arXiv:2602.16567v1 [physics.space-ph] 18 Feb 2026

月球表面的散射与溅射

来自表面观测到的负离子的启示

Romain Canu-Blot[1,2], Martin Wieser[1], Umberto Rollero[1,2], Thomas Maynadié[1,2], Stas Barabash[1], Gabriella Stenberg Wieser[1], Aibing Zhang[3,4], Wenjing Wang[3], 和 Chi Wang[3,4]

[1] 瑞典空间物理研究所（IRF），Bengt Hultqvists väg 1，基律纳，98192，瑞典 电子邮箱：romain.canu-blot@irf.se[2] 于默奥大学物理系，于默奥，瑞典[3] 国家空间科学中心（NSSC），中国科学院（中国科学院），南二条1号，中关村，海淀区，北京，100190，中国[4] 中国科学院大学，雁栖湖东路1号，怀柔区，北京，101408，中国

收稿日期：2026年2月18日

摘要

背景。无大气行星体直接暴露于太阳风离子之下，这些离子在撞击被风化层覆盖的表面时可能发生散射或被注入，同时也会溅射表面原子。

目的。我们构建了一个半解析模型，用于描述数百电子伏特离子的散射以及表面原子的溅射，二者均会导致月球表面发射负离子。该模型包含一种基于物理原理并受观测约束的散射过程新描述。

方法。我们利用嫦娥六号着陆器上月球表面负离子探测仪（NILS）的数据，通过贝叶斯推断更新关于月壤离子散射与溅射的先验知识。

结果。我们的模型与NILS数据吻合良好。沉降的太阳风质子以任意电荷态从月球表面散射的概率约为22%，溅射出一个表面氢原子的概率约为8%。在质子速度为300 km/s时，由此得到的散射氢通量与溅射氢通量之比为 $\eta^{sc}/\eta^{sp} = 1.5^{+1.5}_{-1.1}$。我们发现，氢原子以负电荷态离开表面的概率很高（7–20%）。在近掠射角处，散射通量与溅射通量的角分布发射均由表面粗糙度控制。我们的模型还表明，氢与风化层相互作用时存在显著的非弹性能量损失，这意味着有效路径长度比先前假设的更长。最后，我们估计表面结合能为5.5电子伏特，与观测一致。

结论。 我们的模型描述了任意电荷态的粒子在任意均匀多组分表面上的散射和溅射。利用 NILS 数据，我们成功应用该模型，更新了对太阳风与月壤相互作用以及负氢离子发射的认识。

关键词。 太阳风离子-月壤相互作用 – 月球 – 负离子 – 贝叶斯统计 – 粒子输运 – 电离效率

1。引言

P没有大气层的行星体直接暴露于
to 太空环境中。持续的空间风化
（Pieters 和 Noble，2016年）会改变其表面，并产生一种
p多孔、未固结且由碎屑构成的层，称为
r风化层（Papike 等，1982；Clark 等，2002）。风化层充当
a无大气天体与周围环境之间的主要界面，
in 并控制太阳风和其他高能粒子与其表面的相互作用。理解这些相互作用对于研究表面演化、元素组成以及表面束缚外逸层的形成至关重要。

粒子与固体表面相互作用时，可能被表面原子直接反射，也可能穿透进入固体内部。在固体内部，粒子会与原子发生散射、损失能量，最终离开材料。或者，它也可能停下来并被吸收。入射粒子的反射称为“（背）散射”。粒子穿过材料时，会将能量传递给固体中的原子。其中一些获得能量的原子可能会从表面喷射出来——这一过程称为“溅射”。

与表面相互作用的粒子的电荷态并非守恒。沉降离子在接近表面时会被中和，其原始电荷态实际上会丢失（例如，Jans 等，2001）。在表面附近，粒子保持在一种（准）中性电荷态平衡状态，这种平衡在远短于粒子与材料总相互作用时间的时间尺度内建立（Lienemann 等，2011）。粒子离开表面时，其电荷态会通过电荷交换过程进一步改变，最终在距固体数纳米处达到最终电荷态。发射粒子达到特定电荷态的概率取决于粒子的能量和物种，也取决于表面性质，例如平均组成、吸附物、原子结构（晶态或非晶态）、结构缺陷或组成杂质（例如，Kawano 和 Page，1983；Maazouz 等，1998；Wucher，2008；Wucher 等，2013；Cartry 等，2017）。

散射、溅射和电荷交换过程已针对多种粒子—

表面组合进行了广泛研究。然而，由于覆盖无大气天体的风化层具有独特性，对天然或原始风化层的研究——相较于返回样品、模拟物或模拟——仅限于原位观测或航天器观测。

在无大气天体中，月球是天然风化层直接暴露于太阳风的最易观测实例，我们对这一现象的实证认识大多源自轨道测量。月球表面完全覆盖着风化层，其主要由硅酸盐矿物和玻璃质团聚体构成，后者由撞击熔融形成（Heiken 1975）。大多数撞击月壤的太阳风质子都会被吸收，为表面提供氢和含羟基分子（Tucker 等，2019）。约有 10–20% 的入射质子会以中性氢的形式逸出，其能量大于 10电子伏特（McComas et al. 2009; Wieser et al. 2009; Schaufelberger et al. 2011; Rodríguez M. et al. 2012; Allegrini et al. 2013; Saul et al. 2013; Vorburger et al. 2014b; Zhang et al. 2020）。这些中性粒子由入射质子的散射或表面氢的溅射产生，两种情况下逸出粒子随后都会发生中和。除中性粒子外，约有 0.1–1% 的太阳风质子以质子形式从月球表面反向散射（Saito et al. 2008; Lue et al. 2014, 2018a），另有约 2.5% 以负氢离子形式散射（Wieser 等，2025）。除氢之外，观测到多种可能由溅射产生的较重正离子（Tanaka et al. 2009; Yokota et al. 2009），以及其他高能中性原子，包括反向散射的氦和溅射出的氧（Vorburger et al. 2014a）。

利用轨道航天器的数据，研究人员重建了高能中性氢（Schaufelberger 等，2011；Lue等人，2016）和质子（Lue等人，2018b）的角发射函数及其相应的发射粒子能谱。尽管这使得磁异常成像成为可能（Wieser 等人（2010）；Vorburger等人，2012），但航天器与表面之间较大的观测距离使得对实际表面相互作用的研究变得复杂。事实上，轨道观测对月球大面积表面区域进行平均，从而模糊了磁异常导致的沉降太阳风通量的小尺度局部变化（Halekas et al. 2008）。这反过来又掩盖了发射粒子的角分布和能量分布的详细结构。

太空观测由实验室实验和计算机模拟加以补充。由于难以获得原始月壤，实验室研究基于返回样品和风化层模拟物（例如，Meyer 等，2011）。与此同时，解析模型和数值模拟使人们能够在受控条件下研究粒子输运和发射过程（例如，von Toussaint 等，2017；Szabo 等，2022；Tucker 等，2019；Szabo 等人（2023b））。

在月球表面进行直接测量，可以避免实验室研究中的材料限制、数值模拟中难以准确建模风化层的问题，以及轨道航天器观测固有的大范围空间平均效应。然而，迄今为止部署的仪器寥寥无几。先进小型中性粒子分析仪（ASAN）（Wieser 等，2020）测量了从月球表面发射的中性粒子，并建立了半解析模型，用于描述散射和溅射中性氢原子的能量分布（Wieser 等，2024）。2024年6月，搭载于中国嫦娥六号任务（Zeng 等，2023）的月球表面负离子探测仪（NILS）（Canu-Blot 等，2025）提供了月球表面发射的负离子和电子数据。

本研究利用NILS数据，建立了一个关于月球风化层中氢散射和氢溅射的解析模型，其中包括负离子发射概率。该模型将能量分布与角分布分开处理，并由月球表面的直接测量结果加以约束。

2. 仪器

月球表面负离子探测仪（NILS）是一台小型负离子和电子质量分析仪（Canu-Blot 等，2025），搭载于中国嫦娥六号任务的航天器上，前往月球背面（Zeng 等，2023）。

NILS 测量电子和离子的方向分辨能谱和质谱，能量范围为 3 电子伏特/q 至 3 千电子伏/q。NILS 是一种单像素仪器，每次只能测量一个能量设置和一个观测方向。一个完整的测量周期——扫描所有能量和方向设置并将数据传输至航天器——约需 100 秒。

能量范围划分为 48 个按对数分布的能量分箱。视场是一个角宽为120° × 20°的角向切片，沿线性方向划分为 16 个独立观测方向，各方向相对于当地地平线具有不同的仰角（Canu-Blot 等，2025，图 17）。电子抑制磁体将离子与数量多得多的电子分离。在离子模式下，仪器具有中等质量分辨率$m/\Delta m \approx 2$，可将负氢与氧离子分离。粒子质量通过飞行时间单元中的速度测量，并结合静电分析器选定的已知荷质比能量来确定。

NILS 科学数据由三维能量–方向–质量矩阵的时间序列组成（Wieser 等，2025）。每个矩阵包含在一个测量周期内探测到的粒子数。这些矩阵由 48 个能量分箱、16 个仰角分箱和 64 个质量分箱组成，共同定义了所测粒子的荷质比能量、仰角和飞行时间。

3. 数据

嫦娥六号于 2024年6月1日 22:23 协调世界时在月球背面的西经 153.98°、南纬 41.64° 着陆。着陆点靠近南极-艾特肯盆地内的大型磁异常簇。NILS 在嫦娥六号任务的表面阶段运行。在 2024年6月2日 03:01 协调世界时至 2024年6月3日 03:38 协调世界时期间，它总共从月球表面记录了 302 分钟的粒子数据，并成功探测到月球表面负离子（Wieser 等，2025）。

图1显示了不同观测几何构型下月球表面负氢离子的微分数通量。竖条的大小表示微分通量（与模型无关）估计值的可能范围。竖条的颜色表示观测的显著性。对于低于100电子伏特的能量，将氢离子与电子分离的统计不确定性增大。这些曲线显示了散射和溅射的贡献，它们由下一节所述的粒子–表面相互作用模型得出。在NILS记录数据期间，平均太阳风质子能量为$E_{sw} = 466$ 电子伏特（±19.6电子伏特），平均质子数密度为8.1 ± 2.2 cm^{-3}。角度观测几何构型如图2所示。太阳天顶角（SZA）在 52° 与 47°之间变化，太阳方位角

（SA）从 43°E变化到 28°E，平均方位发射角为 $\phi = 213°$。图1中的各个面板显示了极向发射角 β不同区间的数据。

4. 相互作用模型

4.1. 一般模型

我们将微分数通量 $\mathcal{J}$ [1/(cm^2 sr eVs)] 定义为来自给定物种的发射粒子通量，不依赖于其电荷态。我们将 $\mathcal{J}$ 分解为总通量$\mathcal{A}$ [1/(cm^{2}s)] 以及两个归一化函数 $\mathcal{J}_E$ [1/eV] 和 $\mathcal{J}_\Omega$ [1/sr]，分别描述通量的能量分布和角分布

$$\mathcal{J}(E,\Omega) = \mathcal{A}\cdot\mathcal{J}_E(E;\Omega)\cdot\mathcal{J}_\Omega(\Omega)\ , \tag{1}$$

其形式为 $\int \mathcal{J}_E(E;\Omega)\,\mathrm{d}E = 1$ 和 $\int \mathcal{J}_\Omega(\Omega)\,\mathrm{d}\Omega = 1$, 其中 E [eV] 是发射粒子的能量，$\Omega = (\beta,\phi)$是发射立体角，其中 β [rad] 和 ϕ [rad] 分别为极发射角和方位发射角（见图2）。我们将总通量 $\mathcal{A}$ 分解为

$$\mathcal{A} = \eta\cdot f_\perp\ , \tag{2}$$

其中$f_\perp$ $\left[1/\left(\mathrm{cm}^2\,\mathrm{s}\right)\right]$ 为垂直于发射表面的入射粒子通量。产额 η定义为每个入射粒子从表面发射的粒子总数。我们将式1改写为展开形式

$$\mathcal{J} = f_\perp\cdot\mathcal{J}_E\cdot[\eta\mathcal{J}_\Omega]\ , \tag{3}$$

其中 $[\eta\mathcal{J}_\Omega]$ 定义角产额，即每个入射粒子发射进入给定立体角的粒子数，并对所有发射能量进行积分。

4.2. 发射粒子的电荷态

量 $\mathcal{J}$ 定义给定物种全部发射粒子的微分通量，即不论其电荷态如何。为得到给定电荷态q的微分通量，我们引入电离概率P^q 如下

$$\mathrm{P}^q \equiv \mathcal{J}^q/\mathcal{J}\ , \tag{4}$$

其中 $\mathcal{J}^q$ 是电荷态为q的发射粒子的微分通量。我们忽略多价离子，只考虑正离子（$q = +$）、负离子（$q = -$）和中性粒子（$q = 0$）。电离概率满足以下条件

$$\mathrm{P}^+ + \mathrm{P}^- + \mathrm{P}^0 = 1\ . \tag{5}$$

电离概率取决于物种、发射粒子的能量和发射方向，以及表面的性质。

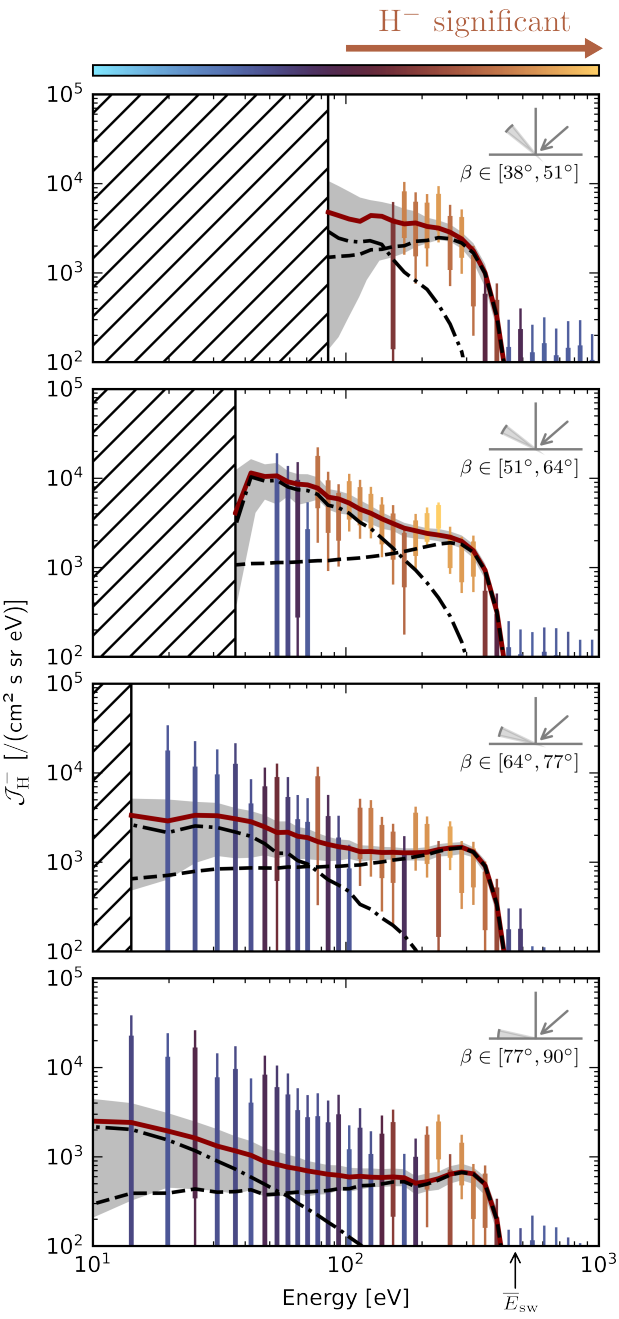

图 1：负氢离子 $\mathcal{J}_\mathrm{H}^-$ 随发射能量变化的微分数通量。竖线表示通量估计值，粗线和细线分别表示 68% 和 90% 的最高密度区间。柱条颜色定性反映信号显著性，该显著性基于广泛适用信息准则（Watanabe 2010）得出，比较了包含氢与不包含氢的模型。每个面板对应一个特定的出射极角区间 β （见右上角插图），其中朝内的箭头表示平均太阳天顶角。能量轴上的箭头标记未受扰动太阳风质子的平均能量。阴影斜线区域表示没有数据覆盖的能量范围。曲线表示散射（黑色虚线）、溅射（黑色点划线）和总量（红色实线）负氢离子通量的中位数模型值；灰色阴影表示总建模通量的 68% 最高密度区间。

4.3. 与弹丸电荷态无关

对 $\mathcal{J}$ 的定义基于以下假设：入射粒子的电荷态不会影响导致粒子最终发射的碰撞动力学。

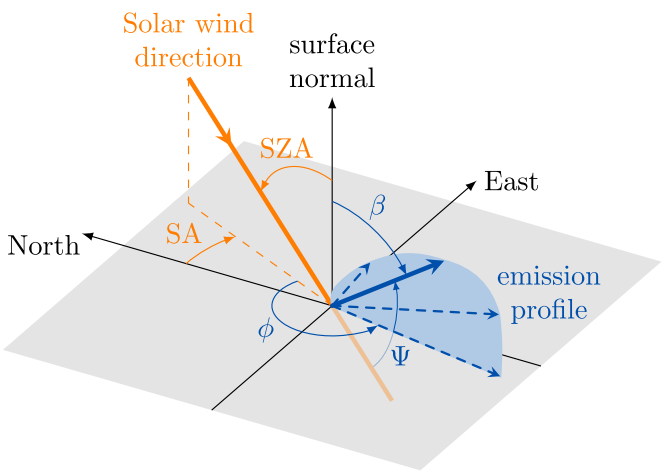

图2：太阳风入射角（橙色）和发射角（蓝色）示意图。图中绘制了一条任意的角向发射剖面，虚线箭头表示可能的出射方向。太阳天顶角（SZA）和出射极角 β 均相对于表面法线定义。太阳方位角（SA）相对于北方向，出射方位角 ϕ相对于SA。总散射角 Ψ 是太阳风方向与发射方向之间的夹角。

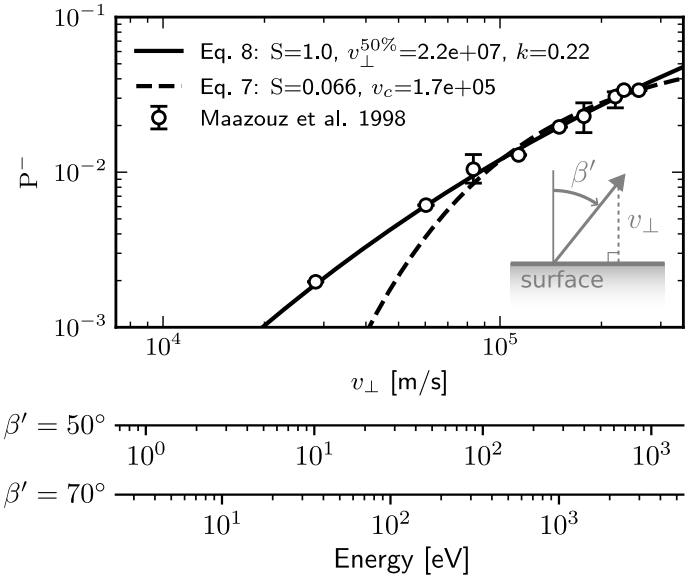

图3：1千电子伏（$\approx 4.37 \times 10^5$ m/s）氢离子在硅上散射时，负离子化概率随垂直发射速度$v_\perp$的变化。图下方给出了不同微观出射角 β' （第4.5节）对应的发射能量映射。数据点（空心圆）取自Maazouz 等（1998年，图5a），式7的最佳拟合以虚线表示，式8的最佳拟合以实线表示。

换言之，$_\perp$ 的电荷态不会产生影响。对于数百电子伏至千电子伏范围内氢、氧原子或离子的散射，负离子的比例与入射粒子的初始电荷态无关（Lienemann 等，2011年）；在相互作用过程中，电荷态几乎瞬间达到平衡。俄歇中和主导长程电荷交换，而共振电荷转移主导近程电荷交换。这些电荷交换过程的特征时间尺度为飞秒或更短（Wang等人，2001年），而二元碰撞所需时间则慢数百倍或数千倍（对于千电子伏能量的入射粒子而言）。类似地，Schenkel等人（1997年）和Peši´c等人（2007年）发现，对于具有千电子伏能量的高电荷离子（q=7–65），首次电子俘获通常发生在表面上方约60 a.u.（≈ 3 nm）处，随后在几十飞秒内完全中和。

4.4. 负电离概率

粒子离开表面后，会继续与表面交换电子，直至在数纳米的距离上达到其最终电荷态。从金属表面发射的粒子的最终电荷态主要由共振电荷转移形成（Los和Geerlings 1990年；Gainullin 2020）。电荷转移通过电子隧穿发生，穿越金属导带与入射粒子能量重叠的原子态之间的势垒。

