量分布展宽可由HB模型和HB-C模型在相同基本假设下重现，这使其成为SB模型和BB模型的有价值补充，而后两者无法实现这一点。该结果也令人想起提高表面结合能时观察到的展宽现象，如Morrissey 等（2022年）所述，结论也是相同的。更大的总结合能会提高溅射粒子中高能部分的比例，同时减少溅射粒子的数量。在太阳风暴露表面周围的外逸层中，数量较少但能量更高的粒子将能够在距离表面更远处被探测到。

4.3.1. *Inclusion of intermediary compounds*

从图6中可以明显看出，如果原子种类保持结合状态，就能获得更高的峰值能量。在本研究范围内，我们没有探讨可能的中间体的形成。当前实现始终会分解化合物，其中一种产物将继续穿过样品。如果有足够的自由元素可用，则只能形成原始氧化物，因此，以 SiO_2为例，该模型仅限于：

$$\mathrm{SiO_2} \rightleftharpoons \mathrm{Si + O + O} \tag{16}$$

更复杂的模型需要包含以下反应：

$$\mathrm{SiO_2} \rightleftharpoons \mathrm{Si + O_2} \tag{17}$$
$$\mathrm{SiO_2} \rightleftharpoons \mathrm{SiO + O} \tag{18}$$
$$\mathrm{SiO} \rightleftharpoons \mathrm{Si + O} \tag{19}$$
$$\mathrm{O_2} \rightleftharpoons \mathrm{O + O} \tag{20}$$
$$\mathrm{Si_2} \rightleftharpoons \mathrm{Si + Si} \tag{21}$$

这将减少样品中的未结合原子数量。因此，所得能量分布将更接近混合模型（HB），在该模型中，原子种类被认为仍以化合物形式保持结合。要完全模拟非晶化过程，我们需要了解在辐照平衡状态下，是什么因素驱动矿物中不同产物的稳定性。

4.4. 表面结合能增加的影响

为展示提高表面结合能（SBE）的影响，我们将标准 SB模型和新实现的 HB-C模型与 Morrissey 等人（2022年）的结果进行了比较。目前，随着配位数（作为钠邻近原子的氧原子数）的增加，仅有钠硅酸盐中钠的表面结合能数据可用。因此，我们仅比较了经 1 千电子伏特氢照射的钠长石 $NaAlSi_3O_8$ 的结果（表 3）。在 SDTrimSP 中对钠结合能提高至 E_s（钠） $= 7.9$ 电子伏特的钠长石进行静态计算时，Morrissey 报告了法向入射下 4.12×10^{-4} 钠/离子的产额。若 SDTrimSP 以动态模式运行，辐照平衡时的产额将增加一倍，达到 7.90×10^{-4} 钠/离子。与 SB模型（1.08×10^{-3} 钠/离子）和 HB-C模型（1.10×10^{-3}）的产额相比，采用 E_s（钠） $= 7.9$ 电子伏特时的动态钠产额相差 30%。SB模型和 HB-C模型的平衡产额相近，是因为 HB-C模型中的游离钠原子与 BB模型中的钠表现相同。由于 Na_2O 的生成焓最低，HB-C模型中的束缚钠不会优先与游离氧形成化学键，因此最终导致辐照平衡时表层中钠发生积累。因此，HB-C模型中赋予的密度和体结合能的增加并不适用于辐照平衡时的钠，因为此时不存在表面 Na_2O。Morrissey 方法的能量峰（E_s（钠） $= 7.9$ 电子伏特）正如预期约为 4 电子伏特（约为 SBE/2 $= 7.8/2$），其倾斜角超过 SB模型和 HB-C模型的结果两倍，且呈现出较宽的分布，这由较大的拟合指数（m和 n）所体现。总之，提高钠的表面结合能不仅体现在实际产额上（-30%），也体现在角度和能量分布上。

4.5. 评估所需的实验

表 3. 提高钠表面结合能对总产额和角分布的影响：模拟 1 千电子伏特氢$^+$ 辐照钠长石（$NaAlSi_3O_8$）

	E_s(钠)	Y_{Na}	$\phi_{tilt}(45°)$	m, n
	[eV]	$\left[\frac{10^{-3}\text{ 处的离}}{\text{子}}\right]$	[°]	[1]
M22[a]	7.9	0.41	-	-
SB	7.9	0.79	34.4	5.1, 1.5
SB	1.1	1.08	16.1	3.0, 2.0
HB-C	1.1	1.10	18.9	3.9, 2.3