负离子化的概率 P^-，定义为粒子离开表面后达到负电荷态的概率，对于金属表面可表示为（Eckstein1981，公式 13）

$$P^-(v_\perp) = \exp(-v_s/v_\perp)\left[1 - \exp\left(-v_f/v_\perp\right)\right], \quad (6)$$

其中，$v_\perp = \cos\beta\sqrt{2E/m}$ 是发射粒子沿表面法线方向的速度分量，单位为 m/s；m 是粒子的质量，单位为 kg；E 是粒子的能量，单位为 J；(vf, v_s) 分别是与负电荷态的形成和存续相关的特征速度。

Verbeek 等（1980年）表明，对于氢原子的发射，负离子化概率P^-对发射能量的依赖与正离子化概率P^+不同。P^+ 随能量增加，而P^- 在约2—3千电子伏处达到最大值，随后下降。此外，他们发现负离子化概率随表面功函数降低而增大，这与共振电荷转移占主导相一致：较低的功函数会缩小导带与入射粒子电子态之间的能隙，从而提高在更大距离上发生共振交换的效率。对于能量为数百电子伏特的发射粒子，负离子化概率可简化为（Wucher 2008年，式2-4）

$$P^-(v_\perp) \approx S\exp(-v_c/v_\perp), \quad (7)$$

其中，v_c 是系统的临界速度，S 是一个常数，用于控制高发射速度下的概率（$v_\perp \gg v_c$）。Lang 与 Nørskov（1983）在描述从金属表面溅射出的原子的负离子化概率时，也发现了相同的关系。

与导电表面不同，月壤由功函数较高、带隙较大的绝缘材料组成。因此，用于金属表面的准自由电子模型并不适用。尽管如此，Borisov&Esaulov（2000）指出，尽管这些条件不利于共振电荷交换，绝缘表面仍然可以高效地产生负离子。例如，Wieser 等（2002）和 Wurz 等（2006）指出

在掠入射条件下，约有 3-7% 的质子在氧化镁表面散射时转化为负氢。

图3展示了 Maazouz 等（1998）报告的 0.5–4 千电子伏氢离子在半导体硅上散射时的负电离概率测量结果。金属表面模型（式 7）在较大的$v_\perp$ 下拟合较好，但会低估较小$v_\perp$下的负电离概率。与金属表面的情况一样，半导体或绝缘体上的负电离概率取决于离子速度垂直于表面的分量。我们采用与 Demkov（1963，式 11）类似的函数形式来描述这种依赖关系：

$$\mathrm{P}^{-}(v_\perp) = \mathrm{S}\,\mathrm{sech}^2\left[\operatorname{arcosh}(\sqrt{2})\left(\frac{v_\perp^{50\%}}{v_\perp}\right)^{k}\right], \tag{8}$$

其中，参数$v_\perp^{50\%}$是使 $\mathrm{P}^{-}(v_\perp^{50\%})$达到其最大值一半（即 S/2）时的垂直速度；$k$ 控制函数的陡峭程度；S 是$v_\perp \to \infty$下的电离概率。取 $\mathrm{S} = 1$、$v_\perp^{50\%} = 6.4\times10^{6}$ 米/秒和$k = 0.26$ 时，可以在较宽的$v_\perp$范围内很好地拟合图3中的数据。尽管 $\mathrm{S} = 1$ 在物理上并不成立，该模型仍适用于本研究所涉及的垂直速度范围。

表面的原子组成也会发挥作用：已知氧原子的存在会提高正离子化的概率，并在较小程度上提高负离子化的概率（Wucher 2008年；Wucher 等 2013年）。

4.5. 微观尺度上的发射角

发射角 β 定义为表面法线与发射方向之间的极角，如图2所示。然而，表面法线的定义取决于所考察的空间尺度。利用原位数据对角产额进行参数化时，我们采用宏观（米级）表面法线（见第5.2.4节），以便将结果与基于轨道观测的研究进行比较。然而，发射粒子的最终电荷态是在距表面仅数纳米处形成的。因此，对于这一过程，发射角必须相对于微观表面法线而非宏观平均值来定义。我们将这一微观发射角记为 β'。

我们采用 Szabo 等（2022）的理论，建立宏观角 β 与微观角β'之间的映射。对于月壤，与给定宏观角 β [rad]对应的平均微观发射角 β' [rad] 可由三次多项式很好地近似（附录 B 提供了更详细的讨论）

$$\overline{\beta'}(\beta) = -0.33\beta^3 + 0.81\beta^2 + 0.039\beta + 0.48\,. \tag{9}$$

NILS 仪器覆盖宏观极角$\beta \in [45, 90]$ deg，对应于平均微观角 $\beta' \in [49, 72]$ deg。由于月壤的粗糙度较高，以掠射角（$\beta' \gtrsim 70$deg）发射的粒子很可能会再次撞击表面，因此无法被 NILS 测量。

4.6. 综合起来

我们首先将垂直入射通量定义为$f_\perp$

$$f_\perp = f_{\mathrm{in}}\cos(\mathrm{SZA})\,, \tag{10}$$

其中，f_{in} [1/(cm^2 s)] 表示入射粒子的通量，太阳天顶角（SZA）是入射方向与表面法线之间的夹角，如图2所示。由于像差的影响，实际太阳风入射方向可能与太阳方向略有不同，但为方便记述，我们使用“太阳天顶角”（SZA）这一术语。该形式体系自然适用于任意定向的入射粒子群体。

现在我们假设，发射粒子要么是从表面溅射出来的，要么源于沉降粒子的散射。我们将微分数通量 $\mathcal{J}$ 表示为这两个过程之和：

$$\mathcal{J} = \mathcal{J}^{\mathrm{sc}} + \mathcal{J}^{\mathrm{sp}}\,, \tag{11}$$

其中，$\mathcal{J}^{\mathrm{sc}}$ 表示散射通量，$\mathcal{J}^{\mathrm{sp}}$ 表示溅射通量。结合公式 3、4、10 和 11，可得特定电荷态q的微分数通量

$$\begin{aligned}\mathcal{J}^{q}(E,\Omega) = {} & \mathrm{P}^{q} f_{\mathrm{in}}\cos(\mathrm{SZA})\cdot \\ & \Big\{ \\ & \quad \mathcal{J}_E^{\mathrm{sc}}(E;\Omega)\left[\eta^{\mathrm{sc}}\,\mathcal{J}_\Omega^{\mathrm{sc}}(\Omega)\right] \\ & + \\ & \quad \mathcal{J}_E^{\mathrm{sp}}(E;\Omega)\left[\eta^{\mathrm{sp}}\,\mathcal{J}_\Omega^{\mathrm{sp}}(\Omega)\right] \\ & \Big\}\,,\end{aligned} \tag{12}$$

其中，$\eta^{\mathrm{sc}} \in [0,1]$ 为散射产额，自然不会超过 1。原则上，溅射产额可以超过 1，且 $\eta^{\mathrm{sp}} \geq 0$。散射粒子和溅射粒子的能量分布将在以下各节中建模。

4.7. 溅射组分

太阳风辐照下月球表面溅射原子的能量分布，采用 Ono 等人（2005）的解析模型进行描述。该模型扩展了 Kenmotsu 等人（2004）的早期公式；Wieser 等人（2024）曾成功应用该公式来描述月球表面氢原子的溅射。与 Kenmotsu 等人（2004）的原始模型不同，该扩展模型同时考虑了弹性能量损失和非弹性能量损失，后者在数百电子伏至数千电子伏范围内尤为重要。对于数百电子伏的入射粒子能量，扩展模型与模拟结果的一致性优于早期模型（Ono 等人，2005，图 2 和 3）。

这两个模型都基于 Kenmotsu 等人（2004）所描述的相同溅射机制。模型考虑一个入射粒子穿透固体表面，与表面原子发生大角度背散射，并通过非弹性和弹性碰撞损失能量；后者会产生反冲 原子（Sigmund 1969年），即偏离其原始晶格位置的表面原子。能量足以逸出表面的反冲原子被称为溅射原子。被入射粒子直接撞击的原子称为初级反冲原子，或初级碰撞原子（PKA）。对于轻入射粒子（例如氢、氘、氦），次级、三级及更高阶反冲原子对溅射的贡献通常很小，因此模型主要关注初级反冲原子。图4展示了本节所述溅射过程的不同阶段。

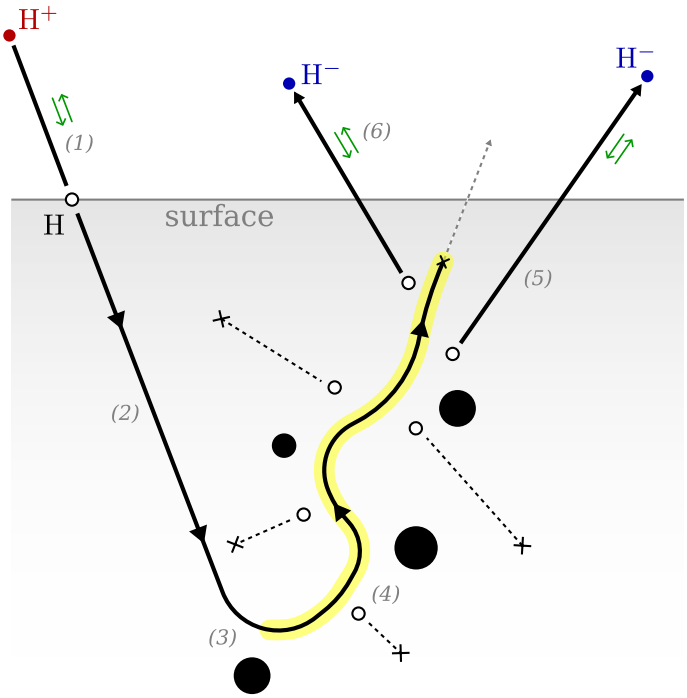

图 4：轻离子诱发溅射示意图。一个质子（实心红色圆圈）朝向表面运动，并（1）迅速中和为氢原子（空心圆圈）；（2）穿透材料并损失其能量的一部分 γ_{extra}；（3）与一个表面原子（实心黑色圆圈）发生大角度散射；（4）在非弹性损失额外能量的同时（黄色叠层），产生各向同性发射的氢初级反冲原子（PKA，空心圆圈）；大多数反冲氢原子无法逃逸表面（叉号），而靠近表面的反冲氢原子（5）逃逸表面的概率更高；（6）电荷交换转移（绿色箭头）最终可能导致形成负电荷态（实心蓝色圆圈）。

Ono 等人（2005）提出的原始模型描述的是轻离子对重质单组分非晶材料的溅射；我们对其进行了修改，用以描述轻离子撞击重质多组分非晶材料时氢的溅射。首先，我们引入记号（P → S），表示入射原子P与任意一种物种为S的表面原子发生相互作用。为强调入射原子P与材料中的氢原子相互作用这一特殊情况，我们使用记号（P → H）。

我们将 Ono 等人（2005年）中的公式 1 改写，以考虑相互作用的多物种特性。该公式描述入射粒子穿过表面时的能量损失以及氢原子的反冲：

$$\overbrace{r_{\text{H}}\frac{\mathrm{d}\sigma_{(\text{P}\to\text{H})}(E,E_0)}{\mathrm{d}E_0}}^{(1)} = \overbrace{\frac{\partial F_{\text{PKA}}(E,E_0)}{\partial E}}^{(2)} \cdot \sum_{\text{S}} r_{\text{S}} \left[\underbrace{S_e^{(\text{P}\to\text{S})}(E)}_{(3)} + \underbrace{\int_0^{T_{\max}^{(\text{P}\to\text{S})}} T\,\mathrm{d}\sigma_{(\text{P}\to\text{S})}(E,T)}_{(4)} \right] \tag{13}$$

其中，$\mathrm{d}\sigma_{(\text{P}\to\text{S})}$ [nm^2] 是入射粒子 P 与物种 S 的表面原子相互作用时的微分弹性散射截面；类似地，$\mathrm{d}\sigma_{(\text{P}\to\text{H})}$ 是入射粒子 P 与表面氢原子相互作用时的微分弹性散射截面；F_{PKA} [1/eV]是入射粒子产生的氢初级反冲原子的能量分布；E [eV] 是入射粒子的能量；E_0 [eV] 是氢初级碰撞原子的初始能量；$S_e^{(\text{P}\to\text{S})}$[eVnm^2] 是入射粒子 P 与物种 S 的表面原子电子云相互作用时的电子阻止截面；r_{S} 是材料中物种 S 的相对原子浓度；类似地，r_{H} 是材料中氢原子的相对原子浓度；T [eV]是表面原子的反冲能量；$T_{\max}^{(\text{P}\to\text{S})}$ [eV] 是物种 S 的反冲原子与入射粒子 P 发生弹性碰撞后的最大能量。公式 13 中的各项源项和汇项如下：

(1) 源项，即入射粒子能量为 E 时产生的能量为 E_0 的氢初级反冲原子数量。(2) 随着入射粒子能量降低，其仍能产生的能量为 E_0 的氢初级反冲原子数量的变化率。(3) 入射粒子因非弹性碰撞导致的能量损失率。(4) 入射粒子因弹性碰撞导致的能量损失率。

4.7.1. 初始背散射

入射粒子 P 与物种 S 的反冲原子发生弹性碰撞后，其最大能量定义为

$$T_{\max}^{(\text{P}\to\text{S})} = E_{\text{in}}\Gamma_{(\text{P}\to\text{S})}\,, \tag{14a}$$

$$\Gamma_{(\text{P}\to\text{S})} = \underbrace{(1-\gamma_{\text{back}})(1-\gamma_{\text{extra}})}_{(1)}\overbrace{\gamma_{(\text{P}\to\text{S})}}^{(2)}\,, \tag{14b}$$

其中，E_{in} [电子伏特]是入射粒子的初始能量，而$\gamma_{(\text{P}\to\text{S})}$定义了二体弹性碰撞过程中从入射粒子 P 转移到靶原子 S 的最大能量比例，如（Niehus 等人，1993年，方程 8）所示。

$$\gamma_{(\text{P}\to\text{S})} = \frac{4M_{\text{P}}M_{\text{S}}}{(M_{\text{P}}+M_{\text{S}})^2}\,, \tag{15}$$

其中，入射粒子的质量用 M_{P} 表示，表面原子的质量用 M_{S}表示。在氢—氢相互作用这一特殊情况下，能量全部转移，即 $\gamma_{(\text{H}\to\text{H})} = 1$。能量损失因子 γ_{back} 定义了入射粒子被表面原子以大角度背散射时损失的能量（Ono 等人（2005），“被靶原子以接近 180° 的角度背散射”）。为简单起见，我们将该因子近似为$\gamma_{\text{back}} \approx \sum_{\text{S}} r_{\text{S}}\gamma_{(\text{P}\to\text{S})} = 0.21$（见表 2）。

引入额外的经验能量损失因子 γ_{extra}，以提高模型的灵活性，并考虑未明确纳入的影响，例如入射粒子在大角度背散射前损失的能量，以及氢初级反冲原子穿过材料到达表面时损失的能量。因此，因子 $\Gamma_{(\text{P}\to\text{S})}$ 量化了入射粒子与表面原子之间的最大和总 能量转移。公式 14 从概念上将入射粒子在材料中的输运分为两个阶段：

（1）入射粒子 P 被表面原子 S 初始大角度背散射（图 4 中的步骤 3），以及（2）与表面原子发生后续二元弹性碰撞（图 4 中的步骤 4）。

4.7.2. 弹性损失

微分散射截面 $\mathrm{d}\sigma_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}$ 由一个参数化表达式近似表示（Ono 等人（2005），公式 7），其参数取决于主导相互作用的散射机制。为确定散射机制，我们在最大转移能量 $R = \epsilon_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}(E)\sqrt{T/T_{\max}^{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}}$ 处计算 $T = T_{\max}$。约化能 ϵ 的定义见 Ono 等人（2005，公式 5）

$$\epsilon_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}(E) = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}\frac{a^{(\mathrm{P,\,S})}}{Z_\mathrm{P}Z_\mathrm{S}}\frac{M_\mathrm{S}E}{M_\mathrm{P}+M_\mathrm{S}}\,, \tag{16}$$

其中 Z_P 为入射粒子的原子序数，Z_S 为表面原子的原子序数，ϵ_0 为真空介电常数，e 为元电荷，$a^{(\mathrm{P,\,S})}$ 为托马斯-费米屏蔽长度，其定义为

$$a^{(\mathrm{P,\,S})} = 4.685\times10^{-2}\left(Z_\mathrm{P}^{2/3}+Z_\mathrm{S}^{2/3}\right)^{-1/2}\ [\mathrm{nm}]\,. \tag{17}$$

约化能使用反散射离子的能量计算，$E_\mathrm{back} \approx E_\mathrm{in}(1-\gamma_\mathrm{back})$，并优先考虑高能量转移碰撞，因为这类碰撞最有可能产生能量足够、能够对溅射产生显著贡献的初级反冲原子。对于太阳风质子与月球风化层的相互作用，R 的值在 $1.18\times10^{-2} \le R \le 1.11$ 范围内。这对应于 Ono 等人（2005）模型中所确定的区域 *II* 散射机制，其微分散射截面表示为

$$\mathrm{d}\sigma_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}(E,T) = C_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}E^{-1/2}T^{-3/2}\mathrm{d}T\,, \tag{18}$$

其中 $C_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}$ $\left[\mathrm{eV\ nm^2}\right]$ 为控制弹性散射截面的常数，其定义为

$$C_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})} = 0.276\pi a^{(\mathrm{P,\,S})}Z_\mathrm{P}Z_\mathrm{S}\sqrt{\frac{M_\mathrm{P}}{M_\mathrm{S}}}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\,, \tag{19}$$

为方便起见，我们可以将常数 $e^2/4\pi\epsilon_0 \approx 1.44$ [电子伏特纳米] 近似处理。

4.7.3. 非弹性损失

太阳风质子的能量从几百电子伏特到几千电子伏特不等。它们与表面的相互作用属于 Lindhard–Scharff 区域（Lindhard 和 Scharff，1961年），在此区域中，电子阻止本领 $S_e^{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}$ 近似正比于入射粒子速度：

$$S_e^{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}(E) = K_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}\sqrt{E}\ \text{, with} \tag{20a}$$

$$K_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})} = \frac{1.216\times10^{-2}\,Z_\mathrm{P}^{7/6}\,Z_\mathrm{S}}{\sqrt{M_\mathrm{P}}\left(Z_\mathrm{P}^{2/3}+Z_\mathrm{S}^{2/3}\right)^{3/2}}\ \left[\mathrm{eV}^{1/2}\ \mathrm{nm}^2\right]\,. \tag{20b}$$

为清楚起见，我们将 $K_{(\mathrm{P})} = \sum_\mathrm{S} r_\mathrm{S}K_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}$ 记为材料元素组成平均的非弹性能量损失常数。图 4 中的黄色叠加区域表示非弹性损失。

4.7.4. 反冲密度与能量分布

对方程 13 进行一些代数变换后，我们得到材料内部氢的 PKA 密度

$$\frac{\partial F_\mathrm{PKA}(E,E_0)}{\partial E} = \frac{r_\mathrm{H}C_{(\mathrm{P}\to\mathrm{H})}E_0^{-3/2}E^{-1/2}}{K_{(\mathrm{P})}\sqrt{E}+2\sum_\mathrm{S}r_\mathrm{S}C_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}\sqrt{\Gamma_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}}}\,. \tag{21}$$

能量为 E 的入射粒子若能量足够，可产生能量为 E_0 的氢初级碰撞原子；也就是说，$E \ge E_0/\Gamma_{(\mathrm{P}\to\mathrm{H})} = E_\mathrm{min}$。我们对 E 从 E_min 到入射粒子的初始能量 E_in 对公式 21 积分，得到

$$F_\mathrm{PKA}(E_0;E_\mathrm{in}) \propto E_0^{-3/2}\ln\left[\frac{\sqrt{E_\mathrm{in}}+\mathcal{B}_{(\mathrm{P})}}{\sqrt{\dfrac{E_0}{\Gamma_{(\mathrm{P}\to\mathrm{H})}}}+\mathcal{B}_{(\mathrm{P})}}\right]\,, \tag{22a}$$

$$\mathcal{B}_{(\mathrm{P})} = 2\frac{\sum_\mathrm{S}r_\mathrm{S}C_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}\sqrt{\Gamma_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}}}{K_{(\mathrm{P})}}\ \left[\mathrm{eV}^{1/2}\right]\,. \tag{22b}$$

我们将 F_PKA 写成一个相差仅为乘法常数的形式；该常数与能量无关，因此不会影响氢初级反冲原子的能量分布。根据以下假设，可以得到逃逸表面并发生溅射的氢初级反冲原子的能量分布：(i) 氢初级碰撞原子逃逸表面的概率随其生成深度呈指数递减；(ii) 氢初级反冲原子在非常靠近表面处各向同性地产生。氢初级反冲原子必须具有足够的能量，才能克服 U [电子伏特] 的表面结合能并逃逸表面。我们对 E_0 从 $E_0 = U$ 到 $E_0 = T_{\max}^{(\mathrm{P}\to\mathrm{H})}$ 积分，并对生成深度和立体角积分，从而得到入射粒子 P 照射多组分表面时溅射氢原子的能量分布表达式：

$$\boxed{\mathcal{J}_E^{\mathrm{sp}}(E;E_\mathrm{in},U) = \frac{E}{\mathrm{n}_{(\mathrm{P})}(E+U)^{5/2}}\ln\left(\frac{\sqrt{E_\mathrm{in}}+\mathcal{B}_{(\mathrm{P})}}{\sqrt{\dfrac{E+U}{\Gamma_{(\mathrm{P}\to\mathrm{H})}}}+\mathcal{B}_{(\mathrm{P})}}\right)}\,, \tag{23}$$

对于 $E \in [0, E_\mathrm{in}\Gamma_{(\mathrm{P}\to\mathrm{H})} - U]$，其他情况下为 0，其中 $\mathrm{n}_{(\mathrm{P})}$ 是归一化因子，使得 $\int_0^\infty \mathcal{J}^{\mathrm{sp}}{}_E(E)\mathrm{d}E = 1$。

可利用表 2 中元素组成模型的平均值估算 $\mathcal{B}$。图 5 展示了在不同 γ_extra 值下，月壤溅射出的氢原子的能量分布示例。

4.7.5. 对 $\mathcal{B}$ 的依赖关系

常数 $\mathcal{B}$ 在解析上较为复杂，因为它取决于许多参数。不过，在估算整个能谱范围内的溅射概率时，通常可以忽略 $\mathcal{B}$（$\mathcal{B}=0$），而不会造成显著的精度损失。

设 $a \equiv \sqrt{E_\mathrm{in}}$ 和 $c \equiv \sqrt{(E+U)/\Gamma_{(\mathrm{P}\to\mathrm{H})}}$。对于 $\mathcal{B} \ll a$、c，对式 23 中关于 $\mathcal{B}=0$ 的对数进行一阶泰勒级数展开，得到 $\ln(a/c) + \mathcal{B}(1/a - 1/c) + O\left(\mathcal{B}^2\right)$。对于 $a \approx c$，一阶导数为 0，因此式 23 中的对数项，以及由此得到的 $\mathcal{J}^{\mathrm{sp}}{}_E$，均与 $\mathcal{B}$ 无关。即使对于 $\mathcal{B} \ll a$、c，也就是说，当 $\mathcal{B} \approx \sqrt{E_\mathrm{in}}$ 时（太阳风能量便是如此），

如果$a \approx c$，一阶导数项仍然很小。因此，仍可忽略对 $\mathcal{B}$ 的依赖。当$c \neq a$时，常数 $\mathcal{B}$才开始发挥作用，也就是$E \ll E_{\rm ino}$。然而，能谱的高能端主要取决于入射粒子的能量，以及它在材料内部以大角度发生背散射时损失的能量。

4.7.6. α诱导溅射效率

太阳风主要由质子和α粒子组成，两者都能溅射表面氢原子，但效率不同。根据 Ono 等人（2005年，方程 14-II 和 15-II ），我们发现，溅射效率 $\mathcal{Y}_{(\mathrm{P}\to\mathrm{H})}$ 定义为每个入射粒子 P 溅射出的氢原子数（无论能量如何），其值为：

$$\mathcal{Y}_{(\mathrm{P}\to\mathrm{H})} \equiv \frac{\mathrm{n}_{(\mathrm{P})}\, L\, C_{(\mathrm{P}\to\mathrm{H})}}{K_{(\mathrm{P})}}\,, \tag{24}$$

其中，L 是氢初级反冲原子的碰撞平均自由程，n 是方程 23 中引入的归一化因子。上述方程具有直接的物理解释：较大的散射截面（C）会提高初级碰撞原子的产生效率，但这会被入射粒子通过电子阻止（K）损失能量的能力所抵消。平均自由程越长，溅射产额越大。因此，根据方程 24，我们发现，对于月壤，α粒子溅射氢原子的效率约为质子的 $\mathcal{Y}_{(\mathrm{He}^{++}\to\mathrm{H})}/\mathcal{Y}_{(\mathrm{H}^{+}\to\mathrm{H})} \approx 2.8$ 倍。L 的影响会相互抵消，因为无论入射粒子是什么，溅射出的原子始终都是氢原子。

对各种矿物受到太阳风离子诱导溅射的模拟，以及对月壤样品的实验测量表明，α粒子诱导溅射的产额约为质子产生的产额的十倍（Morrissey等人 2024年；Brötzner等人 2025a），高于我们的简化估算。尽管如此，为了与本文提出的模型保持一致，我们仍采用较低的估算值。

尽管α粒子的能量更高，溅射氢的效率也更高，但由于它们在太阳风中的丰度较低，因此对溅射氢原子能量分布的贡献仍然很小（见图5）。不过，在计算总溅射通量时，我们将α粒子也纳入其中。根据 OMNI-2数据库（King与Papitashvili 2005年）的数据，在 NILS 任务期间，太阳风中α粒子与质子的平均数密度比约为4%。如果α粒子溅射氢的效率是质子的2.8倍

比质子更有效地，因而它们的影响可作为入射质子通量的有效增量计入：$(1+k_\alpha)\, f_{\rm in}$，其中修正因子$k_\alpha = 2.8 \times 0.04 = 0.11$。

4.8. 散射成分

轻离子从重材料散射后的能量分布已得到广泛研究，尤其是在核聚变反应堆中等离子体–壁相互作用的背景下。在入射粒子能量为几千电子伏或更低时，散射主要处于两种机制：单次碰撞主导能谱的高能端，多次碰撞主导低能端。托尔马乔夫（1999年）采用同时计入弹性损失和非弹性损失的单次碰撞方法，对轻离子散射进行了建模。该模型具有通用性，适用于弹性碰撞之间的平均自由程与总非弹性射程的任意比值。

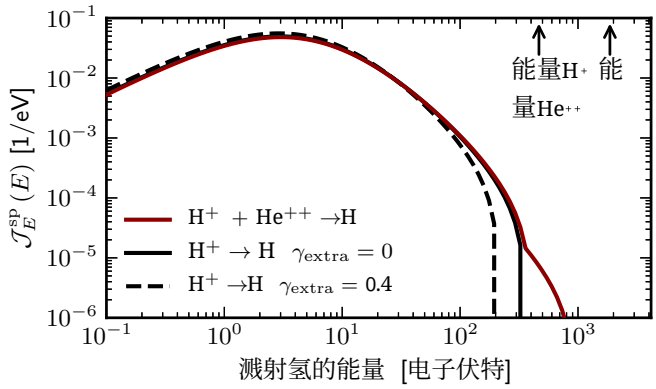

图5：300 km/s太阳风H^+ 和He^{++} 离子撞击月壤所溅射的氢原子能量分布（入射粒子的能量以上箭头标出）。假定表面结合能为$U = 5$ 电子伏特。图中给出三种模型：无额外能量损失的质子诱导溅射（实线）；有额外能量损失的质子诱导溅射（虚线）；以及同时来自质子和α粒子的溅射，假定α粒子与质子之比为4%且无额外能量损失（红色实线）。

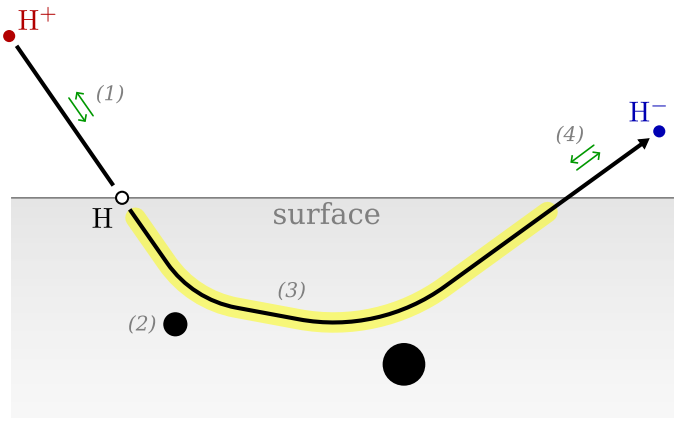

图6：轻离子从表面散射的示意图。一个质子（红色实心圆）朝向表面，（1）迅速中性化；（2）以小至中等角度从至少两个表面原子（黑色实心圆）上散射；（3）非弹性地损失能量（黄色叠加层）；（4）离开表面，同时电荷交换转移（绿色箭头）可能导致最终的负电荷态（蓝色实心圆）。

在多次碰撞占主导的能量区间，大多数理论模型都是通过采用各种方法近似玻尔兹曼扩散方程推导而来的。Littmark & Gras-Marti（1978年）通过矩方法近似离子深度分布，研究了轻离子的散射。一个重要结论是，若忽略深度分布的偏度，散射粒子的能量分布便可用高斯近似描述。Forlano 等人（1996）开展了另一项研究，采用离散流方法，并假设散射截面遵循幂律，同时忽略非弹性损失。他们的模型成功预测了轻离子在重靶上散射时观察到的特征性双峰能量分布：较高能量的峰对应仅经历少数几次碰撞的粒子，而较低能量的峰则来自多次碰撞区间（Brötzner等人（

2025年b）。Falcone 等人（1999年）后续开展的研究考虑了非弹性损失，但忽略了弹性损失；对于在重靶上散射的轻离子，这一假设是成立的（Berger等人，2005年）。该模型与模拟结果吻合良好，但散射离子的能量接近入射能量时例外。作者认为，若加入弹性损失以及非弹性损失的波动，可能会改善吻合程度。Sukhomlinov（1997年）通过微扰展开处理弹性损失，将玻尔兹曼扩散方程线性化。他们的模型考虑了现实的多组分非均匀材料，并指出，密度随深度增加会减少高能离子的背散射（穿透更深、发生多次散射），但会增加低能离子的背散射（穿透较浅、发生单次散射）。

最近，Afanas'ev 和 Lobanova（2025年）表明，电子散射理论可用于描述轻离子的散射；对于能量处于千电子伏及以上范围的入射粒子，该理论与模拟结果特别吻合。

综合考虑上述所有解析模型后，我们选择了 Forlano 等人（1996）的模型，因为它简单且易于调整以进行拟合。图 6 总结了我们模型中所考虑的散射过程的不同阶段。

4.8.1. 加入非弹性损失

Forlano 等人（1996）的模型考虑离子以垂直入射方式撞击表面，并因与表面原子发生弹性二体碰撞而向外散射。

Forlano 等人（1996）的原始模型忽略了非弹性能量损失。我们通过修改模型的高能渐近极限，将非弹性能量损失纳入考量（图 6 中的黄色叠加部分）。在离散流形式中，$F_2(z=0, s\gg 1)$（Forlano 等人 1996，公式 6 和 16）是深度为 $z=0$ 处、以最高能量（$s\gg 1$）发生背散射的粒子能量分布的梅林变换（例如 Bertrand 等人，2000）。这些粒子沿着最高效的路径运动，只与表面原子发生两次弹性碰撞（平均散射角为 45°），从而由垂直入射方向反向散射，最终能量达到最大值 弹性能量 $p^2E_{\rm in}$，其中 p 是弹性二体碰撞期间的相对能量损失。我们通过将这一截断能量降低至 $p^2E_{\rm in}-\Delta_\epsilon$来模拟非弹性损失，其中 Δ_ϵ 是粒子沿这条直接轨迹运动时的总非弹性能量损失。由此得到修正后的渐近表达式（Forlano 等人 1996，见公式 16）：

$$F_2(z=0, s\gg 1)\propto\left(p^2E_{\rm in}-\Delta_\epsilon\right)^{s-1}\ , \tag{25}$$

其中，描述核散射概率的比例常数保持不变。这一修正仅影响能量分布的高能部分，并保留了原解的解析形式。更具体地说，对于与速度成正比的阻止本领$S_e\propto\sqrt{E}$（见式 20），其在高能下变化缓慢，因此可表示为 $\Delta_\epsilon\approx n_{\rm eff}\,S_e(E_{\rm in})\,L_{\rm eff}$，其中$n_{\rm eff}$为风化层的平均原子数密度，$L_{\rm eff}$ 为这条发生两次碰撞的散射轨迹的路径长度。引入这一额外的能量损失因子后，入射粒子 P 在由 S 原子构成的单一物种表面上发生散射时，其能量分布可表示为

$$\mathcal{J}_E^{\rm sc}(E;E_{\rm in},U,\Delta_\epsilon)=\begin{cases}\dfrac{2E\kappa}{\mathrm{n}\,(E+U)^2}f(x), & \text{if } x>0\\ 0, & \text{otherwise,}\end{cases} \tag{26a}$$

$$f(x)=\frac{\mathcal{I}_2(x)}{xe^x}\ , \tag{26b}$$

$$x=\kappa\ln\zeta\ , \tag{26c}$$

$$\zeta=\frac{p^2(E_{\rm in}+U)-\Delta_\epsilon}{E+U}\ , \tag{26d}$$

$$\kappa=\frac{mp(1-p)^{m-1}}{\gamma^m}\ , \tag{26e}$$

其中，$\mathcal{I}_2$ 为第一类修正贝塞尔函数；γ为根据式 15 定义的单次弹性碰撞中入射粒子向表面原子转移的最大能量比例；U 为表面结合能；m 为控制幂律散射截面的因子，如式 29 所示。为便于阅读，在式 26.d 和 26.e 中省略了p、m、Δ_ϵ和 γ的下标 (P →S)。常数$p^{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}$定义了单次弹性碰撞中入射粒子偏转 45°时损失的相对能量，其定义与 Forlano 等人（1996，式 8）中的定义相同：

$$p_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}=\frac{M_{\rm P}\sqrt{2M_{\rm S}^2-M_{\rm P}^2}+M_{\rm S}^2}{(M_{\rm P}+M_{\rm S})^2}\ . \tag{27}$$

常数 n 将函数归一化为 1，使得$\int_0^\infty\mathcal{J}_E^{\rm sc}(E)\mathrm{d}E=1$。为降低通过数值积分估算常数 n 的计算成本，我们在能量归一化空间中求取该常数，其近似解见附录 E。函数 f 的计算开销很大，但对于 $10^{-5}<x<10^2$，可用以下表达式进行近似，最大相对误差为 4%：

$$f(x)\approx\frac{x/8}{(1+0.71521x+0.32953x^2)^{1.28}}\ . \tag{28}$$

4.8.2. 弹性散射

Forlano 等人（1996）用由指数$m=1/s$控制的幂律近似原子间势，其中 s 的定义见 Lindhard 等人（1968年，式 3.5）。特殊值$m=1$描述硬球相互作用的情形，此时电子屏蔽可忽略，散射趋近于纯卢瑟福型相互作用，可由未屏蔽的库仑势很好地描述（Lindhard 等，1968，图 1）。对于能量为数百电子伏特的轻入射粒子撞击较重材料的情形，电子屏蔽不可忽略，即$m<1$。对于能量为$E_{\rm in}$、撞击表面原子（$M_{\rm S}$，$Z_{\rm S}$）的入射粒子（$M_{\rm P}$，$Z_{\rm P}$），我们计算其指数$m^{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}(E_{\rm in})$，如下所示：

$$m=0.5\left[1-\frac{\mathrm{d}\ln s_{\rm r}(\epsilon)}{\mathrm{d}\ln\epsilon}\right]\ , \tag{29}$$

其中$s_{\rm r}(\epsilon)$为约化核阻止截面（Lindhard 等，1968，式4.11），而 ϵ 为约化能

（见式16），其取值在$E_{\rm in}$处。我们使用氪-碳势计算$s_{\rm r}$，该势可由Ziegler与Biersack（1985，式14）很好地近似。由托马斯-费米势（Lindhard 等，1968，图2、表2b）推导$s_{\rm r}$，所得结果非常相似。

为了近似描述氢原子与月壤中多种原子种类相互作用时的指数m，我们计算其有效值为

$$m_{(\mathrm{H}\to\mathrm{eff})} = \sum_{\mathrm{S}} r_{\mathrm{S}}\, m_{(\mathrm{H}\to\mathrm{S})}\,, \tag{30}$$

其中r_{S}是月壤中物种 S 的原子分数，见表 2。对于能量为 470 电子伏特（300 km/s）的入射粒子，我们得到$m_{(\mathrm{H}\to\mathrm{eff})} \approx 0.57$；对于能量为 1300 电子伏特（约 500 km/s）的入射粒子，$m_{(\mathrm{H}\to\mathrm{eff})} \approx 0.66$。随着入射粒子能量增加，原子间势指数$m$趋近于 1，这与相互作用逐渐转变为类似硬球的核相互作用相一致。

4.8.3. 能量涨落

单能离子束穿过材料时，各个离子因非弹性碰撞而损失的能量并不相同 Δ_ϵ。相反，非弹性能量损失服从统计分布，其均值为 μ_ϵ，宽度由标准差 σ_ϵ表征。我们将这一宽度称为“能量涨落”。

能量涨落是由非弹性碰撞过程中的统计涨落引起的。Kaneko（1990年）指出，外壳层电子的激发在慢离子的能量损失中发挥着重要作用。针对氢-铅相互作用，采用逐壳层局域电子密度模型进行研究后，他们报告（Kaneko 1990年，表 1）称，在低速下，6s 和 6p 壳层主导非弹性损失，其相对歧离 $\sigma_\epsilon/\mu_\epsilon$ 分别为 16% 和 11%。在低速下，内壳层对总能量损失的贡献要小得多，因为慢速入射粒子很少能深入到足以与它们相互作用的程度。尽管如此，一旦发生此类相互作用，相关的能量涨落可能会很大。例如，与 2s 壳层相关的涨落很大，为 $\sigma_\epsilon/\mu_\epsilon = 560\%$。月壤主要由氧原子构成，其电子排布 $1s^2 2s^2 2p^4$ 仅涉及此类内壳层，而这些壳层均与较大的能量涨落相关。

为在模型中引入能量涨落，我们将 Δ_ϵ视为从截断于物理允许区间$0 \le \Delta_\epsilon < \Delta_{\epsilon\,\max}$的正态分布中抽取的随机变量，其中 $\Delta_{\epsilon\,\max} = p^2(E_{\rm in} + U) - U$ 根据条件$x > 0$推导得出（见式 26）：

$$\Delta_\epsilon \sim \mathtt{TruncNorm}\left(\mu = \mu_\epsilon, \sigma = \sigma_\epsilon, \mathrm{lower} = 0, \mathrm{upper} = \Delta_{\epsilon\,\max}\right). \tag{31}$$

截断高斯分布下能量分布 $\mathcal{J}_E^{\rm sc}(E;\,\Delta_\epsilon,\,..)$ 的期望值可表示为

$$\mathbb{E}\left[\mathcal{J}_E^{\rm sc}\,(E;\Delta_\epsilon)\right] = \frac{1}{Z\sqrt{\pi}} \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{J}_E^{\rm sc}\left(E;\Delta_\epsilon = \mu_\epsilon + \sqrt{2}\sigma_\epsilon t\right) e^{-t^2}\,\mathrm{d}t\,, \tag{32a}$$

$$t_0 = -\frac{\mu_\epsilon}{\sqrt{2}\,\sigma_\epsilon}\,, \tag{32b}$$

$$t_1 = \frac{\Delta_{\epsilon\,\max} - \mu_\epsilon}{\sqrt{2}\,\sigma_\epsilon}\,, \tag{32c}$$

$$Z = \mathtt{erf}\,(t_1) - \mathtt{erf}\,(t_0)\,, \tag{32d}$$

其中，erf 为误差函数，t 是积分变量。实际上，该积分通过限制在区间 $[t_0,t_1]$ 上的高斯-勒让德求积进行数值计算：

$$\mathbb{E}\left[\mathcal{J}_E^{\rm sc}\,(E;\Delta_\epsilon)\right] \approx \frac{t_1 - t_0}{Z\sqrt{\pi}} \sum_i^N w_i \mathcal{J}_E^{\rm sc}\left(E, \Delta_\epsilon = \mu_\epsilon + \sqrt{2}\sigma_\epsilon t_i\right) e^{-t_i^2}, \tag{33a}$$

$$t_i = \frac{x_i + 1}{2}\,(t_1 - t_0) + t_0\,, \tag{33b}$$

其中x_i和w_i分别是第i个高斯－勒让德节点和第N阶勒让德多项式的权重。当N足够大时，性质 $\int_0^\infty \mathbb{E}\left[\mathcal{J}_E^{\rm sc}(E;\,\Delta_\epsilon)\right] \mathrm{d}E = 1$ 保持不变。为明确符号表示，我们将入射粒子 P 从表面原子 S 散射后的能量分布写作

$$\mathcal{J}^{\rm sc}_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}\,(E; E_{\rm in}, U, \mu_\epsilon, \sigma_\epsilon) = \mathbb{E}\left[\mathcal{J}_E^{\rm sc}\,(E; E_{\rm in}, U, \Delta_\epsilon)\right]. \tag{34}$$