NOTE—[a]在静态模式下计算； Y_{Na} – 钠溅射产额； E_s(钠) – 钠的表面结合能； $\phi_{tilt}(45°)$ – 离子入射角相对于表面法线的角分布倾斜角，为 45° ； m, n – 余弦拟合指数

参考文献—M22： Morrissey 等 （2022年）

溅射矿物的角分布和能量分布数据均取决于所选的表面结合能和体结合能。若能开展大量实验，准确区分不同的溅射物种并获取其能量分布，将有助于约束表面结合能和体结合能。获取能量分布还能深入了解矿物中出现的能量峰展宽效应。若能获得这些数据，便可进一步限定合理的结合能：表面结合能决定能量峰的位置和宽度，而体结合能则充当“展宽剂”，进一步增大能量峰宽度。作为副作用，提高和/或调整表面结合能与体结合能之间的差异，可能实现溅射材料所需的前向倾斜，同时不损害总质量产额方面的一致性。

如果仅依据表列热力学数据就能重现能量和角分布的实验数据，那当然令人欣喜，尽管这种可能性不大。尽管如此，正如Morrissey 等(2022年通过分子动力学对理想完整晶格的研究所展示的那样，我们预计表面结合能会高于表列数值。然而，仅用一个表面结合能来描述蚀变样品或许并不合适。要了解表面结合能随非晶化程度增加而发生的变化，就需要研究不同蚀变程度下的表面结合能。Morrissey 所展示的表面结合能与配位数之间的相关性，让人联想到表面结合能对非晶化程度的依赖；对于辐照样品的表面，也预计会有类似表现（Loeffler 等人（2009）；Biber 等人（2022））。不过，不应将表面结合能当作拟合参数进行调整，以求最佳重现实验数据。目前，我们建议使用HB-C模型重现实验质量变化，并将升华焓作为表面结合能，将成矿化合物的生成焓作为体结合能。

5. 结论

我们在二元碰撞近似（BCA）代码 SDTrimSP 中引入了一种混合结合能模型，其基础是化合物模型。该模型结合了矿物样品的表面结合能（SBE）、体结合能（BBE）和密度的列表数据，同时区分自由组分与化合物结合组分。相较于以往的建模方法，我们提出了一种替代方案，进一步减少了自由参数的数量，并能很好地再现实验数据。新的化合物混合模型（HB-C）融合了纯表面结合（SB）模型和体结合（BB）模型，同时再现矿物性质。这包括通过表列化合物数据获得恰当的矿物密度，也包括结合表面结合能和体结合能，从而增加碰撞级联中的能量损失，并导致能量峰展宽，这正如氧主导体系中所预期的那样（例如，Dullni 1984）。

尽管SB模型与HB-C模型之间的差异似乎很小，但该模型基础架构允许进一步纳入在矿物学和物理学方面合理的因素。此外，与实验

溅射产额的比较表明，$0°$（法向入射）与 $45°$之间达成了前所未有的一致性，这一范围对于需要将溅射产额作为输入的建模人员尤其重要。因此，HB-C模型在以下方面表现出色：1）在与外逸层建模人员相关的参数空间内，与现有实验数据具有良好的一致性；2）通过改用化合物的表列密度，纠正了基于原子密度计算默认样品密度时产生的低估；3）分别基于表列的化合物升华焓和生成焓，设定表面结合能和体结合能，从而能够普遍应用于矿物；4）无需设定SBE、BBE、密度和截止能量等参数（表面结合模型四，isbv $= 4$，位于SDTrimSP中），因此大幅提升了易用性。目前，HB-C模型在重现实验溅射数据方面表现出色，同时还能生成合理的喷出物能量分布和角分布。

资金由瑞士国家科学基金会基金（200021L 182771/1）以及[1]¨奥地利科学基金 FWF（项目编号 I 4101-N36）和 KKKO（奥地利科学院 OAW 下属的奥地利聚变研究协调委员会）提供。作者衷心感谢 NASA 的太阳系探索研究虚拟研究所（SSERVI）通过 LEADER团队提供的支持，资助编号[3]#80NSSC20M0060。[5]

[6]

软件： SDTrimSP（Mutzke 等，2019）、TRIM（SRIM软件包中）（Biersack 与 Eckstein（1984）；Ziegler 等 2010）