4.8.4. 多组分表面

为了将 Forlano 等人（1996）的模型扩展到多组分表面，严谨的做法是修改 Forlano 等人（1996，式 1）中的能量传递函数K。然而，为保留原始解的解析可追溯性，我们决定通过直接对式 34 加权，来赋予每种原子种类对反射过程的贡献相应的权重，即

$$\mathcal{J}^{\rm sc}_{(\mathrm{P}\to\mathrm{all})} \equiv \sum_{\mathrm{S}} w_{\mathrm{S}} \cdot \mathcal{J}^{\rm sc}_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}\,, \tag{35}$$

其中 $w_{\mathrm{S}} \equiv r_{\mathrm{S}}\, S_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})n}(E_{\rm in})$，其中 S_n 与核阻止本领成正比（相差一个与物种无关的因子）。这种加权方式类似于 Eckstein 与 Preuss（2003）在模拟溅射产额的能量依赖性时采用的、依赖于物种的加权因子。S_n 定义为（Wilson 等，1977，式 9）

$$S_n^{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}\,(E) \propto \frac{M_{\mathrm{P}} Z_{\mathrm{P}} Z_{\mathrm{S}}}{(M_{\mathrm{P}} + M_{\mathrm{S}})\sqrt{Z_{\mathrm{P}}^{2/3} + Z_{\mathrm{S}}^{2/3}}}\, s_{\mathrm{r}}\left[\epsilon_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S})}\,(E)\right]. \tag{36}$$

按核阻止本领加权，体现了物种 S 对总核阻止本领的贡献比例，直接反映其使入射粒子 P 偏转的能力。

表 2 列出了以氢原子为入射粒子时，构成月壤的各化学元素的核阻止本领（忽略一个常数因子）。数值范围为 5.08 至 6.88。较轻的元素表现出较高的阻止本领，意味着它们使氢偏转的能力更强。因此，重于氧的物种——氧是原子组成中的主要成分——作用较小，这既是因为它们的丰度较低，也因为它们使氢偏转的能力较弱。因此，将表面描述为由单一等效组分构成是合理的

$$\mathcal{J}^{\rm sc}_{(\mathrm{P}\to\mathrm{all})} \approx \mathcal{J}^{\rm sc}_{(\mathrm{P}\to\mathrm{S_{eff}})}\,, \tag{37}$$

其中，$\mathrm{S_{eff}} = (M_{\rm eff}, Z_{\rm eff})$ 表示按原子丰度加权得到的月壤平均原子质量和原子序数。根据表 2，我们得到 $\mathrm{S_{eff}}$ = (21.88 原子质量单位, 10.81)。

4.8.5. 用模拟约束模型

我们模型中的两个主要未知参数是平均非弹性能量损失 μ_ϵ 和能量损失歧离 σ_ϵ。这两个量决定了非弹性能量损失 Δ_ϵ，也就是粒子穿过材料时损失的总能量。在材料中的路径越长，总能量损失就越大。我们通过将 Δ_ϵ 对粒子在材料中的路径长度的依赖关系表示为总散射角 Ψ 的函数，来近似描述这种依赖关系。我们将总散射角定义为入射粒子方向与发射方向之间的夹角（见图2）。它与入射角和发射角之间的关系为

$$\Psi = \pi - \arccos\left[\cos(\mathrm{SZA})\cos(\beta) + \sin(\mathrm{SZA})\sin(\beta)\cos(\phi)\right], \tag{38}$$

其中 Ψ、太阳天顶角、 ϕ和 β 均以弧度为单位。对于完全反转方向的粒子——沿入射路径背散射——散射角为 $\Psi = 180°$。掠入射和掠出射时的散射对应于 $\Psi \approx 0°$。较大的散射角意味着粒子在材料内的路径长度更长——反转运动方向的粒子很可能经历多次碰撞，从而导致更长的路径长度。

总非弹性能量损失还必须依赖于入射粒子的能量，并随入射能量的增加而增加。因此，我们旨在对 $\mu_\epsilon(E_{\mathrm{in}}, \Psi)$ 和$\sigma_\epsilon(E_{\mathrm{in}}, \Psi)$ 进行参数化。为此，我们将模型与代表月壤的粗糙表面上太阳风质子散射的 SDTrimSP-3D 模拟进行比较并加以约束（Szabo 等人（2023b））。这些模拟旨在再现从月球表面发射的高能中性氢原子微分通量的能量依赖关系，并与月船一号高能中性原子分析仪（CENA）仪器的观测结果吻合良好（Barabash等人，2009年）。我们首先利用 Szabo 等人（2023a，图4和图7）的模拟结果约束对总散射角的依赖关系。然后，我们利用 Szabo 等人（2023a，图5b）约束对入射粒子能量的依赖关系。

4.8.6. 非弹性损失与能量涨落的角度依赖性

我们利用 Szabo 等人（2023a，图 4 和图 7）的模拟来约束角度依赖性。这些模拟展示了质子从类风化层表面散射后，其能量分布随宏观出射角 β 的变化情况。模拟数据涵盖两个不同的太阳天顶角（SZA）： $0°$ 和 $60°$。

我们拟合模型中的参数（μ_ϵ，σ_ϵ），使其与所有可用太阳天顶角和 β 组合下的模拟能量分布相符，这些组合由总散射角 Ψ 概括。图 7 将拟合后的模型与模拟谱进行了比较。作为对照，我们展示了包含（式 34）和不包含（式 26）能量涨落的模型，以及 Forlano 等人（1996）的原始模型。

除总散射角小于约 $100°$ 的情况外，我们的模型都能很好地再现模拟谱。如图 7a 所示，在这一范围内，Forlano 等人（1996）的原始模型已高估了能量损失，而加入非弹性能量损失项后，拟合效果进一步变差。在 $\Psi < 100°$ 时拟合效果较差，一个可能的解释是，Forlano 等人（1996）的模型是针对垂直入射表面并向外散射的粒子建立的，因此将散射角限制为 $\Psi \in [90°, 180°]$。该模型并非为更小的散射角推导。

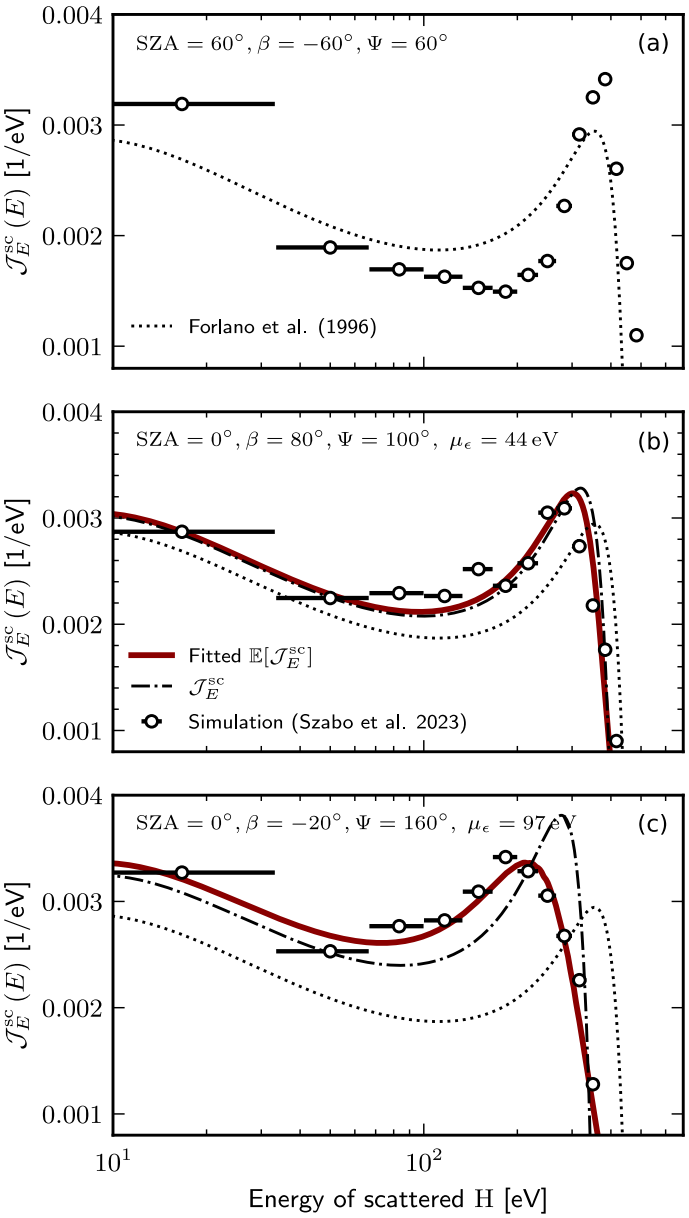

图7：我们的能量分布模型与300 km/s太阳风质子（470电子伏特）在三个不同散射角下从月壤散射的模拟数据的比较。图a)、b)和c)分别显示了三个不同总散射角 $\Phi = 60°$、$100°$ 和 $160°$的拟合模型。图(a)中Forlano等人（1996）的原始模型与模拟数据吻合尚可，但总体上高估了能量损失。能量涨落设定为 $\sigma_\epsilon = 0.7\mu_\epsilon$。对于图(b)和(c)：Forlano等人（1996）的原始模型（点线）给出了合理的平均拟合，但始终高估了高能散射群体的能量。包含恒定非弹性损失的修正模型（式26；点划线）改善了拟合，但在大散射角下低估了高能峰的宽度。计入能量损失歧离（式34，红色实线）后进一步改善了拟合。所有比较均采用表面结合能为$U = 5$电子伏特。

第二步，我们将图 7 中拟合模拟谱所得的参数 $(\mu_\epsilon, \sigma_\epsilon)$ 拟合为 Ψ 的函数。对于 μ_ϵ，我们得到图 8 所示的拟合结果。通过这项研究，我们发现

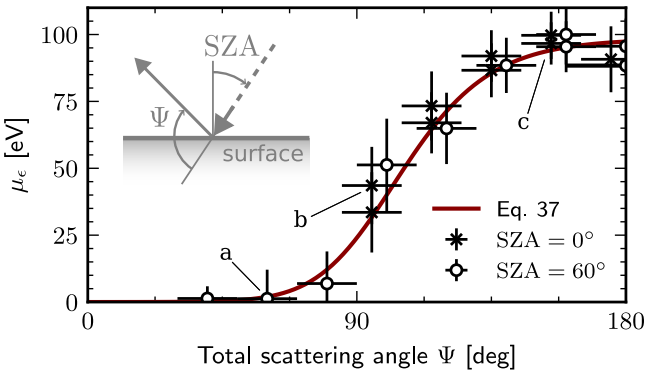

图 8：平均非弹性能量损失 μ_ϵ 与总散射角 Ψ 之间的关系。对不同太阳天顶角（十字：垂直入射；圆圈： 60° 入射）及多个发射角下的平均非弹性能量损失进行拟合。为便于观察，十字标记向左偏移了 -5° 。公式39以红色实线表示。图 7 三个面板中的拟合结果均已标注。

平均非弹性能量损失 μ_ϵ [电子伏特], 与散射角 Ψ [度],之间呈 S 形曲线关系，表示为：

$$\mu_\epsilon(\Psi, E_{\rm in} = 470\ {\rm eV}) \approx 94.6\left\{1 + \exp\left[-0.0588\,(\Psi - 90)\right]\right\}^{-2.03}. \tag{39}$$

我们发现，相对能量损失歧离取常数 $\sigma_\epsilon = 0.7\mu_\epsilon$ 时，能够很好地拟合模拟数据。

4.8.7. 非弹性能量损失与涨落的能量依赖性

非弹性能量损失取决于入射粒子的能量：随着入射粒子能量增加，粒子通过非弹性过程损失的能量更多（见公式 20），并且通常会在材料中行进更长距离。本节将模型的平均非弹性能量损失 μ_ϵ 和能量损失歧离 σ_ϵ 拟合到 Szabo 等人（2023b，图 4 和图 5）所给出的数据，这些数据对应于散射角 $\Psi > 160°$。随后利用这些数据约束公式39的振幅随入射粒子能量的变化。拟合模型及模拟得到的能谱见图 9，所得模型参数汇总于表 1。

该模型对模拟数据的拟合效果较好。高能峰得到了准确再现，而在对应于多重散射区的低能范围内则出现了偏差。一个可能的原因是，我们的模型仅对经过少量碰撞后发生散射的粒子计入非弹性损失（$s \gg 1$，见式 25）。因此，多重散射区的非弹性损失可能被低估了。

表 1：不同入射粒子能量下能量分布模型的参数化。拟合所得 μ_ϵ 的相对（1σ）误差约为 1%。

$E_{\rm in}$ [电子伏特]	μ_ϵ [电子伏特]	$\sigma_\epsilon/\mu_\epsilon$ [%]
470	94.6	65
1305	388	65

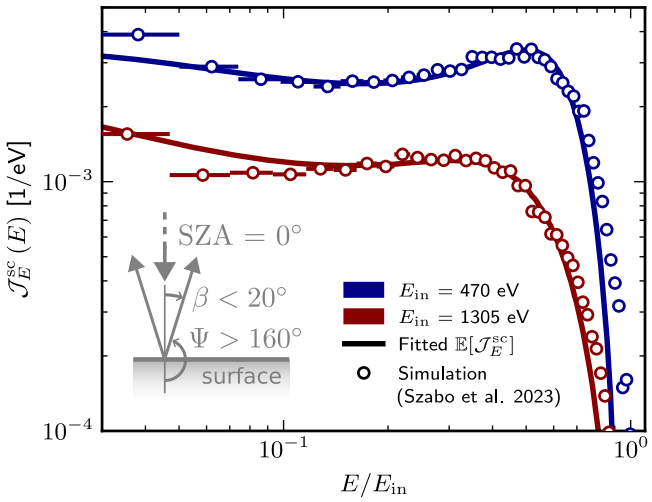

图 9：能量分布模型（式 34，实线）与太阳风质子在月壤上垂直入射散射的模拟能量分布（空心圆）的比较，质子入射速度分别为 300 km/s（蓝色）和 500 km/s（红色）（Szabo 等人（2023b），图 4 和图 5）。我们假定表面结合能为U = 5电子伏特。

基于表 1 的数据，我们将式 39 中的平均非弹性能量损失模型推广到任意入射能量，并按能量缩放振幅。由此得到以下关系：

$$\mu_\epsilon(\Psi, E_{\rm in}) = {\rm A}_{470}\left(\frac{E_{\rm in}}{470}\right)^{k_0} \cdot \left\{1 + \exp\left[k_1\,(\Psi - 90)\right]\right\}^{k_2}, \tag{40}$$

拟合参数为 A_{470} = 94.6 [电子伏特], k_0 = 1.44、k_1 = −0.0588 [1/度], 以及k_2 = −2.03。指数k_0 在本文中始终保持为固定常数。在低能下，非弹性损失通常与入射粒子速度成正比（第 4.7.3 节），对应于k_0 = 0.5。相比之下，我们的拟合给出了陡峭得多的依赖关系（$k_0 \approx 1.5$），这可以理解为较高能量入射粒子在材料内行进更长距离，从而导致更大的总非弹性损失。我们发现，65% 的恒定相对能量损失歧离能够很好地拟合模拟谱。我们写为

$$\sigma_\epsilon(\Psi, E_{\rm in}) = 0.7\mu_\epsilon(\Psi, E_{\rm in}). \tag{41}$$

Szabo 等人（2023b）的模拟显示，对于以典型太阳风能量散射月壤的质子，电子阻止是主要的能量损失机制；对于速度为 300 km/s 的质子，电子阻止约占总能量损失的 65%。我们得出了类似的结果：根据方程 40，对于$E_{\rm in}$ = 470电子伏特（例如），最大非弹性能量损失约为 90 电子伏特。在单次碰撞区（方程 25）中，最小能量损失为$p^2E_{\rm in} - \Delta_\epsilon$，其中$\Delta_\epsilon \approx$ 90电子伏特对应于$E_{\rm in}$ = 470 电子伏特时总能量损失的 71%。对于图 9 中形成高能峰的粒子，非弹性损失约占总能量损失的 50%。

我们可以用以下关系近似散射质子的最短路径长度：$L_{\rm eff} \approx \Delta_\epsilon / [n_{\rm eff} \cdot S_e(E_{\rm in})]$（见第 4.8.1 节）。假设平均电子阻止本领为 $S_e \approx 0.2$ 电子伏特 nm^2（根据式 20 得出，取平均月壤原子序数为 10.81，且 $E_{\rm in}$ = 470eV），

月壤数密度约为 $n = 28$ 原子/nm^3（假设真实密度为 3.035 g/cm^3，平均摩尔质量为 66 g/mol），非弹性损失总计为 90eV（对于近 180° 背散射质子），由此得到 $L_{\mathrm{eff}} \approx 16$nm。Tucker 等（2019）指出，太阳风会将质子注入月壤颗粒顶部 20–30 nm 范围内，这与我们估算的路径长度一致。估算的路径长度也与嫦娥五号返回的风化层样品中观察到的氢富集深度相当（Zhou et al. 2022）。

5. 对数据的应用

NILS数据报告了月球表面因入射太阳风离子而释放的负氢离子的微分数通量。观测到的通量记为 $\mathcal{J}_{\mathrm{H}}^{-}$，取决于入射通量的性质；在 NILS 任务期间，这些性质变化不大（Wieser 等，2025）。下文将简要评估这些变化的影响，并说明模型中采用的简化假设。

任务期间，太阳天顶角（SZA）在52° 至 47°之间变化；这种变化很小，我们预计不会显著改变 $\mathcal{J}_{\mathrm{H}}^{-}$。例如，Brötzner 等（2025a）表明，溅射产额基本不受入射角影响。散射和/或溅射的角分布取决于太阳天顶角（Schaufelberger 等，2011），但除估算 $f_{\perp}$ 和非弹性能量损失模型外，我们忽略了太阳天顶角带来的任何依赖性。

同样，太阳风速度v_{sw} 介于 290 km/s 和 310 km/s 之间。产额 η^{sc} 取决于太阳风质子的入射能量，并随能量增加而降低（Lue等人 2018a年，图6b），这可能是因为更深的穿透降低了粒子逃逸的概率。同样，溅射产额取决于沉积能量。不过，鉴于 NILS 任务期间所涵盖的速度范围有限，我们将 $\eta^{\mathrm{sc}}(E_{\mathrm{sw}})$ 和 $\eta^{\mathrm{sp}}(E_{\mathrm{sw}})$ 近似视为常数 η^{sc} 和 η^{sp}。

太阳方位角（SA，图2）从 43°E 变化至 28°E，总变化量为 15°。NILS 仪器提供的方位覆盖范围约为 15°（Canu-Blot 等，2025年，参见表 3 中的 $\Delta\alpha$），与这一变化范围相当。因此，所有量均按照平均方位发射角 $\phi = 213°$ 给出（详情参见附录 C）。

如第4.7.6节所述，α粒子在溅射氢和太阳风质子方面效率更高。尽管α粒子对溅射氢原子的能量分布没有显著影响，但忽略其贡献会低估溅射通量。因此，我们通过用校正因子k_{α}对沉降质子通量进行缩放来计入其存在，该因子在第4.7.6节中确定。

因此，从式 12 出发，我们用各量的平均值替代这些量，明确说明所有量对模型参数的依赖关系，并将 NILS 观测到的负离子通量描述如下

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{J}_{\mathrm{H}}^{-}\left(E,\beta,\overline{\phi}\right) = \\
&\quad \mathrm{P}^{-}\left(v_{\perp}; v_{\perp}^{50\%}, k\right) f_{\mathrm{sw}} \cos\left(\mathrm{SZA}\right) \cdot \\
&\quad \{ \\
&\qquad \mathcal{J}_{E}^{\mathrm{sp}}\left(E; E_{\mathrm{in}}, U, \gamma_{\mathrm{extra}}\right) \left[(1+k_{\alpha})\, \overline{\eta^{\mathrm{sp}}}\, \mathcal{J}_{\Omega}^{\mathrm{sp}}\left(\beta,\overline{\phi}\right)\right] \\
&\quad + \\
&\qquad \mathcal{J}_{E}^{\mathrm{sc}}\left(E; E_{\mathrm{in}}, U, \mu_{\epsilon}, \sigma_{\epsilon}\right) \left[\overline{\eta^{\mathrm{sc}}}\, \mathcal{J}_{\Omega}^{\mathrm{sc}}\left(\beta,\overline{\phi}\right)\right] \\
&\quad \},
\end{aligned}
\tag{42}
$$

其中 $E_{\mathrm{in}} = E_{\mathrm{sw}}$；$v_{\perp} = \cos\beta' \sqrt{2E/m_{\mathrm{H}}}$，其中 m_{H} 为质子质量，β' 为微观极向发射角；$\mu_{\epsilon} = \mu_{\epsilon}(\Psi, E_{\mathrm{in}}; A_{470}, k_1, k_2)$；$\sigma_{\epsilon} = 0.7\mu_{\epsilon}$；$\Psi = \Psi$(太阳天顶角，$\beta$，$\phi$)；以及$k_{\alpha} = 0.11$。