附录

A. 平均表面结合能

如果像Szabo 等（2020a）那样假设，必须克服的结合能仅取决于与氧相连的化学键数量，即所谓的配位数，那么任何组分的表面结合能都将是样品中氧含量的函数。模拟原子配位数这一效应的一种方法，是假设一个平均结合能，即对化合物中存在的所有物种进行质量守恒。在 SDTrimSP 中，该方法作为表面结合模型二（isbv = 2，Mutzke 等，2019）实现：

$$SBE = \sum q_i Es_i, \tag{A1}$$

其中 q_i 为浓度，Es_i 为组分 i 的表面结合能。这样便可为所有组分，进而为该化合物，得到一个单一的表面结合能。Szabo 等(2020a) 在此基础上加入密度修正，以最佳拟合硅灰石（硫化钙硅氧3）数据。为说明这一影响，我们假设 Es_O 增大至 6.5 电子伏特（Szabo 等，2020a），并将其与默认的 Es_O 2.58247 电子伏特进行比较。对于霞石（钠铝硅氧4），这将使所有物种的平均 Es达到 5.03 电子伏特，而使用

$$\begin{aligned} q_{Na} = q_{Al} = q_{Si} &= 1/7 \\ q_O &= 4/7 \\ Es_{Na} &= 1.11\,\mathrm{eV} \\ Es_{Al} &= 3.41\,\mathrm{eV} \\ Es_{Si} &= 4.66\,\mathrm{eV} \\ Es_O = 2.58\,\mathrm{eV} &\Rightarrow Es_{avg} = 2.79\,\mathrm{eV} \\ Es_O = 6.50\,\mathrm{eV} &\Rightarrow Es_{avg} = 5.03\,\mathrm{eV} \end{aligned} \tag{A2}$$

乍一看，这似乎可行：基于分子动力学（MD）模拟，原始晶质矿物中钠的建议表面结合能约为 4.8 电子伏特（Morrissey 等，2022年）。对于主要的造岩矿物钠长石（$NaAlSi_2$氧6；$Es_{Na} = 8.4$ 电子伏特 Morrissey 等，2022年），采用 isbv $= 2$ 近似，取 $Es_O = 6.5$ 电子伏特，得到的平均表面结合能为 5.4 电子伏特，无法再现 MD 所预测的钠的高结合能。这表明，在模拟复杂矿物结构的键强度时，根据单一组分调整表面结合能存在局限性。

参考文献

Arredondo, R., Oberkofler, M., Schwarz-Selinger, T., 等, 2019年, 《核材料与能源》, 18, 72, doi: 10.1016/J.NME.2018.12.007Baker, D. N., Poh, G., Odstrcil, D., 等, 2013年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 118, 45, doi: 10.1029/2012JA018064Baretzky, B.,M¨oller, W., & Taglauer, E. 1992, 真空, 43, 1207, doi: 10.1016/0042-207X(92)90025-RBehrisch, R., & Eckstein, W. 2007, 粒子轰击溅射：从阈值到 MeV能量的实验与计算机计算（施普林格）, 507 Behrisch, R., & Wittmaack, K. 1991, 粒子轰击溅射III：溅射粒子特性, 技术应用（柏林, 海德堡：施普林格）Benkhoff, J., van Casteren, J., Hayakawa, H., 等, 2010年, 《行星与空间科学》, 58, 2, doi: 10.1016/J.PSS.2009.09.020Benninghoven, A., Rudenauer, F. G., & Werner, H. W. 1987, 二次离子质谱法：基本概念、仪器方面、应用与趋势（John Wiley and Sons, 纽约, NY）Betz, G. 1987, 核仪器与物理研究方法B辑：束流与材料和原子的相互作用, 27, 104, doi: 10.1016/0168-583X(87)90011-5Betz, G., & Wien, K. 1994, 国际质谱与离子过程杂志, 140, 1, doi: 10.1016/0168-1176(94)04052-4Biber, H., Br¨otzner, J.,J¨aggi, N., 等, 2022年, 《行星科学杂志》, 3, 271, doi: 10.3847/PSJ/ACA402Biersack, J., & Haggmark, L. 1980, 核仪器与方法, 174, 257, doi: 10.1016/0029-554X(80)90440-1Biersack, J. P., & Eckstein, W. 1984, 应用物理A 1984 34:2, 34, 73, doi: 10.1007/BF00614759Cassidy, T. A., Merkel, A. W., Burger, M. H., 等, 2015年, 《伊卡洛斯》, 248, 547, doi: 10.1016/j.icarus.2014.10.037Cupak, C., Szabo, P. S., Biber, H., 等, 2021年, 《应用表面科学》, 570, 151204, doi: 10.1016/J.APSUSC.2021.151204Deer, W. A., Howie, R. A., & Zussman, J. 1992, 造岩矿物导论, 第2版（英格兰埃塞克斯郡哈洛；纽约, NY：Longman Scientific & Technical）, 696 Domingue, D. L., Chapman, C. R., Killen, R. M., 等, 2014年, 《空间科学评论》, 181, 121, doi: 10.1007/S11214-014-0039-5/FIGURES/20Dukes, C., & Baragiola, R. 2015, 《伊卡洛斯》, 255, 51, doi: 10.1016/J.ICARUS.2014.11.032