5.1. 需要的额外先验知识

式42中的模型依赖于表面结合能U以及散射/溅射角分布，这三项量无法由有限的NILS数据很好地约束。此外，该模型接近不可辨识（Raue 等，2009），因为散射/溅射产额和负离子化概率都会影响微分通量的幅度。当两种或更多参数化形式在观测上完全相同时，称模型为不可辨识。我们通过统计地加入先验信息来缓解不可识别性问题及知识缺失，如下文各节所述。

我们使用先验预测检验（Gelman，2014）评估了所有先验：从联合先验 $\mathbb{P}\left(\mathcal{J}_{\mathrm{H}}^{-}\right)$ 中抽样，将这些样本通过模型进行传播，并检查所得的先验预测通量分布。这确保了先验能够产生物理上合理的通量。

5.1.1. 表面结合能

表面结合能（在模型中记为U）取决于风化层的基体成分和吸附物种（风化层的羟基化可能会影响表面结合能）。我们使用截断正态分布（截断正态分布）作为先验分布，对溅射模型和散射模型所共享的表面结合能施加软约束：

$$
U \sim \mathtt{TruncNorm}\left(\mu = 5,\ \sigma = 0.5,\ \mathrm{lower} = 1\right), \tag{43}
$$

其中所有参数的单位均为电子伏特。对于$U \leq 1$，概率设为0。平均值5电子伏特（Kudriavtsev 等，2005）已在早期模型（Wieser 等，2024）中成功使用。

5.1.2. 高能中性氢反照率

如第 5.1 节所述，方程 42 中的模型存在可识别性问题，因为散射和溅射产额以及负离子化的概率都会影响微分通量的幅度。NILS数据有限的能量和角度覆盖范围进一步增加了区分各个贡献的难度。

为解决这一可识别性问题，我们加入了全球月球高能中性氢反照率 η^{ENA} 为 0.16 ± 0.05 这一已知信息，该数值源自 Vorburger 等人（2013）。Vorburger 等人（2013）的研究将高能中性氢原子定义为能量高于 11电子伏特、从月球表面逸出的氢原子。根据以下假设，我们使用模型定义这一反照率：

(1) Vorburger 等人（2013）报告的反照率值是根据对两种角分布的完整观测得出的：$\mathcal{J}^{\mathrm{sc}}\,\Omega$ 和 $\mathcal{J}^{\mathrm{sp}}\,\Omega$。(2) 假设中和概率 P^0 与发射能量和发射方向均无关。显然，事实并非如此，因为 $\mathrm{P}^0 \approx 1 - \mathrm{P}^-$ 和 P^- 取决于 $v_{\perp}$。不过，这种近似是合理的，因为 Wieser 等人（2024）成功预测了.....的能量分布

e

月球表面发射的中性氢原子的微分通量，采用 Kenmotsu 等人（2004）的物理模型计算，且未考虑任何电离概率。该模型与本研究采用的 Ono等人（2005）模型密切相关。

(3) 与中和概率相比，正电离的概率很低。Lue等人（2018a年，图6.a）报告称，以与本研究相似的速度逸出的氢，其电荷比 H^+/H^0 约为 5%。该比值根据轨道观测得出；观测高度处可假设所有负氢离子均已转化为中性粒子。因此，我们写作 $P^+ \ll P^0 + P^-$ 和 $P^0 \approx 1 - P^-$。

基于上述假设，由公式（12）可得

$$\eta^{\mathrm{ENA}} \equiv \mathrm{P}^0 \int_{11\ [\mathrm{eV}]}^{\infty} \left[\eta^{\mathrm{sc}} \mathcal{J}_E^{\mathrm{sc}} + (1 + k_\alpha)\ \eta^{\mathrm{sp}} \mathcal{J}_E^{\mathrm{sp}} \right] \mathrm{d}E\ , \tag{44}$$

其中 $P^0 = 1 - P^-$，P^- 简化为常数，其值等于 $P^-(v_\perp)$ 在 $v_\perp$ 从 10^4 米/秒到 10^5 米/秒范围内的平均值。我们加入了常数 $k_\alpha = 0.11$，以计入 α粒子诱导溅射，与公式42中的处理相同。

实际上，Vorburger 等人（2013）无法可靠地观测到能量低于 11 电子伏特的中性氢原子。利用公式 44，我们估计 Vorburger 等人（2013）观测到的总散射和溅射高能中性氢的比例分别为 97% 和 59%。将能量截止值提高到 20电子伏特会使观测到的溅射比例降至 40%；不过，为了能够比较结果，我们仍保留 11 电子伏特的截止值。在所考虑的太阳风速度范围（300–500 km/s）内，估计值仅变化 3%，这一最小变化我们予以忽略。表面结合能的影响最大，但其变化仍在 ±10%以内，因此我们同样将其忽略。这得到如下产额的先验参数化

$$\eta^{\mathrm{ENA}}/\mathrm{P}^0 \approx \eta^{\mathrm{sc}} + 0.6\,(1 + k_\alpha)\ \eta^{\mathrm{sp}}\ , \tag{45a}$$

$$\eta^{\mathrm{sc}} \approx r\ \eta^{\mathrm{ENA}}/\mathrm{P}^0\ , \tag{45b}$$

$$\eta^{\mathrm{sp}} \approx (1 - r)\ \frac{\eta^{\mathrm{ENA}}/\mathrm{P}^0}{0.6\,(1 + k_\alpha)}\ , \tag{45c}$$

$$r \sim \mathtt{Uniform}(0, 1)\ , \tag{45d}$$

$$\eta_{\mathrm{ENA}} \sim \mathtt{TruncNorm}(\mu = 0.16, \sigma = 0.05, \mathrm{lower} = 0)\ , \tag{45e}$$

其中，均匀分布是在给定的两个边界之间的均匀分布。

5.1.3. 角度先验分布

式 42 模型中的所有量都已知或受到先验信息的统计约束，只有角向发射轮廓 $\mathcal{J}^{\mathrm{sc}}{}_\Omega\ (\beta, \phi)$ 和 $\mathcal{J}^{\mathrm{sp}}{}_\Omega\ (\beta, \phi)$ 例外。

NILS 仪器使用静电可转向角像素观测月球表面。月球表面的角覆盖范围分为八个区间，覆盖的发射极角范围从 $\beta_{\max} = 90°$（从仪器视角看向地平线）到 $\beta_{\min} = 45°$（从仪器视角向下看）。这种角度扫描可从 NILS数据 中提取有关发射剖面的信息。下文将对散射／溅射发射剖面的先验信息进行统计编码。

散射 Szabo 等人（2023b，图 1）的模拟结果提供了月球表面散射粒子角分布的先验知识。他们模拟的剖面对应的太阳天顶角范围为 60° 至 75°，接近 NILS 任务期间的平均太阳天顶角 50° 。我们将这一先验分布参数化为

$$\mathcal{J}_\Omega^{\mathrm{sc,\ prior}}(\beta) = \frac{f(\beta)}{2\pi}\ , \tag{46a}$$

$$\text{with } f(\beta) = -0.22 + 1.26\cos\beta - 0.02\sin\beta - 0.29\cos(2\beta) - 0.09\sin(2\beta)\ , \tag{46b}$$

其中 β 的定义与 Szabo 等人（2023b）相同，即范围从 $-\pi/2$ 到 $\pi/2$；$\beta > 0$ 对应前向散射，$\beta < 0$ 对应后向散射（朝向太阳）。该轮廓经过倾斜调整，使约 40% 的发射粒子发生前向散射。NILS 仪器观测到了发射剖面中概率较低的前向散射分量，并在总散射产额的计算中对此进行了考虑。

溅射 Cassidy 和 Johnson（2005年）模拟了多孔风化层中原子的溅射，结果表明，溅射粒子的角向发射与光滑表面的情况差异很小。两种情况下，发射都遵循余弦定律分布。另有 Jäggi 等人（2024年）指出，当太阳风质子以斜入射方式撞击类风化层表面时，重元素（例如氧）的溅射优先沿前向发射，也就是沿太阳风流动方向发射。不过，我们预计氢反冲粒子的产生近乎各向同性，因为入射粒子与靶粒子的质量相同。因此，我们先验地采用以下角分布：

$$\mathcal{J}_\Omega^{\mathrm{sp,\ prior}}(\beta) = \frac{\cos\beta}{\pi}\ . \tag{47}$$

5.2. 月球近表面环境

来自月壤的粒子发射受环境参数调制，例如着陆点的风化层成分、局部地形、着陆器造成的表面扰动、太阳风等离子体条件以及附近的磁异常。在下一节中，我们讨论这些因素各自如何影响NILS数据的分析。

5.2.1. 太阳风参数的影响

我们将太阳风质子能量建模为高斯分布，其均值等于整体能量。太阳风质子的温度会影响入射能量分布，从而在一阶近似下导致散射/溅射能量分布展宽。

按照Szabo 等人（2023年b，式3），标准差可近似为 $\sigma_{\mathrm{sw}} \approx \sqrt{2 E_{\mathrm{sw}} k_B T_{\mathrm{sw}}}$，其中当 $v_{\mathrm{sw}} = 300$ km/s时，$k_B T_{\mathrm{sw}} \approx 1.5$电子伏特，如Szabo 等人（2023年b，式4）所述。

我们发现，当太阳风速度介于 300 km/s 和 500 km/s 之间时，温度对散射／溅射粒子能量分布的影响很小。此类影响

因此被忽略，之后我们将太阳风质子视为单能粒子。此外，我们假设太阳风均匀分布，即所有质子均以恒定的太阳天顶角入射表面，该角度近似取为太阳方向，并忽略任何偏转。值得注意的是，NILS 记录数据期间，月球处于未受扰动的太阳风中，位于地球弓形激波之外。我们还忽略月球磁异常造成的任何加热，以及太阳风在入射表面之前可能发生的流向偏转。

5.2.2. 磁异常的影响

嫦娥六号着陆点位于南极-艾特肯盆地附近一个大型月壳磁异常簇的西侧。月壳磁场与太阳风的直接相互作用会使入射的太阳风质子偏转并反射（Futaana 2003；Lue等人 2011），从而减少磁异常区域内的质子沉降，并增强周边区域的质子沉降（Wieser 等人（2010）；Vorburger 等人（2013）；Fatemi 等，2015；Maynadié 等，2025）。南极-艾特肯盆地附近的磁异常簇是月球上规模最大的磁异常簇，也是最强的磁异常簇之一。该磁异常簇中高密度的反射质子会引发宏观等离子体扰动（Halekas et al. 2014；Fatemi et al. 2014；Halekas et al. 2017），扰动该磁异常簇周围数千千米范围内的质子沉降（Maynadié 等，2025）。因此，嫦娥六号着陆点处沉降的太阳风质子能量和通量可能与上游条件存在显著差异。

为研究这些效应，我们对 NILS 观测到的撞击月球表面的太阳风质子的能量和通量进行建模，如下所示

$$f_{\rm sw} = \nu_f \, f_{\rm sw}^{\rm up} \,, \tag{48a}$$

$$E_{\rm sw} = \nu_E \, E_{\rm sw}^{\rm up} \,, \tag{48b}$$

其中，$(f_{\rm sw}, E_{\rm sw})$ 的定义与公式 42 相同，而 $(f_{\rm upsw}, E_{\rm sw}^{\rm up})$ 分别是未受扰动的 上游太阳风通量和能量。上游太阳风参数来自 ARTEMIS-P2 航天器搭载的静电分析器测量数据（McFadden 等，2008年；Angelopoulos，2011年）。ARTEMIS-P2 在月球周围的椭圆轨道上运行，距 NILS 10^3–10^4km。下一段将估算随时间变化的乘法因子（ν_f, ν_E），以量化磁异常对上游太阳风通量和能量的影响。

简化模型 散射能量分布的高能部分主要由仅与表面原子发生少数几次碰撞的太阳风质子构成。这些反射粒子为太阳风质子通量和撞击表面的能量提供了最直接的表面来源代理量。

我们构建了一个用于描述高能（>100 电子伏特）负氢微分通量的简化模型，该通量由表面 $\mathcal{J}_{\rm H}^-$ 发射。我们忽略溅射的贡献（如图 1 所示，在这些能量下其贡献极小），并假设电离概率 P^- 与发射能量和角度无关。简化模型表示为

$$\mathcal{J}_{\rm H}^-(E) \propto \nu_f f_{\rm upsw} \cos(\text{太阳天顶角}) \cdot \mathcal{J}_E^{\rm sc}\left[E; E_{\rm in} = \nu_{\rm E} E_{\rm sw}^{\rm up}, U, \mu_\epsilon, \sigma_\epsilon\right] \cdot \mathcal{J}_\Omega^{\rm sc,prior} \,, \tag{49}$$

其中，比例关系体现了散射产额$\eta^{\rm sc}$ 和电离概率 P^-的影响；这两者不会影响对因子 ν_f 变化的推断，为简便起见可将其约去。为简便起见，我们采用式 46 定义的先验分布来模拟散射氢原子的角分布。非弹性能量损失 μ_ϵ 简化为根据数据推断出的常数，其能量涨落为 $\sigma_\epsilon = 0.7\,\mu_\epsilon$（式 41）。表面结合能设为$U = 5$ 电子伏特（Kudriavtsev 等，2005）。因子 ν_f 受弱信息先验（表 F.1）约束，该先验纳入了这样一项认知：磁异常不太可能使上游太阳风通量增加一倍以上（Maynadié 等，2025；Fatemi 等，2015）。

虽然式 49 对 ν_f的相对时间变化施加了约束，但其绝对值仍未受约束，因为模型仅定义到一个比例常数。可是，Maynadié 等（2025，图 3）指出，尽管磁异常会显著影响 NILS 所在位置的质子沉降，这种影响具有很强的变异性且随时间变化，而平均沉降质子通量仍与未受磁异常影响区域的相当。因此，我们假设，在整个 NILS 任务期间（约一个地球日）计算的 ν_f 平均值，可合理估计未受扰动的太阳风条件，即$\nu_f \approx 1$。

根据数据进行推断 图 10 展示了来自月表的观测负氢离子能量微分通量，记为 $E\,\mathcal{J}_{\rm H}^-$，并以太阳风上游通量 $f_{\rm upsw}$ 归一化。如果太阳风未受月球环境影响，那么除计数统计导致的变化外，观测通量不应出现变化。然而，实际观测并非如此：有些时段（例如 02T19:44）的通量较低，而另一些时段（例如 03T03:03）的通量较高。这些变化与通过简化模型推断出的因子 ν_f 相符。

图 10 还展示了能量微分通量的能量分布。该分布显示能量随时间发生偏移，例如 03T03:31 时平均能量较低，而 03T02:48 时平均能量较高。尽管如此，能量分布相当稳定，且受太阳风上游质子能量的限制，如图 10 下图中的红线所示。由于因子 ν_E 与 ν_f 存在不可识别性，因此无法对其进行推断。为简单起见，以下固定 $\nu_E = 1$。观测到的能量偏移幅度有限，因此这一近似是合理的。因子 ν_E 可能小于 1，也就是说，太阳风质子受到磁异常的影响而系统性减速。此前的研究已报告过这一现象（Saito 等，2012；Futaana 等，2013；Fatemi 等，2015）。

我们通过目视检查，分析了尺度因子 ν_f 与以下上游条件之间的相关性：太阳风质子密度和速度；行星际磁场的强度和方向。我们没有观察到任何明显的相关性，这支持了太阳风以湍流方式传播至表面的观点。

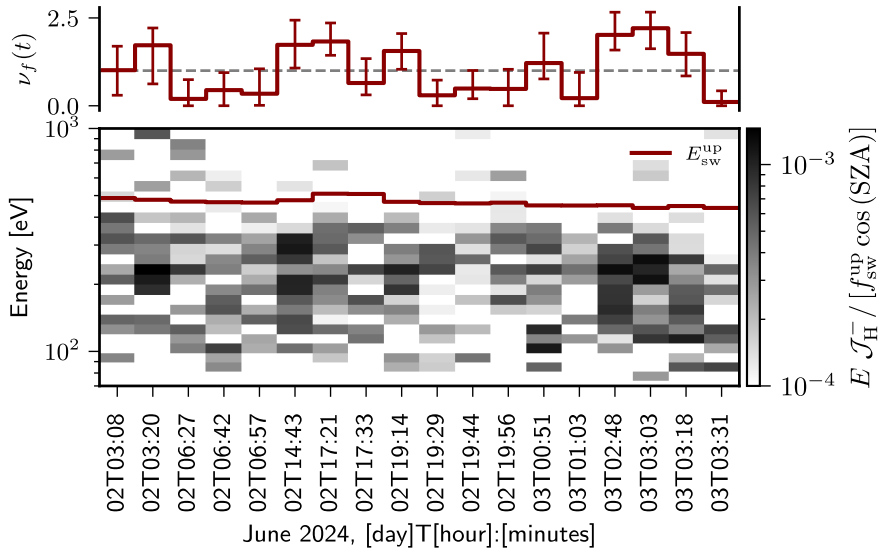

图 10. 表面负氢离子能量微分通量的能量-时间谱图，以 1/(sr) 为单位，并按上游太阳风通量归一化。通量已按角度取平均。时间并不连续，每个时间箱均标注其平均日期（协调世界时）。下图：红色实线表示上游能量。上图：太阳风通量增强/减弱因子的时间变化，其中红色水平线表示最佳估计值（最大后验，MAP），垂直误差条表示不确定性（68% 最高密度区间，HDI）（见第 6.2.1 节）。观测到的归一化通量增加与模型吻合良好，对应于因子 νf 的增加。

5.2.3. 月壤组成

嫦娥六号着陆位置的月壤体积密度为 0.983 g/cm^3 （Lietal. 2024年），低于大多数阿波罗、月球号和嫦娥五号样品的体积密度；后者通常为 1.1 至 2.1 g/cm^3。这表明嫦娥六号月壤比此前探访地点的月壤更加多孔。单个颗粒的平均密度与嫦娥五号任务的样品相近，为 3.035 g/cm^3。

根据嫦娥六号样品 CE6C0000YJFM00102 和 CE6C0000YJFM00103 的化学组成（Li 等人，2024，表 2），我们推导出嫦娥六号着陆点月壤的平均元素组成。我们对两个样品的氧化物质量百分比取平均，并假设化学计量比理想且所有元素均以所列氧化物的形式存在，据此计算出相对原子浓度。除整体组成外，Lin 等人（2025）还测量了嫦娥六号月壤颗粒最外层表面中的氢含量。这一区域对我们的研究尤为重要，因为太阳风主要与月壤颗粒顶部数十纳米的区域相互作用。测量结果显示，在上部 200 纳米范围内，土壤颗粒富集了源自太阳风的氢，其浓度最高可达 0.19 质量百分比（按质量计相当于 1.7 质量百分比的 H_2O），且越靠近表面浓度越高。我们将这部分额外的太阳风注入氢含量纳入月壤成分模型，最终得到表 2 的前三列。根据嫦娥六号样品推导出的元素组成与 Wieser 等人（2025，表 2）报告的结果高度吻合。

5.2.4. 月球地形

嫦娥六号着陆点周围的地形是根据空间分辨率为 1 cm 的着陆相机（LCAM）图像重建的（Liu 等，2025）。着陆器降落在一个宽 20 m 的撞击坑坑缘上。利用由此得到的高程模型（图 11.a），我们计算了 NILS 仪器观测到的宏观发射角 β；该仪器安装在距表面约 1.35 m 处。图 11.b 显示了在 Canu-Blot 等（2025，图 8）所定义的着陆器坐标系中，发射角 β 的分布。图中所示角度为 25 cm^{2}区域的平均值。尽管局部地形布满撞击坑，测构造的极向发射角与平坦表面的极向发射角仅略有差异。在 NILS 的视场内，相对于平坦表面的偏差均在 ±5° 以内，这表明平坦表面近似适用于我们的分析。

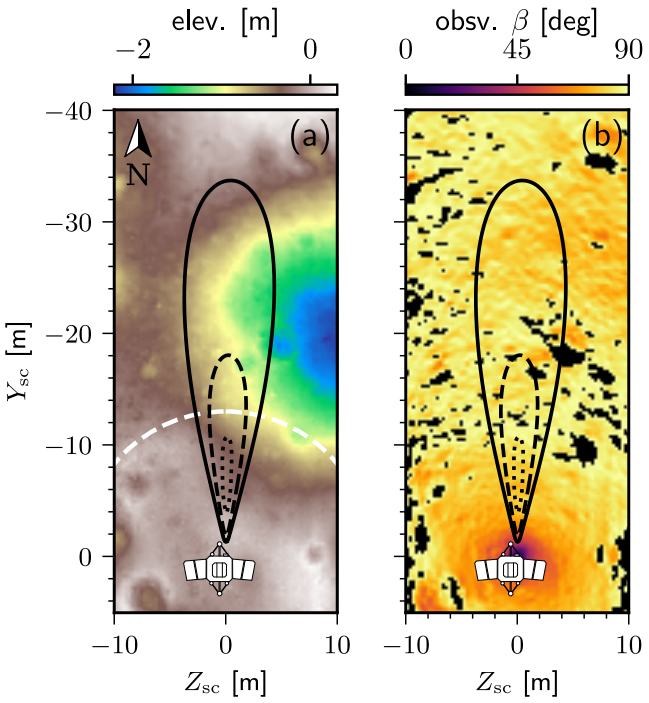

图 11：嫦娥六号着陆点附近的月球地形及观测到的宏观极向发射角（Liu 等，2025）。图 a：相对于着陆器的仰角。白色虚线表示着陆器反推火箭的估计喷流半径。图 b：观测到的发射角 β。因局部表面地形遮挡、NILS 无法观测到的区域以黑色显示。在两个面板中，黑色等高线表示投影到表面上的仪器灵敏度等级：20%（实线）、50%（虚线）和 90%（点线）。北方朝上。

表 2：嫦娥六号着陆位置风化层的元素组成，按原子质量排序。模型参数针对 H 与各物种 S 的相互作用给出。

元素 S	a (M,Z)	丰度 r_S [%]	$10^2 \times C^{(H\to S)}$ [电子伏特 nm²]	$10^3 \times$ 钾$^{(H\to S)}$ [电子伏特$^{1/2}$ nm²]	$\gamma_{(H\to S)}$	m (470 / 1300 电子伏特)	$\propto S_n^{(H\to S)}$ (470 / 1300 电子伏特)
H	(1, 1)	4.1	4.136	4.299	1	0.76 / 0.80	5.85 / 3.21
O	(16, 8)	58	5.232	8.701	0.22	0.59 / 0.69	6.88 / 5.20
Na	(23, 11)	0.18	5.502	9.225	0.16	0.55 / 0.65	6.48 / 5.29
Mg	(24, 12)	3.8	5.735	9.358	0.15	0.54 / 0.64	6.70 / 5.58
Al	(27, 13)	6.2	5.728	9.476	0.14	0.53 / 0.63	6.38 / 5.42
Si	(28, 14)	17	5.931	9.582	0.13	0.53 / 0.62	6.54 / 5.65
P	(31, 15)	0.022	5.922	9.678	0.12	0.52 / 0.61	6.25 / 5.48
K	(39, 19)	0.03	6.245	9.984	0.098	0.50 / 0.58	5.94 / 5.50
Ca	(40, 20)	4.7	6.395	10.05	0.095	0.49 / 0.58	6.00 / 5.62
Ti	(48, 22)	0.74	6.243	10.16	0.08	0.48 / 0.57	5.35 / 5.12
Mn	(55, 25)	0.068	6.381	10.3	0.07	0.47 / 0.55	5.08 / 4.99
Fe	(56, 26)	5.3	6.5	10.34	0.069	0.47 / 0.55	5.12 / 5.07
加权平均值	(21.88, 10.81)	100	5.484	8.902	0.21	0.57 / 0.66	不相关

注释。氢与各元素 S 相互作用时的物理量，以及最后一行中以原子丰度为权重计算的相同物理量平均值。为便于阅读，弹性截面常数C（公式 19）和非弹性能量损失常数K（公式 20）分别乘以 100 和 1000。系数m（公式 29）和总核阻止本领（相差一个常数因子，公式 36）均给出了氢以 470 和 1300 电子伏特能量与各元素相互作用时的数值。γ是氢入射粒子与表面原子发生弹性碰撞时的最大能量转移因子（公式 15）。$^{(a)}$ M

: 质量 in 原子ic 质量 un it, Z: 原子ic 数量ber.

5.2.5. 着陆器造成的月壤扰动

着陆器发动机的尾焰会对着陆点上层月壤层造成机械扰动。对于嫦娥五号，Zhang 等人（2022）报告的侵蚀深度约为 0.2 cm，对应的总侵蚀质量约为 336 kg，扰动范围从着陆位置向外延伸至 13 m。NILS 采样区域中有很大一部分位于这一半径范围内（图 11a）。预计受扰动的月壤会呈现不同的粒径分布和太阳风暴露年龄（Bibring 等人，1975）。因此，着陆器上的仪器观测的是一种表面，其性质可能与轨道测量所推断的不同；轨道测量会对面积更大且可能保持原始状态的区域进行平均。然而，这些差异对所发射负离子通量的影响仍然未知。

6. 基于 NILS 测量的推断

6.1. 后验分布的抽样

在本节中，我们将式 42 中的模型应用于 NILS 仪器的数据，以推断以下参数：$\eta^{sc}, \eta^{sp}, A_{470}, k_1, k_2, S, v_\perp^{50\%}, k, U, \gamma_{extra}, \mathcal{J}^{sc}{}_{\Omega}\overline{(\beta,\phi)}$, and $\mathcal{J}^{sp}{}_{\Omega}\overline{(\beta,\phi)}$。

为此，我们首先利用相关物理过程的先验知识约束模型（见第 5.1 节和表 F.1），然后通过贝叶斯推断，使用 NILS 测量信息更新这些先验（Estler，1999年；Gelman，2014）。模型得到的微分通量 $\mathcal{J}_H^-$ 根据式 C.5 中描述的仪器响应转换为预期计数率。随后使用贝叶斯定理（式 D.3）更新先验知识 $\mathbb{P}\left(\mathcal{J}_H^-\right)$，其中似然函数描述了仪器观测到的（按质量区分的）负氢离子计数率。由观测计数率C，我们由此得到后验分布 $\mathbb{P}\left(\mathcal{J}_H^- \mid C\right)$，表示我们对负氢微分通量的更新认知离子——以及所有推断参数——在给定 NILS 数据和先验知识后的分布。

描述贝叶斯推断时，我们遵循 Kruschke（2021）提出的指导原则。所有后验分布均通过马尔可夫链蒙特卡罗抽样获得（Abril-Pla 等，2023；Phan 等，2019；Bingham 等，2019；Hoffman & Gelman，2011）。在式 42 中，通量 $\mathcal{J}_H^-$ 通过我们的模型由若干参数（表 3）描述，这些参数汇总在向量 $\boldsymbol{\theta} = \left[\eta^{sp}, \eta^{sc}, A_{470}, \ldots\right]$ 中。使用 PyMC Python 软件包（Abril-Pla 等，2023）从后验分布 $\mathbb{P}(\boldsymbol{\theta} \mid C)$中抽取了一组 $S = 8\,000$ 个样本，$\{\boldsymbol{\theta}^{(s)}\}^S{}_{s=1}$。运行了四条相互独立的链，每条链迭代 3 000 次，并将最初的 1 000 次迭代作为预热期予以舍弃。我们使用 R-hat 统计量（Gelman & Rubin，1992）并通过目视检查轨迹来评估收敛情况。我们将观测数据与由后验预测分布生成的复制数据进行比较，以验证模型和后验分布。

后验分布的样本如图 A.1 所示，其中可以看到参数之间的交叉相关性。

6.2. 后验分布总结

6.2.1. 边缘后验分布

表 3 汇总了根据样本 $\boldsymbol{\theta}^{(s)}$ 估计的模型参数边缘后验分布。边缘量是通过对除所研究参数以外的所有模型参数进行积分而获得的。这些边缘分布也以红色直方图的形式显示在图 A.1 的对角面板中。参数的最大后验（MAP）值——即在给定数据和先验假设的情况下概率最高的值——估计为$\theta_{MAP} = \arg\max_\theta \mathbb{P}(\theta \mid C)$。

表 3：所有模型参数的边缘后验分布汇总。

参数	Unit	中位数	MAP	68% 最高密度区间	
				low	high
$\overline{\eta^{\rm sc}}$		0.215	0.222	0.161	0.271
$\overline{\eta^{\rm sp}}$		0.106	0.0813	0.0378	0.156
$\eta_{\rm ENA}$		0.240	0.243	0.197	0.278
$\overline{\eta^{\rm sc}}/\overline{\eta^{\rm sp}}$		2.02	1.46	0.369	3.00
A_{470}	eV	147	147	131	163
k_1	1/度	0.0401	0.0382	0.0306	0.0471
k_2		0.770	0.742	0.634	0.894
S		0.862	0.904	0.803	0.975
$\left[v_\perp^{50\%} \times 10^{-6}\right]^a$	m/s	12.0	9.41	5.35	16.7
k		0.103	0.0998	0.0830	0.119
U	eV	5.44	5.45	4.57	6.49
$\gamma_{\rm extra}$		0.0613	0.0228	≈ 0	0.0973

注。 (a) 为简洁起见，所有$v_\perp^{50\%}$的数值均已按 10^{-6} 缩放。将表列数值乘以 10^6 即可还原原始数值。

不确定性使用 68% 最高密度区间（HDI）进行量化，该区间定义为满足以下条件的最短区间 $[a,b]$

$$\int_a^b \mathbb{P}(\theta \mid \boldsymbol{C})\,\mathrm{d}\theta = 0.68\ .$$

最高密度区间根据边缘后验样本计算得出，可提供稳健的不确定性摘要，尤其适用于偏态分布。

6.2.2. 联合后验分布

图 A.1 展示了参数$\boldsymbol{\theta}$之间的成对相关性，是后验分布最完整的表示。下文将讨论最相关的相关性。

图 A.1.a 显示散射产额与溅射产额之间存在负相关。这是预期之中的，因为散射粒子和溅射粒子的能量分布在低能区间重叠，而且两种产额都通过缩放参数r（式 45）相互耦合。

图 A.1.b–c 显示各个产额与 ENA反照率 $\eta_{\rm ENA}$ 之间存在正相关，这与反照率定义为两种产额之和这一事实一致。

图 A.1.at 显示 $\gamma_{\rm extra}$ 与散射产额之间存在弱正相关。这是预期之中的，因为 $\gamma_{\rm extra}$ 控制着溅射能量分布的高能截止：要再现观测到的高能通量，较低的截止值需要更高的散射产额。出于类似原因，图 A.1.ay 显示 $\gamma_{\rm extra}$ 与k_2，之间存在负相关，后者控制高能散射峰的宽度。

其他所有面板都表现良好，没有显示出明显的相关性，这表明模型参数是可辨识的。

7. 数据解读与讨论

图 1 显示了 NILS 测得的不同观测几何下负氢离子微分数通量的能谱（竖线），以及通量的后验分布（曲线）。微分通量（竖线）仅根据测量结果和对仪器响应的了解推导得出，不依赖任何物理模型。两者吻合良好。高能粒子主要是散射粒子，低能粒子则既有溅射粒子，也有散射粒子。随着出射极角增大，散射粒子的主导程度逐渐降低。

我们注意到，散射能量分布的高能截止似乎被高估了，这可能表明假设 $\nu_E = 1$ （第5.2.2节）并不具有代表性。更好地约束 ν_E 很可能会改善吻合程度。

7.1. 一种高效的电离材料

数据表明，月壤是一种对负离子而言高效的电离材料，负离子化概率很大，达$\mathrm{P}^- > 10\%$（图 12）。所推断的概率对垂直速度$v_\perp$ 的依赖弱于我们的先验知识所提示的程度。

我们检验了该结果对S、$v_\perp^{50\%}$以及k的先验的敏感性，并发现结论是稳健的：负离子化概率仍然很高，且仅弱依赖于$v_\perp$。其中，关于k 的先验对推断的影响最强，但并未显著改变我们的结论。

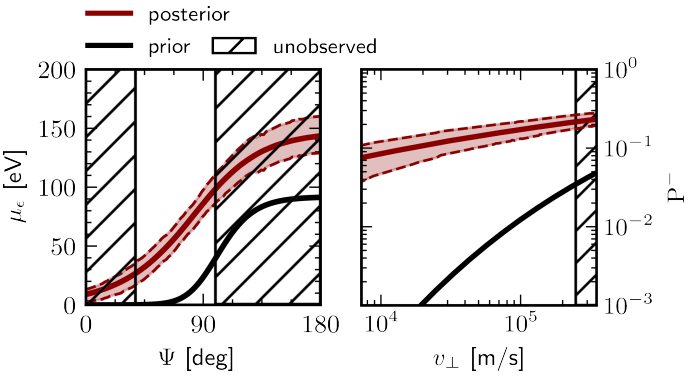

图 12：非弹性平均能量损失 μ_ϵ 与负电离概率 P^-的先验，以及根据 NILS 数据得到的后验分布之间的比较。

尽管月壤似乎是负离子的高效来源，但尚未有关于源自月球表面的负离子的轨道观测报告。这可能是由于负电荷态的寿命较短。Wieser 等（2025）表明，负氢离子的密度随高度呈指数下降，标高约为 10 千米。

7.2. 月壤颗粒内的较长距离输运

如图 12 所示，平均非弹性能量损失 μ_ϵ 大于 Szabo 等人（2023b）的预测。振幅A_{470} 从 94.6 电子伏特（表 1 中给出的先验值）增至 147 电子伏特（表 3 中给出的后验值）。我们对这一增幅提出两种解释。

(i) 因子 ν_E 很可能小于 1——也就是说，太阳风质子受到磁异常的减速——这将使 μ_ϵ 的先验与后验分布更加吻合。事实上， ν_E 与 μ_ϵ 相关：允许数据约束 ν_E 后，得到 $\nu_E \approx 0.85$ 和 $A_{470} \approx 110$,电子伏特。此外，

v_E 可能随时间变化；若未将这一点纳入考虑，为补偿入射质子能量分布范围的扩大，平均非弹性能量损失可能会被高估。

(ii) Szabo 等人（2023b）的模拟低估了非弹性损失。这很可能反映了模拟粒子在月壤颗粒中的总路径长度被低估，而非非弹性能量损失被低估，因为氢与月壤原子组成成分相互作用时的非弹性能量损失已得到充分了解。

我们认为这两种因素都在起作用。

7.3. 更新的溅射与散射产额

我们的模型将产额定义为每个入射太阳风质子所对应的逸出氢原子数。电荷态由电离概率决定。无论逸出氢的电荷态如何，我们发现散射产额为 22%，溅射产额为 8.1%，散射氢与溅射氢之比为 $1.5^{+1.5}_{-1\,1}$。。这表明，质子更有可能从月壤中散射出来，而非溅射出表面氢原子。

值得注意的是，公式 44中定义的ENA反照率从16%升至24%，与此前大多数观测结果相比，这是一个相对较高的数值（Vorburger 等人（2013））。Futaana等人（2012年，图2）报告了相近的数值，最高达30%，不过他们的测量仅限于月球赤道。这一增加可归因于负离子化的先验概率相对较低，以及NILS测得的高通量。我们指出，将 $\eta_{\mathrm{ENA}} = 0.16$固定并从模型中抽样，并不会改变我们的结论：负离子化的概率仍然很高。

负氢离子的散射产额可初步估算为$\mathrm{P}^{-}\eta^{\mathrm{sc}} \approx 0.15 \times 0.22 = 3.3\%$，与Wieser等（2025）采用另一种方法测得的2.5%产额相符。此处得到的较高产额可能源于Wieser等（2025）的能量分布模型，该模型低估了散射的低能粒子群。负氢离子的溅射产额估计为$\mathrm{P}^{-}\eta^{\mathrm{sp}} \approx 0.1 \times 0.08 = 0.8\%$；较低的电离概率使溅射粒子群的平均能量较低。

同样，质子的散射产额可根据 Lue 等人（2018a）的结果进行估算；该研究报告称，对于能量为数百电子伏特的散射质子，正电离概率约为 5%。假设 5% 的散射氢以质子形式逸出，则可得到约 1.1% 的质子散射产额，这与 Saito 等人（2008）以及 Lue 等人（2014，2018a）报告的数值一致。

7.4. 角分布

NILS 观测仅涵盖有限范围的发射角。然而，对于平均方位发射角$\phi = 213°$，可以分别获取散射氢原子和溅射氢原子的极向发射角 β 分布。请注意，这些分布所指的是逸出氢原子，而不论其电荷态如何。

图13显示了前向散射氢和前向溅射氢的极向发射角分布。数据对散射粒子的角分布约束更为严格，如较小的不确定度所示。相比之下，溅射分布的不确定性较大，主要是由于仪器在低能范围内的覆盖有限。对于这两种过程，$\beta > 75°$ 的角发射函数受可见性约束控制。无论微观尺度上的发射剖面如何，风化层的粗糙度都会降低近掠射发射角下的可见性，如图13中的虚线所示。在较小的 β 角下，溅射和散射的角分布开始出现差异。

散射粒子的角分布与其先验分布非常吻合，并且对先验分布的敏感性很低，这表明先验分布提供了准确的物理描述，并且与数据高度一致。

溅射粒子的角分布急剧上升，产额最高可达 0.4 sr^{-1}。溅射角产额对层级尺度先验的宽度σ_{sp}十分敏感，该先验定义见表 F.1。缩窄这一先验会减少各区间之间的变化，实际上迫使更新后的溅射角产额趋向其先验余弦依赖关系（方程 47）。然而，这会降低模型与观测差分通量之间的一致性，尤其是在发射能量介于 80 电子伏特和 200 电子伏特之间时。

对于较大的极向发射角 $\beta > 75°$，我们观测到的角发射函数与 Vorburger 等（2014b）报告的高能中性氢角发射函数在性质上有所不同：前者在较大的 β 下表现为通量递减，而后者则没有这一现象。造成这种差异的一个可能原因是，Vorburger 等（2014b）对于接近 $90°$ 的 β 缺乏数据覆盖范围，因此拟合受到的约束较弱。

需要注意的是，尽管在前向发射角下，溅射角产额高于散射角产额，但表 3 报告的总散射产额高于总溅射产额。这种表面上的矛盾源于非对称散射角分布：NILS 无法观测到的后向散射角占主导地位，其范围受式 46 中先验的约束。相比之下，溅射角产额先验假定为对称分布，而鉴于 NILS 的角度覆盖范围有限，无法在后验推断中对其进行更新。

7.5. 表面结合能和其他模型参数

风化层的表面结合能 U 是我们模型中的另一个自由参数。它似乎对先验不敏感，其后验分布稳定地收敛至约 4–6 电子伏特，最佳估计值为 5.5 电子伏特。这与预测结果（Kudriavtsev 等，2005）非常吻合。

溅射模型中的额外能量损失因子 γ_{extra} 在后验分布中趋近于零，这表明忽略该因子与NILS数据相符。

7.6. 月球磁异常对入射通量的影响

入射到表面上的太阳风通量并不一定等于在附近轨道测得的通量。已观测到入射通量在约100秒的时间尺度上变化可达1.5倍（图10）。这些变化的主要原因是靠近磁异常，磁异常可部分屏蔽（Vorburger 等人（2013））或局部增强（Wieser 等人（2010））入射通量。对于NILS这类单点测量，时间变化与空间变化无法区分；不过，两者很可能都有贡献。

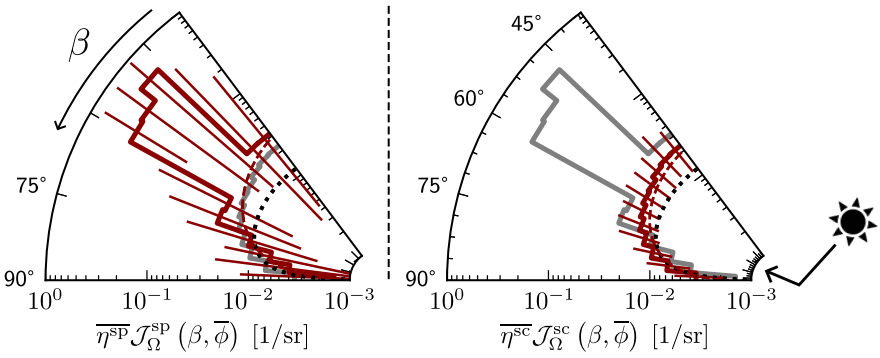

图 13. 溅射（左）与散射（右）的角产额后验分布汇总，随宏观极角 β 变化，发射方位角取平均值。$\phi = 213°$。两个面板中，粗红线表示各个 β 区间内角产额（对数）的最大后验估计，红色径向线表示 68% 最高密度区间。作为对比，灰线表示互补过程（溅射面板中为散射；散射面板中为溅射）。红色虚线表示先验分布（公式 46 和 47）。黑色点线表示月球风化层的（缩放后）可见度函数（图 B.1）。如太阳符号所示，产额对应于前向散射和前向溅射。数值列于表 F.2。

7.7. 局限性与注意事项

出于稳定性考虑，我们的模型对NILS的几何因子采用固定值，且不包含不确定度。几何因子中的任何不确定度都会直接传递为氢负电离概率P^-估计值的额外不确定度。在我们的分析中，得到的P^- 值相对较高。这也可能是由对NILS绝对几何因子的系统性低估造成的。仔细分析表明，从仪器角度看，几何因子被低估两倍是有可能的，但可能性不大。