Dukes, C. A.,Chang, W.Y., Fam´a, M., & Baragiola, R. A. 2011, 《伊卡洛斯》, 212, 463, doi: 10.1016/j.icarus.2011.01.027Dullni, E. 1984, 核仪器与物理研究方法B辑：束流与材料和原子的相互作用, 2, 610, doi: 10.1016/0168-583X(84)90276-3Eckstein, W. 1991, 离子-固体相互作用的计算机模拟, 第10卷（施普林格）Eckstein, W., & Preuss, R. 2003, 《核材料杂志》, 320, 209, doi: 10.1016/S0022-3115(03)00192-2Elphic, R. C., Delory, G. T., Hine, B. P., 等 2014, 月球大气与尘埃环境探测器任务, 克鲁沃学术出版社, doi: 10.1007/s11214-014-0113-zFatemi, S., Poppe, A., & Barabash, S. 2020, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 125, e2019JA027706 Gades, H., & Urbassek, H. M. 1992, 核仪器与物理研究方法B辑：束流与材料和原子的相互作用, 69, 232, doi: 10.1016/0168-583X(92)96012-NGamborino, D., & Wurz, P. 2018, 《行星与空间科学》, 159, 97, doi: 10.1016/J.PSS.2018.04.021Gauthier,E., Eckstein, W., L´aszl´o, J., & Roth, J. 1990, 《核材料杂志》, 176-177, 438, doi: 10.1016/0022-3115(90)90086-3Gershman, D. J., Zurbuchen,T. H.,Fisk, L.A., 等 2012, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 117, 不适用, doi: 10.1029/2012JA017829Glass, A. N., Raines, J. M., Jia, X., 等 2022年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 127, e2022JA030969, doi: 10.1029/2022JA030969Gnaser, H. 1999, 固体表面的低能离子辐照, 第146卷（柏林：施普林格）, 41–42 Grava, C., Killen, R. M., Benna, M., 等 2021, 《空间科学评论》2021年 217:5, 217, 1, doi: 10.1007/S11214-021-00833-8Hijazi, H., Bannister, M. E., Meyer, H. M., Rouleau, C. M., & Meyer, F. W. 2017, 《地球物理研究杂志：行星》, 122, 1597, doi: 10.1002/2017JE005300Hobler, G. 2013, 核仪器与物理研究方法B辑：束流与材料和原子的相互作用, 303, 165, doi: 10.1016/J.NIMB.2012.11.022Hofs¨ass, H., & Stegmaier, A. 2022年, 核仪器与物理研究方法B辑：束流与材料和原子的相互作用, 517, 49, doi: 10.1016/J.NIMB.2022.02.012