控制仪器角响应的电极存在 NILS 内部电压偏置，这限制了低能下的角覆盖范围。据我们所知，本研究已尽可能考虑这一偏置。

尽管仪器配备了电子抑制系统，NILS数据仍以电子为主。这使得对少量负氢离子信号的提取在统计上存在不确定性。低能下，电子的微分通量会增加几个数量级（Canu-Blot 2024，图 6.10），这进一步增加了负氢离子分离的难度。尽管本研究考虑了这些影响，但电子和氢离子的飞行时间（或质量）响应校准中的微小误差，可能会导致质量分离产生较大的不确定性，尤其是在低能下。这或许可以解释模型与观测到的负氢离子微分通量在 50–60电子伏特以下吻合较差的原因，如图 1 所示。

8. 结论

我们开发并验证了一种半解析模型，用于描述从月球表面散射和溅射出来的负氢离子的能量和角分布。该模型将表面粒子输运的物理描述与近表面环境的宏观描述相结合。模型的一个关键特点是将散射通量和溅射通量分开处理，并考虑发射粒子的电离概率。

该模型受到相关物理过程先验信息的约束，这些信息由其他仪器、模拟和理论研究的结果提供。我们利用 NILS 仪器获得的测量数据，通过贝叶斯推断更新这些先验假设。

该模型与 NILS 的测量结果吻合良好。我们发现，月壤是优良的负离子电离材料，能够使氢原子以负离子形式离开表面的概率为 7–20%。我们估计，入射太阳风质子发生散射的概率为 22%，溅射表面氢的概率为 8%，这表明入射质子更可能被月壤散射，而不是溅射表面氢原子。

我们估计，约 3.3% 的太阳风质子以负氢离子的形式发生散射，而约 0.8% 的太阳风质子会导致表面氢原子被溅射为负离子。

我们得到了风化层表面结合能U 的可靠估计值，约为 5.5 电子伏特。我们得到的非弹性能量损失较大，这可能表明粒子在风化层中的总路径长度大于此前的假设。研究发现，对于散射和溅射过程，表面粗糙度决定了近镜面角度下的角分布发射。

我们的模型具有灵活性，可应用于其他粒子–表面组合。例如，通过将P^- 替换为P^0，它可以描述从月球表面发射的高能中性氢原子。嫦娥四号上的ASAN等仪器的数据，为在其他情境中应用该模型提供了直接机会。

致谢。 月球表面负离子（NILS）仪器由瑞典基律纳的瑞典空间物理研究所（IRF）代表欧洲航天局（ESA）研制。该项目得到欧洲航天局资助，资助编号为3-17483/22/NL/DB。NSSC的相关工作得到国家自然科学基金委员会（NSFC）资助，资助编号为42441807。NILS数据可从欧洲航天局的行星科学档案库（PSA）获取，doi：10.57780/esa-jw5mh1u。

对于太阳风参数，我们感谢通过美国国家航空航天局/戈达德太空飞行中心空间物理数据设施的OMNIWeb（或CDAWeb）服务使用ARTEMIS-P2（THEMIS-C）数据以及OMNI数据。

所有后验分布均通过 NUTS采样获得。该采样由 PyMC Python 包（Abril-Pla 等，2023年）实现，并采用 NumPyro 后端（Phan 等，2019年；Bingham 等，2019年）进行基于 JAX 的计算。部分方程借助 PySR（一种用于符号回归的 Python 包；Cranmer，2023年）进行了简化。

作者使用大语言模型辅助代码编写，并提升英语表达的清晰度。

参考文献

Abril-Pla, O., Andreani, V., Carroll, C., 等，2023年，《PeerJ计算机科学》，9，e1516 Afanas'ev, V. & Lobanova, L. 2025年，《核仪器与方法：物理研究B辑：束流与材料及原子的相互作用》，560，165610 Allegrini, F., Dayeh, M., Desai, M., 等，2013年，《行星与空间科学》，85，232

Angelopoulos, V. 2011年, 《空间科学评论》, 165, 3 Barabash, S., Bhardwaj, A., Wieser, M., 等, 2009年, 《当代科学》, 96, 526 Berger, M. J., Coursey, J. S., Zucker, M. A., & Chang, J. 2005年, 《ESTAR、PSTAR 和 ASTAR：用于计算电子、质子和氦离子阻止本领与射程表的计算机程序》（版本1.2.3）, [在线], 美国国家标准与技术研究院，盖瑟斯堡，马里兰州。可访问：http://physics.nist.gov/Star [访问日期：2025-11-04] Bertrand, J., Bertrand, P., & Ovarlez, J.-P. 2000年, 《变换与应用手册：第二版》, 编者 A. D. Poularikas（佛罗里达州博卡拉顿：CRC出版社有限责任公司）Bibring, J. P., Borg, J., Burlingame, A. L., 等, 1975年, 《月球与行星科学会议论文集》, 3, 3471 Bingham, E., Chen, J. P., Jankowiak, M., 等, 2019年, 《机器学习研究杂志》, 20, 28:1 Borisov, A. G. & Esaulov, V. A. 2000年, 《物理学杂志：凝聚态》, 12, R177 Brötzner, J., Biber, H., Szabo, P. S., 等, 2025a, 《地球与环境通讯》, 6 Brötzner, J., Kogler, M., Kalchgruber, L., 等, 2025b, 发表于2025年EPSC-DPS联合会议，芬兰赫尔辛基（Copernicus GmbH）Canu-Blot, R. 2024年, 《月球等离子体环境中的负离子：观测与等离子体-表面相互作用相关的微弱信号》, 技术报告318，于默奥大学物理系，数字版本中已删去第5章（论文I）和第7章（论文II）。Canu-Blot, R., Wieser, M., Kérényi, M., 等, 2025年, 《空间科学评论》, 221 Cartry, G., Kogut, D., Achkasov, K., 等, 2017年, 《新物理学杂志》, 19, 025010 Cassidy, T. & Johnson, R. 2005年, 《伊卡洛斯》, 176, 499 Clark, B., Hapke, B., Pieters, C., & Britt, D. 2002年, 《小行星III》 Cranmer, M. 2023年, arXiv预印本 arXiv:2305.01582 Demkov, Y. N. 1963年, 《实验与理论物理学杂志》, 第45卷第2期 Eckstein, W. 1981年, 《反射粒子的电荷分数》（施普林格柏林海德堡）, 157–183 Eckstein, W. & Preuss, R. 2003年, 《核材料杂志》, 320, 209 Estler, W. T. 1999年, 《CIRP年刊》, 48, 611 Falcone, G., Forlano, L., & Tolmachev, A. I. 1999年, 《物理评论B》, 60, 6352 Fatemi, S., Holmström, M., Futaana, Y., 等, 2014年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 119, 6095 Fatemi, S., Lue, C., Holmström, M., 等, 2015年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 120, 4719 Forlano, L., Falcone, G., & Tolmachev, A. I. 1996年, 《新物理学杂志D辑》, 18, 873 Futaana, Y. 2003年, 《地球物理研究杂志》, 108, 1025 Futaana, Y., Barabash, S., Wieser, M., 等, 2012年, 《地球物理研究杂志：行星》, 117 Futaana, Y., Barabash, S., Wieser, M., 等, 2013年, 《地球物理研究快报》, 40, 262 Gainullin, I. K. 2020年, 《物理学进展》, 63, 888 Gelman, A. 2014年, 《贝叶斯数据分析》, 第三版, 编者 J. B. Carlin, H. S. Stern, D. B. Dunson, A. Vehtari, & D. B. Rubin, 查普曼 - 霍尔出版社系列（佛罗里达州博卡拉顿：CRC 出版社, 泰勒与弗朗西斯出版集团）, 参考文献：第607–639页 Gelman, A. & Rubin, D. B. 1992年, 《统计科学》, 7 Halekas, J. S., Brain, D. A., Lin, R. P., & Mitchell, D. L. 2008年, 《空间研究进展》, 41, 1319 Halekas, J. S., Poppe, A. R., Lue, C., Farrell, W. M., & McFadden, J. P. 2017年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 122, 6240 Halekas, J. S., Poppe, A. R., McFadden, J. P., 等, 2014年, 《地球物理研究快报》, 41, 7436 Heiken, G. 1975年, 《地球物理学评论》, 13, 567 Helfenstein, P. & Shepard, M. K. 1999年, 《伊卡洛斯》, 141, 107 Hoffman, M. D. & Gelman, A. 2011年, arXiv预印本 arXiv:1111.4246 Jans, S., Wurz, P., Schletti, R., 等, 2001年, 《核仪器与方法B辑》, 173, 503 Jäggi, N., Biber, H., Brötzner, J., 等, 2024年, 《行星科学杂志》, 5, 75 Kaneko, T. 1990年, 《表面科学》, 236, 203 Kawano, H. & Page, F. M. 1983年, 《国际质谱与离子物理学杂志》, 50, 1 Kenmotsu, T., Yamamura, Y., Ono, T., & Kawamura, T. 2004年, 《等离子体与聚变研究杂志》, 80, 406 King, J. H. & Papitashvili, N. E. 2005年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 110 Kruschke, J. K. 2021年, 《自然·人类行为》, 5, 1282 Kudriavtsev, Y., Villegas, A., Godines, A., & Asomoza, R. 2005年, 《应用表面科学》, 239, 273 Lang, N. D. & Nørskov, J. K. 1983年, 《Physica Scripta》, T6, 15 Li, C., Hu, H., Yang, M.-F., 等, 2024年, 《国家科学评论》, 11 Lienemann, J., Blauth, D., Wethekam, S., 等, 2011年, 《核仪器与方法：物理研究B辑：束流与材料及原子的相互作用》, 269, 915 Lin, H., Chang, R., Xu, R., et al. 2025年, 《自然·地球科学》, 18, 1097 Lindhard, J., Nielsen, V., & Scharff, M. 1968年, 丹麦皇家科学院, Mat.-Fys. Medd., 36 Lindhard, J. & Scharff, M. 1961年, 《物理评论》, 124, 128 Littmark, U. & Gras-Marti, A. 1978年, 《应用物理》, 16, 247 Liu, B., Zeng, X., Xu, R., et al. 2025年, 《自然·天文学》, 9, 1776 Los, J. & Geerlings, J. 1990年, 《物理学报告》, 190, 133 Lue, C., Futaana, Y., Barabash, S., et al. 2016年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 121, 432 Lue, C., Futaana, Y., Barabash, S., et al. 2014年, 《地球物理研究杂志：行星》, 119, 968 Lue, C., Futaana, Y., Barabash, S., et al. 2011年, 《地球物理研究快报》, 38, n/a Lue, C., Halekas, J. S., Poppe, A. R., & McFadden, J. P. 2018a年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 123, 5289 Lue, C., Halekas, J. S., Poppe, A. R., & McFadden, J. P. 2018b, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 123, 5289 Maazouz, M., Guillemot, L., Esaulov, V., & O'Connor, D. 1998年, 《表面科学》, 398, 49 Maynadié, T., Futaana, Y., Barabash, S., et al. 2025年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 130 McComas, D. J., Allegrini, F., Bochsler, P., et al. 2009年, 《地球物理研究快报》, 36 McFadden, J. P., Carlson, C. W., Larson, D., et al. 2008年, 《空间科学评论》, 141, 277 Meyer, F. W., Harris, P. R., Taylor, C. N., et al. 2011年, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 269, 1316 Morrissey, L. S., Bringuier, S., Bu, C., et al. 2024年, 《行星科学杂志》, 5, 272 Niehus, H., Heiland, W., & Taglauer, E. 1993年, 《表面科学报告》, 17, 213 Ono, T., Aoki, Y., Kawamura, T., Kenmotsu, T., & Yamamura, Y. 2005年, 《核材料杂志》, 337–339, 975 Papaspiliopoulos, O., Roberts, G. O., & Sköld, M. 2007年, 《统计科学》, 22 Papike, J. J., Simon, S. B., & Laul, J. C. 1982年, 《地球物理学评论》, 20, 761 Peši´c, Z. D., Vikor, G., Atanassova, S., et al. 2007年, 《物理评论A》, 75, 012903 Phan, D., Pradhan, N., & Jankowiak, M. 2019年, arXiv preprint arXiv:1912.11554 Pieters, C. M. & Noble, S. K. 2016年, 《地球物理研究杂志：行星》, 121, 1865 Raue, A., Kreutz, C., Maiwald, T., et al. 2009年, 《生物信息学》, 25, 1923 Rodríguez M., D., Saul, L., Wurz, P., et al. 2012年, 《行星与空间科学》, 60, 297 Saito, Y., Nishino, M. N., Fujimoto, M., et al. 2012年, 《地球、行星与空间》, 64, 83 Saito, Y., Yokota, S., Tanaka, T., et al. 2008年, 《地球物理研究快报》, 35 Saul, L., Wurz, P., Vorburger, A., et al. 2013年, 《行星与空间科学》, 84, 1 Schaufelberger, A., Wurz, P., Barabash, S., et al. 2011年, 《地球物理研究快报》, 38, n/a Schenkel, T., Briere, M. A., Schmidt-Böcking, H., Bethge, K., & Schneider, D. H. 1997年, 《物理评论快报》, 78, 2481 Sigmund, P. 1969年, 《物理评论》, 184, 383 Sukhomlinov, V. S. 1997年, 《技术物理》, 42, 14 Szabo, P., Cupak, C., Biber, H., et al. 2022年, 《表面与界面》, 30, 101924 Szabo, P. S., Poppe, A., Mutzke, A., et al. 2023a年, 高能中性原子 (ENA) 月球和水星的发射特性：太阳风反射的三维风化层模拟（数据集） Szabo, P. S., Poppe, A. R., Mutzke, A., et al. 2023b年, 《地球物理研究杂志：行星》, 128 Tanaka, T., Saito, Y., Yokota, S., et al. 2009年, 《地球物理研究快报》, 36 Tolmachev, A. 1999年, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 155, 36 Tucker, O. J., Farrell, W. M., Killen, R. M., & Hurley, D. M. 2019年, 《地球物理研究杂志：行星》, 124, 278 Verbeek, H., Eckstein, W., & Bhattacharya, R. 1980年, 《表面科学》, 95, 380 von Toussaint, U., Mutzke, A., & Manhard, A. 2017年, 《Physica Scripta》, 2017年, 014056 Vorburger, A., Wurz, P., Barabash, S., et al. 2012年, J. Geophys. Res., 117 Vorburger, A., Wurz, P., Barabash, S., et al. 2014a年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 119, 709 Vorburger, A., Wurz, P., Barabash, S., et al. 2014b年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 119, 709 Vorburger, A., Wurz, P., Barabash, S., et al. 2013年, 《地球物理研究杂志：空间物理学》, 118, 3937 Wang, N. P., García, E. A., Monreal, R., et al. 2001年, 《物理评论A》, 64, 012901 Watanabe, S. 2010年, 《机器学习研究杂志》, 11, 3571 Wieser, M., Barabash, S., Futaana, Y., et al. 2010年, Geophys. Res. Lett., 37 Wieser, M., Barabash, S., Futaana, Y., et al. 2009年, 《行星与空间科学》, 57, 2132

Wieser, M., Barabash, S., Wang, X.-D., et al. 2020年, 《空间科学评论》, 216, 73 Wieser, M., Williamson, H., Wieser, G. S., et al. 2024年, Astronomy & Astro- physics, 684, A146 Wieser, M., Wurz,P., Brüning, K., & Heiland, W. 2002年, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 192, 370 Wieser, M., Zhang, A., Canu-Blot, R., et al. 2025年, 《地球与环境通讯》, 6 Wilson, W. D., Haggmark, L. G., & Biersack, J. P. 1977年, 《物理评论B》, 15, 2458 Wucher, A. 2008年, 《应用表面科学》, 255, 1194 Wucher, A., Weidtmann, B., & Duvenbeck, A. 2013年, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 303, 108 Wurz, P., Scheer, J., & Wieser, M. 2006年, e-Journal of Surface Science and Nan- otec hnology, 4, 394 Yokota, S., Saito, Y., Asamura, K., et al. 2009年, 《地球物理研究快报》, 36 Zeng, X., Liu, D., Chen, Y., et al. 2023年, 《自然·天文学》, 7, 1188 Zhang, A., Wieser, M., Wang, C., et al. 2020 年 , 《行星与空间科学》 , 189, 104970 Zhang, H., Li, C., You, J., et al. 2022 年 , 《航空航天》 , 9, 358 Zhou, C., Tang, H., Li, X., et al. 2022年, 《自然·通讯》, 13, 5336 Ziegler, J. F. & Biersack, J. P. 1985年, 《离子在物质中的阻止与射程》 (施普林格美国), 93–129

附录 A：推断摘要

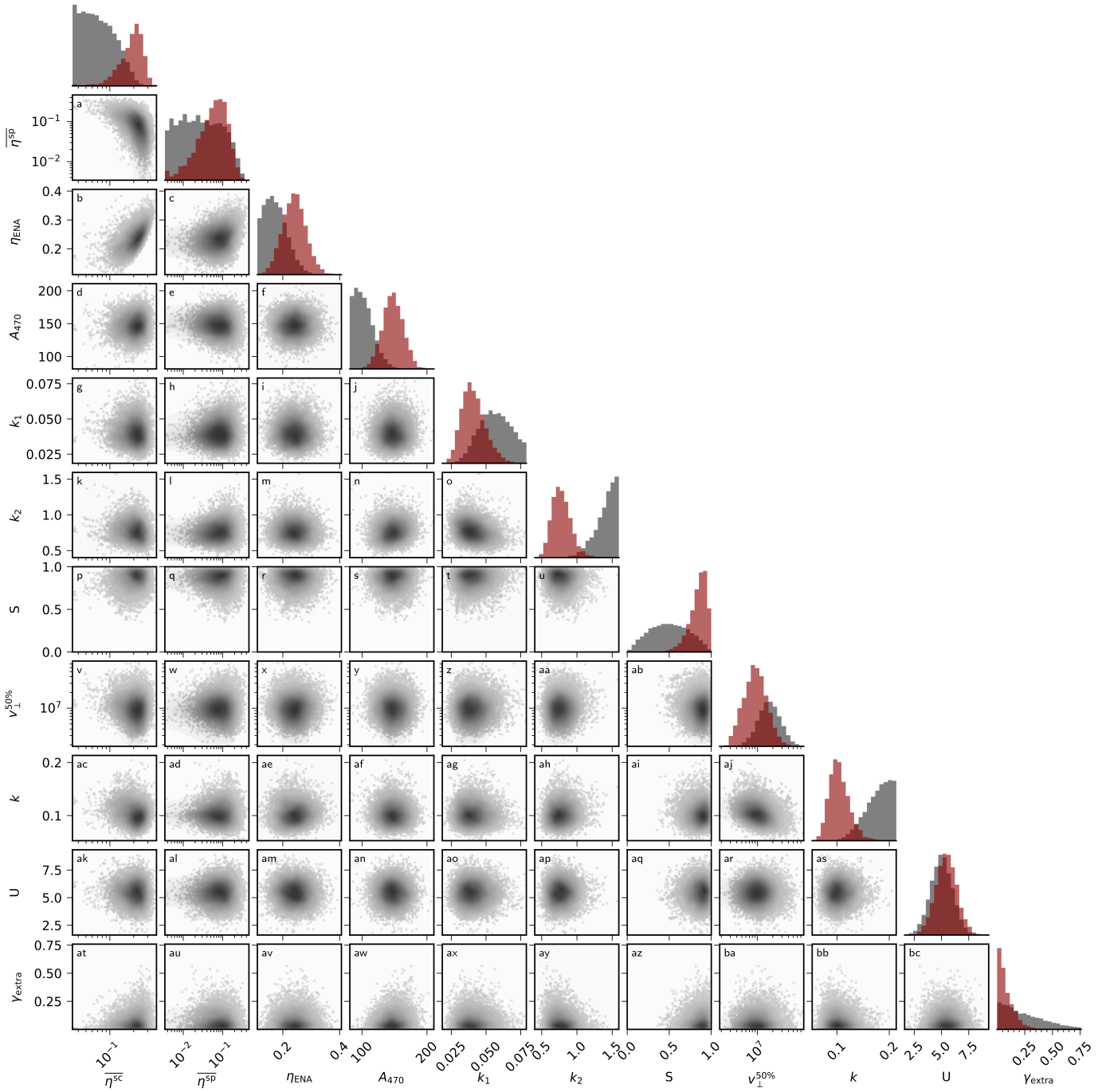

图 A.1：联合后验分布 $\mathbb{P}\left(\mathcal{J}_{\mathrm{H}}^{-} \mid \mathrm{C}\right)$ 的配对图。对角线面板显示各模型参数的边缘后验分布（红色）及先验分布（灰色）。请注意，先验分布可能会根据面板 x 轴的范围进行裁切。非对角线面板以点的形式显示后验样本，并叠加淡色的高斯核密度估计，使分布显示得更加清晰。每个面板都添加了字母标签，以供引用。

附录 B：风化层作为粗糙表面

B.1. 微观极向发射角

Szabo 等，2022 提出了一个统计模型，用于描述随机高斯粗糙表面的倾斜角分布，该表面由单一粗糙度参数 w 表征。根据这一参数，可以推导出表面的平均倾斜度（Szabo 等，2022，公式 4）。

$$\delta_m \ [\text{rad}] \equiv \frac{\pi}{2} \exp\left[\frac{1}{2w^2}\right] \mathtt{erfc}\left[\frac{1}{w\sqrt{2}}\right] , \tag{B.1}$$

其中 erfc 表示互补误差函数。Brötzner 等（2025a）估计，阿波罗16号风化层样品的平均倾斜角为 $\delta_m = 27.7°$。Helfenstein 和 Shepard（1999）报告称，在约 40° 的 0.1 mm 尺度上，平均坡度较大，但不确定性也显著，约为 20°（1σ）。因此，我们采用第一个估计值 $\delta_m = 27.7°$ 来描述 NILS 观测到的月球表面粗糙度，并求解式 B.1 以确定w，得到$w \approx 0.45$。

我们使用 Szabo 等人（2022，式 C4）建立宏观极向发射角 β 与微观角 β' 之间的映射关系：

$$\cos\beta = \frac{\cos\beta' - \sin\beta' \cos\phi' \sqrt{p^2+q^2}}{\sqrt{1+p^2+q^2}} , \tag{B.2}$$

其中（p，q）为表面坡度（Szabo 等，2022，见图 A1），ϕ' 为微观方位发射角。为了从该关系中得到 β'，我们从联合正态分布（p，q）$\sim \mathcal{N}(0,\ w^2)$中抽样（$p$，$q$）（Szabo 等，2022，公式 A2），并对宏观角和微观角进行均匀抽样：$\phi' \sim$ Uniform(0，2π) 和 $\cos\beta \sim$ Uniform(0, 1)。所得映射如图 B.1 所示，其中公式 9 以粗红线绘出。

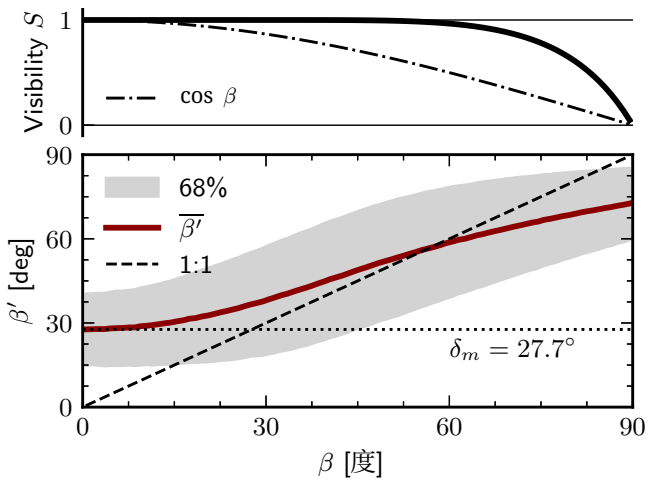

图 B.1：平均倾斜角为 $\delta_m = 27.7°$（点线）的粗糙表面上，宏观极向发射角 β 与微观极向发射角 β' 之间的映射关系。粗红线表示任意 β对应的平均 β'，并显示 68% 百分位范围（灰色阴影区域）和单位线（虚线）。

B.2. 遮蔽

对于粗糙表面，离开表面的溅射粒子在逸出途中可能会重新沉积。我们将粒子以宏观发射极角 β 离开表面后再次撞击表面、因而无法被仪器观测到的概率称为“可见性”概率 S，其定义如下（Szabo 等，2022，公式 9、13、C5）：

$$S = \frac{1}{1+\Lambda} \text{, with} \tag{B.3a}$$

$$\Lambda = \frac{w}{\cot\beta\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-\cot^2\beta}{2w^2}\right) - \frac{1}{2}\mathtt{erfc}\left(\frac{\cot\beta}{w\sqrt{2}}\right) . \tag{B.3b}$$

The visibility probability is given for $w = 0.45$ in Fig. B.1.

附录 C：仪器模型

仪器报告每个测量时间段内的计数 C τ。本节介绍计数率 C/τ与微分数通量 $\mathcal{J}$之间的转换。

仪器以增量方式扫描相空间。我们用速度矢量 **u**标记相空间的每次观测，定义见 Canu-Blot 等（2025，式 5）。根据 Canu-Blot 等（2025，式 55 和 58），可写为

$$A(\mathbf{u})\,\kappa(\mathbf{u}) \approx \frac{2\xi_u}{\cos\omega_u} \mathcal{GF}_0(\mathbf{u})\,\eta(\mathbf{u}) , \tag{C.1}$$

其中，A [cm^2] 是仪器的有效面积，$\mathcal{GF}_0$ [cm sr eV/eV] 是仪器的绝对几何因子（Canu-Blot 等，2025，式 73），κ [sr eV/q] 是缩放因子（Canu-Blot 等，2025，式 10），η 是探测概率（Canu-Blot 等，2025，第 4.7.2 节），而（ξ_u，ω_u）分别是测量 **u**的平均荷质比能量 [eV/q]和仰角。仰角历来记作 θ，但为避免符号冲突，我们将其记作 ω。式 C.1 中的近似来自以下简化（在仪器覆盖范围内的平均误差为 1%）

$$\cos\omega_u \approx \iint \mathcal{R}_\Omega(\hat{\mathbf{u}},\omega,\alpha)\cos^2\alpha\cos\omega \mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\omega , \tag{C.2}$$

其中 $\mathcal{R}_\Omega$ [1/sr] 是仪器的角响应，α 是方位角。

我们用式 C.1 的近似替换 Canu-Blot 等（2025年，式 57）中的 $A(\mathbf{u})\kappa(\mathbf{u})$，假设微分通量不存在小于仪器能量响应尺度的结构，并注意到 $\mathcal{J} = 2Ef/m$，其中f 是质量为 m 的物种的相空间密度，由此得到

$$\lambda(\mathbf{u}) = \mathcal{K}(\mathbf{u}) \iint \mathcal{J}(\xi_u,\omega,\alpha)\,\mathcal{R}_\Omega(\hat{\mathbf{u}},\omega,\alpha)\cos^2\alpha\cos\omega \mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\omega , \tag{C.3a}$$

$$\mathcal{K}(\mathbf{u}) \equiv 2\tau \frac{\xi_u}{\cos\omega_u} \eta(\mathrm{u})\,\mathcal{GF}_0(\hat{\mathbf{u}}) . \tag{C.3b}$$

现在我们假设，微分通量在仪器角响应的方位覆盖范围内变化很小。由此可得

$$\lambda(\mathbf{u}) = \mathcal{K}(\mathbf{u}) \int_{3\pi/2}^{2\pi} \mathcal{J}(\xi_u, \omega, \alpha_u) \cdot \tilde{\mathcal{R}}_\Omega(\hat{\mathbf{u}}, \omega) \cos\omega \mathrm{d}\omega\,, \tag{C.4a}$$

$$\tilde{\mathcal{R}}_\Omega(\hat{\mathbf{u}}, \omega) \equiv \int \mathcal{R}_\Omega(\hat{\mathbf{u}}, \omega, \alpha) \cos^2\alpha \mathrm{d}\alpha. \tag{C.4b}$$

方程 C.4 中的积分是在仪器坐标系中定义的（更多详情请参见 Canu-Blot 等（2025年，第 4.1.3 节）），现在我们使用发射角（β, ϕ）来表示该积分（见图2），所用变换定义见 Wieser 等人（2025年，方程 14、15 和 16）。

$$\boxed{\lambda(\mathbf{u}) = \mathcal{K}(\mathbf{u}) \int_0^{\pi/2} \mathcal{J}(\xi_u, \beta, \phi_u) \cdot \tilde{\mathcal{R}}_\Omega\left(\hat{\mathbf{u}}, \beta - \frac{\pi}{2}\right) \sin\beta \mathrm{d}\beta}\,, \tag{C.5}$$

其中 $\phi_u = f_2(\omega_u, \alpha_u;\ \mathrm{SA})$，$f_2$ 由 Wieser 等人（2025，式 13）定义，且 $\alpha_u = -0.752°$（Canu-Blot 等，2025，式 16）。我们忽略对 ω 的依赖，并近似为 $\phi_u \approx \phi = f_2\left(\alpha_u;\ \mathrm{SA}\right) \approx 213°$，其中 SA $\approx 34°$ 是任务期间太阳方位角的平均值。

附录D：贝叶斯推断

NILS 数据集包含 302 分钟的观测，其中仪器约有一半时间朝向月球表面。近表面环境主要由二次电子、光电子和紫外辐射构成，这些因素都使较弱负离子信号的研究变得复杂。我们使用贝叶斯推断来提取并研究该信号。

我们首先将观测计数集合定义为 C，即在时间-能量-角度-质量矩阵中观测到的计数数量。我们假设观测计数服从泊松（Pois）分布，因此

$$\mathbb{P}(\boldsymbol{C} \mid \boldsymbol{\Lambda}, \mathbf{F}) = \mathtt{Pois}(\boldsymbol{\Lambda} \cdot \mathbf{F})\,, \tag{D.1}$$

其中，$\boldsymbol{\Lambda} \equiv [\lambda_{\mathrm{H}^-}, \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}}]$，$\lambda_{\mathrm{H}^-}$ 为负氢离子的信号率，$\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}}$ 为所有其他干扰信号的贡献——即电子、氧离子和紫外线。矩阵$\mathbf{F}$ 定义了仪器的质量响应，见 Canu-Blot 等（2025年，第 4.6 节）。因此，矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 定义了时间-能量-角度空间中的信号率。

我们希望推断负氢离子微分通量 $\mathcal{J}_{\mathrm{H}^-}$。我们利用式 C.5 中定义的仪器响应，将速率 λ_{H^-} 与 $\mathcal{J}_{\mathrm{H}^-}$ 联系起来。随后，我们通过引入 $\lambda \equiv \lambda_{\mathrm{H}^-}$ 和 $\mathcal{J} \equiv \mathcal{J}_{\mathrm{H}^-}$来简化记号，并得到如下确定性关系

$$\mathbb{P}(\lambda \mid \mathcal{J}) = \delta[\lambda - \lambda_{\mathrm{model}}(\mathcal{J})]\,, \tag{D.2}$$

其中，关系式 $\lambda_{\mathrm{model}}(\mathcal{J})$ 由方程 C.5 定义。我们引入以观测数据为条件的微分通量统计分布（以下称为 后验分布），$\mathbb{P}(\mathcal{J} \mid \mathrm{C})$。我们应用贝叶斯定理，省略边际似然后，将概率分布写成比例形式

$$\mathbb{P}(\mathcal{J} \mid \boldsymbol{C}) \propto \mathbb{P}(\mathcal{J})\,\mathbb{P}(\boldsymbol{C} \mid \mathcal{J})\,. \tag{D.3}$$

我们将速率矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 和仪器的质量响应 $\mathbf{F}$ 引入 $\mathbb{P}(\mathrm{C} \mid \mathcal{J})$，得到：

$$\mathbb{P}(\boldsymbol{C} \mid \mathcal{J}) = \iint \mathbb{P}(\boldsymbol{C}, \lambda, \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}}, \mathbf{F} \mid \mathcal{J})\,\mathrm{d}\lambda \mathrm{d}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}} \mathrm{d}\mathbf{F}\,. \tag{D.4}$$

根据以下假设：(i) λ和 $\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}}$ 相互独立；(ii) $\mathbf{F}$ 和 $\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}}$ 不依赖于 $\mathcal{J}$；(iii) 可忽略仪器质量响应的不确定性，我们得到

$$\mathbb{P}(\boldsymbol{C} \mid \mathcal{J}) = \int \mathbb{P}(\boldsymbol{C} \mid \lambda, \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}}, \mathbf{F})\,\mathbb{P}(\lambda \mid \mathcal{J})\,\mathbb{P}(\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}})\,\mathrm{d}\lambda \mathrm{d}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}}\,. \tag{D.5}$$

F由公式 D.1 和 D.2，并对 λ 积分，我们得 到

$$\mathbb{P}(\mathcal{J} \mid \boldsymbol{C}) \propto \mathbb{P}(\mathcal{J}) \int \mathtt{Pois}([\lambda_{\mathrm{model}}(\mathcal{J}), \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}}] \cdot \mathbf{F})\,\mathbb{P}(\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}}\,. \tag{D.6}$$

我们对 $\mathbb{P}(\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{nuis}})$ 使用了杰弗reys先验（无信息先验）。先验 $\mathbb{P}(\mathcal{J} \mid \mathrm{C})$ 通过第 5.1 节中的先验、表 F.1 和公式 42 中的模型来描述。

附录 E：散射能量模型的归一化

散射粒子的能量分布模型计算开销很大，尤其是公式 33，它需要对函数 $\mathcal{J}_{\mathrm{E}}^{\mathrm{sc}} N$ 求值多次，才能对其非弹性能量损失进行边缘化。下面给出归一化因子 n 的另一种定义，该定义通过对分布 $\mathcal{J}_{\mathrm{E}}^{\mathrm{sc}}$ 进行无量纲化得到。

E.1. 无量纲化

我们通过对入射能量E_{in}进行归一化，降低了该问题的维度。我们引入无量纲变量

$$e = E/E_{\mathrm{in}}\,, \tag{E.1a}$$

$$u = U/E_{\mathrm{in}}\,, \tag{E.1b}$$

$$\Delta'_\epsilon = \Delta_\epsilon/E_{\mathrm{in}}\,, \tag{E.1c}$$

$$\text{giving } \zeta = \frac{A}{e+u}\,, \tag{E.1d}$$

$$\text{with } A = p^2(1+u) - \Delta'_\epsilon\,. \tag{E.1e}$$

我们得到约化形式的能量分布

$$E_{\mathrm{in}} \cdot \mathcal{J}_E^{\mathrm{sc}} = \frac{2\kappa e}{(e+u)^2} f(x)\,, \tag{E.2}$$

其中 x 和 f 的定义同式 26。注意到

$$\mathrm{d}E = \frac{E_{\mathrm{in}} A}{\kappa \exp(x/\kappa)} \mathrm{d}x\,, \tag{E.3a}$$

$$e = \frac{A}{\exp(x/\kappa)} - u\,, \tag{E.3b}$$

我们可以将归一化因子写为 $\mathrm{n} = \int_0^\infty \mathcal{J}_E^{\mathrm{sc}} \mathrm{d}E$，它与 E_{in} 无关：

$$\mathrm{n}\left(u, \Delta_\epsilon'\right) = 2 \int_0^{\kappa \ln(A/u)} \left[1 - \frac{u}{A} \exp\left(x/\kappa\right)\right] f\left(x\right) \mathrm{d}x \,. \tag{E.4}$$

E.2. 解析近似

对于（$p = 0.97, \kappa = 7.3$）这一特殊情况，即一个质子以 300 km/s 的速度撞击月壤，对应于 M_{P} =1 原子质量单位、$M_{\mathrm{S}} = 21.9$ 原子质量单位，且 $m = 0.57$，我们将函数 $\mathrm{n}\left(u,\ \Delta_\epsilon'\right)$ 近似为

$$\mathrm{n}\left(u, \Delta_\epsilon'\right) \approx \left(\frac{\ln \Delta_\epsilon' - 2.193 \times 10^{-1}}{\ln u \cdot \ln \Delta_\epsilon'}\right) - \frac{1.262 \times 10^{-2}}{\ln \Delta_\epsilon'} + 9.010 \times 10^{-1} \,. \tag{E.5}$$

该近似在 $\Delta_\epsilon' \in \left[1 \times 10^{-3}, 0.95\right]$ 和 $u \in \left[1 \times 10^{-3}, 2 \times 10^{-2}\right]$ 时有效，涵盖了大多数可能的表面结合能、非弹性损失和太阳风能量。在此范围内，该近似的平均相对误差为 0.4%；当 $\Delta_\epsilon' > 0.9$ 较大时，精度会降低（相对误差约为 10%）。

附录 F：补充内容

F.1. 先验的定义

我们在此定义第 5.1 节中未提及的所有先验分布。

表 F.1：先验知识的定义

参数	分布	约束
S	贝塔（$\alpha = 2, \beta = 2$）	
$v_\perp^{50\%}$	对数正态（$\mu = 16.9, \sigma = 0.5$）	
k	对数正态（$\mu = -1.51, \sigma = 0.25$）	
A_{470}	正态（$\mu = 94.6, \sigma = 20.0$）	$\mathrm{A}_{470} > 0$
k_1	对数正态 ($\mu = -2.83, \sigma = 0.25$)	
k_2	对数正态 ($\mu = 0.71, \sigma = 0.25$)	
γ_{extra}	贝塔 ($\alpha = 1, \beta = 3$)	
U	正态 ($\mu = 5, \sigma = 1$)	$U \geq 1$
r	均匀分布 (0, 1)	
ϵ_i^{sc}	正态（$\mu = 0, \sigma = 1$）	
ϵ_i^{sp}	正态（$\mu = 0, \sigma = 1$）	
σ_{sc}	半正态分布（$\sigma = 1$）	
σ_{sp}	半正态分布（$\sigma = 1$）	
$\boldsymbol{\lambda_{\mathrm{nuis}}}$	$\propto 1/\sqrt{\boldsymbol{\lambda_{\mathrm{nuis}}}}$	$\boldsymbol{\lambda_{\mathrm{nuis}}} > 0$

散射角向发射分布 $\mathcal{J}^{\mathrm{sc}}{}_\Omega\left(\beta_i, \phi\right)$ 和溅射角向发射分布 $\mathcal{J}^{\mathrm{sp}}{}_\Omega\left(\beta_i, \phi\right)$ 随宏观发射极角 β_i的变化被离散为 11 个等间距角区间，$\bar{}$ 索引为$i = 1, \ldots, 11$。我们采用了如下定义的层次非中心对数正态参数化（以溅射过程为例）

$$\mathcal{J}_\Omega^{\mathrm{sp}}\left(\beta_i, \bar{\phi}\right) = \exp\left[\ln\left[\mathcal{J}_\Omega^{\mathrm{sp,\,prior}}\left(\beta_i, \bar{\phi}\right)\right] + \sigma^{\mathrm{sp}} \times \epsilon_i^{\mathrm{sp}}\right] \,. \tag{F.1}$$

层次参数化的选择使角度分箱之间的变化平滑且弱信息性，而非中心参数化则降低了各分箱角产额与尺度参数 σ_{sp} 和σ_{sc}之间的相关性（Papaspiliopoulos 等，2007年）。

我们通过预测性先验建模，系统地验证了先验的选择。我们以启发式方法研究了推断对先验选择的敏感性。在所有情况下，本研究的主要结论对于先验假设的合理变化都保持稳健。

F.2 角产额的后验汇总

表 F.2 汇总了散射和溅射角产额的边缘后验分布。

TabF.2：溅射与散射角产额的边缘后验分布摘要 .

[a] β_i [度]	$\eta^{sp}\mathcal{T}^{sp}{}_{\Omega}\left(\beta_i,\phi\right)$ [1/sr]				$\eta^{sc}\mathcal{T}^{sc}{}_{\Omega}\left(\beta_i,\phi\right)$ [1/sr]			
	MAP $\times 10^2$	中位数 $\times 10^2$	68% 最高密度区间 低 $\times 10^3$	68% 最高密度区间 高 $\times 10^2$	MAP $\times 10^2$	中位数 $\times 10^2$	68% 最高密度区间 低 $\times 10^3$	68% 最高密度区间 高 $\times 10^2$
39	3.24	2.73	4.5	19.3	2.3	2.26	12.4	3.78
44	3.25	3.9	3.43	39	2.26	2.46	13.6	4.56
49	52.4	7.45	12.9	89.6	2.14	2.09	12.4	3.33
54	34.5	6.56	15.6	80	1.93	1.8	11.8	3.08
59	32.8	23	87.5	73.9	1.85	1.9	12.5	3.07
63	2.38	1.86	4.75	13.4	1.69	1.72	11.4	2.73
68	2.53	1.29	3.56	8.45	1.53	1.68	10.4	2.65
73	1.1	0.802	2.28	4.8	1.29	1.43	9.32	2.32
78	0.642	0.405	0.959	1.81	1.01	1.03	6.54	1.53
83	0.401	0.361	0.784	2.13	0.686	0.682	4.18	1.07
88	0.144	0.163	0.219	1.18	0.351	0.333	1.95	0.558

注。 提醒一下，这些角产额对应于 $\phi = 213°$、范围为 $47°$ 至 $52°$的太阳天顶角，以及能量范围为 440 电子伏特至 502 电子伏特的太阳风质子。最大后验和最高密度区间是在对数空间中计算的，然后转换回线性空间。 [a] β_i 是角区间的中心，宽度恒定为 5 度。