Jackson, D. P. 1975,https://doi.org/10.1139/p75-194, 53,1513,doi: 10.1139/P75-194Janches, D., Berezhnoy, A. A., Christou, A. A., 等 2021, 《空间科学评论》, 217, 1 Kazakov, A., Milillo, A., Lazzarotto, F., 等 2022年, 载于 2022年欧洲行星科学大会（西班牙格拉纳达：Europla）, doi: 10.5194/EPSC2022-810Ken Knight, C. E., & Wehner, G. K. 1967, 月球表面溅射效应研究, 技术报告, 美国国家航空航天局总部月球与行星项目办公室, 华盛顿特区。Killen, R. M., Morrissey, L. S., Burger, M. H., 等 2022年, 《行星科学杂志》, 3, 139, doi: 10.3847/PSJ/AC67DEK¨ ustner, M., Eckstein, W., Dose, V., & Roth, J. 1998, 核仪器与物理研究方法B辑：束流与材料和原子的相互作用, 145, 320, doi: 10.1016/S0168-583X(98)00399-1K¨ustner, M., Eckstein, W., Hechtl, E., & Roth, J. 1999, 《核材料杂志》, 265, 22, doi: 10.1016/S0022-3115(98)00648-5Lindhard, J., & Scharff, M. 1961, 《物理评论》, 124, 128, doi: 10.1103/PhysRev.124.128Loeffler, M. J., Dukes, C. A., & Baragiola, R. A. 2009, 《地球物理研究杂志》, 114, E03003, doi: 10.1029/2008JE003249Lue, C., Futaana, Y.,Barabash, S., 等 2011, 《地球物理研究快报》, 38, 3202, doi: 10.1029/2010GL046215Madey, T. E., Johnson, R. E., & Orlando, T. M. 2002, 《表面科学》, 500, 838, doi: 10.1016/S0039-6028(01)01556-4Mangano, V., Milillo, A., Mura, A., 等 2007, 《行星与空间科学》, 55, 1541, doi: 10.1016/J.PSS.2006.10.008Martinez, R., Langlinay, T., Ponciano, C. R., 等 2017, 核仪器与物理研究方法B辑：束流与材料和原子的相互作用, 406, 523, doi: 10.1016/J.NIMB.2017.01.042McNutt Jr, R. L., Benkhoff, J., Fujimoto, M., & Anderson, B. J. 2018, 载于《水星：MESSENGER之后的观察》, 编者 S. C. Solomon, L. R. Nittler, & B. J. Anderson（英国剑桥：剑桥大学出版社）, 544–569, doi: 10.1017/9781316650684Milillo, A., Fujimoto, M., Murakami, G., 等 2020, 《空间科学评论》, 216, 1, doi: 10.1007/s11214-020-00712-8M¨oller, W., & Eckstein, W. 1984, 核仪器与物理研究方法B辑：束流与材料和原子的相互作用, 2, 814, doi: 10.1016/0168-583X(84)90321-5

M¨oller, W., & Posselt, M. 2001, TRIDYN FZR用户手册, FZR报告第317号, 技术报告, 罗斯多夫研究中心, 德累斯顿, 德国 Morrissey, L. S., Tucker, O. J., Killen, R. M., Nakhla, S., & Savin, D. W.2022, 《天体物理学杂志》快报, 925, L6, doi: 10.3847/2041-8213/AC42D8Mura, A., Wurz, P., Lichtenegger,H. I. M., 等 2009, 《伊卡洛斯》, 200, 1, doi: 10.1016/J.ICARUS.2008.11.014Mutzke, A., Schneider,R., Eckstein, W., 等 2019, SDTrimSP 6.00版, 马克斯·普朗克等离子体物理研究所¨urPlasmaphysikN´enon, Q., & Poppe, A. R.2020, 《行星科学杂志》, 1, 69 Orsini, S., Livi, S., Lichtenegger, H., 等 2020, 《空间科学评论》, 217, 49 Paige, D. A., Foote, M.C., Greenhagen, B. T., 等 2010, 《空间科学评论》, 150, 125 Pfleger, M., Lichtenegger,H., Wurz, P., 等 2015, 《行星与空间科学》, 115, 90, doi: 10.1016/J.PSS.2015.04.016Poppe, A., Farrell, W., & Halekas, J. S. 2018, 《地球物理研究杂志：行星》, 123, 37 Raines, J. M., Dewey, R. M., Staudacher, N. M., 等 2022, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, e2022JA030397, doi: 10.1029/2022JA030397Roth, J., Bohdansky, J., & Eckstein,W. 1983, 《核仪器与物理研究方法》, 218,751, doi: 10.1016/0167-5087(83)91077-3Roth, J., Bohdansky, J., & Ottenberger, W. 1979, 低能轻离子溅射数据, 马克斯·普朗克等离子体物理研究所¨ur Plasmaphysik Roth, J., Eckstein, W., Gauthier, E., & Laszlo, J. 1991, 《核材料杂志》, 179-181, 34, doi: 10.1016/0022-3115(91)90010-5Samartsev, A. V., & Wucher, A. 2006, 《应用表面科学》, 252, 6470,doi: 10.1016/J.APSUSC.2006.02.081Schaible, M.J., Dukes, C. A.,Hutcherson, A. C.,等 2017, 《地球物理研究杂志：行星》, 122, 1968, doi: 10.1002/2017JE005359Schaible, M.J., Sarantos, M., Anzures, B. A., Parman, S. W., & Orlando,T. M.2020, 《地球物理研究杂志：行星》, 125, e2020JE006479, doi: 10.1029/2020JE006479Schwebel, C., Pellet, C., & Gautherin, G. 1987,《核仪器与物理研究方法》B辑：束流与材料和原子的相互作用, 18,525, doi: 10.1016/S0168-583X(86)80081-7Sigmund, P. 1969, 《物理评论》, 184,383, doi: 10.1103/PhysRev.184.383

Solomon, S. C., McNutt, R. L., Gold, R. E., 等 2001, 《行星与空间科学》, 49, 1445, doi: 10.1016/S0032-0633(01)00085-XSuzuki, Y., Yoshioka, K., Murakami, G., & Yoshikawa, I. 2020, 《地球物理研究杂志: 行星》, 125, e2020JE006472, doi: 10.1029/2020JE006472Szabo, P. S., Cupak, C., Biber, H., 等 2022a, 表面与界面, 30, 101924, doi: 10.1016/J.SURFIN.2022.101924Szabo, P. S., Chiba, R., Biber, H., 等 2018, 《伊卡洛斯》,314, 98, doi: 10.1016/J.ICARUS.2018.05.028Szabo, P. S., Biber, H.,J¨ aggi, N., 等 2020a, 《天体物理学杂志》, 891, 100, doi: 10.3847/1538-4357/ab7008—. 2020b, 《地球物理研究杂志: 行星》, 125, e2020JE006583, doi: 10.1029/2020JE006583Szabo, P. S., Poppe, A. R., Biber, H., 等 2022b, 《地球物理研究快报》, 49, e2022GL101232, doi: 10.1029/2022GL101232Szymo´ nski, M. 1981, 《物理学快报A》, 82, 203, doi: 10.1016/0375-9601(81)90121-3Thompson, M. W. 1968年, 《哲学杂志》, 18, 377, doi: 10.1080/14786436808227358Van der Heide, P. 2014, 二次离子质谱法：原理与实践导论（约翰·威立父子出版公司）Vorburger, A., Wurz, P., Barabash, S., 等 2013, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 118, 3937, doi: 10.1002/JGRA.50337Whitaker, T. J., Jones, P. L., Li, A., & Watts, R. O. 1993, 《科学仪器评论》, 64, 452, doi: 10.1063/1.1144215

Winslow, R. M., Anderson, B. J., Johnson, C. L. 等。2013, 《地球物理研究杂志：空间物理学》，118，2213，doi：10.1002/jgra.50237Wucher, A. 和 Oechsner, H. 1986, 《核仪器与物理研究方法B辑：束流与材料和原子的相互作用》，18，458，doi：10.1016/S0168-583X(86)80071-4—。1988, 《表面科学》，199，567，doi：10.1016/0039-6028(88)90921-1Wurz, P. 2005，载于《动态太阳：理论与观测面临的挑战》，第600卷 Wurz, P.、Rohner, U.、Whitby, J. A. 等。2007，《伊卡洛斯》，191，486，doi：10.1016/J.ICARUS.2007.04.034Wurz, P.、Whitby, J. A.、Rohner, U. 等。2010，《行星与空间科学》，58，1599，doi：10.1016/J.PSS.2010.08.003Wurz, P.、Fatemi, S.、Galli, A. 等。2022年，《空间科学评论》2022年 218:3，218，1，doi：10.1007/S11214-022-00875-6Yamamura, Y.、Itikawa, Y. 和 Itoh, N. 1983年，《单原子固体溅射产额的角度依赖性》，技术报告，等离子体物理研究所、名古屋大学，名古屋 Ziegler, J. F. 和 Biersack,J. P. 1985，《重离子科学论著》，93，doi：10.1007/978-1-4615-8103-1 3Ziegler, J. F.、Ziegler, M. D. 和 Biersack, J. P. 2010，《核仪器与物理研究方法：B辑：束流与材料和原子的相互作用》，268，1818，doi：10.1016/j.nimb.2010.02.091