

УДК 523

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЫЛЕНИЯ ЛЕДЯНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ИОНОВ H^+ : ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИЗОТОПОВ Н И О В ПРИЛОЖЕНИИ К СПУТНИКАМ ЮПИТЕРА

© 2015 г. В. С. Бронский¹, С. Н. Шилобреева¹, В. И. Шематович², А. В. Хохлов³

¹Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского (ГЕОХИ) РАН, Москва

²Институт астрономии (ИНАСАН) РАН, Москва

³Институт теории прогноза землетрясений и математической геофизики РАН, Москва

e-mail: vbronsky@gmail.com

Поступила в редакцию: 16.09.2014 г.

С помощью компьютерного моделирования проведен статистический анализ существующих моделей для расчета коэффициентов распыления ледяных поверхностей под воздействием ионов H^+ , а также получены численные значения коэффициентов распыления в широком диапазоне энергии воздействующего иона и их доверительные интервалы. Установлено, что наименее чувствительной к вариации параметров является аппроксимационная модель (Fama и др., 2008) с рассчитанным доверительным интервалом $\pm 20\%$. Рассчитаны коэффициенты распыления водяного льда ($p = 0.94$, $T = 80$ К) под воздействием ионов H^+ в диапазоне энергии от нескольких эВ до 10 кэВ и проведена верификация полученных результатов с экспериментальными данными. Показано, что максимальный коэффициент распыления равен 0.9 H_2O /ион при энергии налетающих ионов H^+ 200 эВ. Моделирование зависимости коэффициентов распыления молекул H_2O от температуры ледяной поверхности показало, что в интервале температур 40–100 К вариации величины коэффициента распыления малы. С ростом температуры поверхности увеличивается и коэффициент распыления. В максимуме распределения при $T = 40$ –100 К коэффициент распыления $Y(E = 200 \text{ эВ}) = 0.9 H_2O$ /ион, при $T = 200$ К – 1.1 H_2O /ион. Проведено моделирование распределения по кинетической энергии распыленных молекул H_2O и атомов Н и О в диапазоне энергий 1–100 кэВ налетающих ионов H^+ . Полученные результаты могут быть использованы для моделирования изменения изотопного состава экзосферы спутников Юпитера в процессе распыления. Рассчитанные соотношения коэффициентов распыления изотопов Н, D и ^{18}O , ^{16}O с поверхности для спутников Юпитера (Европа, Ганимед, Каллисто) под воздействием ионов H^+ в диапазоне энергии от нескольких эВ до 10 кэВ равны $(1.7 \pm 0.3) \times 10^{-5}$ и 0.18 ± 0.03 соответственно. Полученные соотношения отличаются от исходных изотопных на поверхности спутников Юпитера. Установлено, что это отличие значимое и может приводить к перераспределению изотопов на поверхности спутников Юпитера. Показано, что изменение изотопного соотношения D/H на поверхности спутников Юпитера зависит от величины плотности потока облучаемых ионов.

Ключевые слова: распыление, моделирование, лед, изотопы водорода и кислорода, спутники Юпитера.

DOI: 10.7868/S0320930X15030020

ВВЕДЕНИЕ

Перераспределение атомов и молекул на поверхности космических тел, облучаемых потоками ионов, электронов или фотонов, может происходить в результате многих процессов, таких как физическая и химическая адсорбция, десорбция, диффузия, распыление, радиолиз и др. Одним из основных процессов изменения поверхностей на небесных телах во внешних областях Солнечной системы, включая спутники планет-гигантов, ледяные объекты пояса Койпера и облака Оорта, является радиолиз (Johnson и др., 2004). Данный процесс воздействия и изменения свойств и морфологии

ледяных поверхностей небесных тел называются космическим выветриванием. Дистанционные и/или прямые измерения состава нейтральных и заряженных частиц в разреженных газовых оболочках небесных тел позволяют оценить собственно относительные концентрации основных нейтральных компонент в исследуемой газовой оболочке и сделать заключение об относительном составе родительских молекул, покидающих ледяную поверхность спутника вследствие радиолиза солнечным УФ-излучением и/или магнитосферной плазмой. Теоретическая модель газовой оболочки ледяного небесного тела (Шематович, 2006; 2008; Shematovich и др., 2005), построенная с учетом процес-

сов радиолиза ледяной поверхности, может использоваться для интерпретации результатов измерений состава нейтральных и заряженных компонент в разреженных атмосферах галилеевых спутников Юпитера, выполненных космическим аппаратом Galileo в системе Юпитера, полученных недавно новых измерений при помощи космического аппарата Cassini в составе экзосферы и ионосфер ледяных спутников в системе Сатурна, а также ожидаемых результатов измерений химического многообразия в коме и на поверхности ядра кометы Чурюмова–Герасименко при помощи космического аппарата ESA Rosetta и в системе Плутон–Харон при помощи космического аппарата NASA New Horizons.

Одним из важнейших процессов радиолиза ледяных поверхностей небесных тел является процесс распыления ледяной поверхности плазмой из магнитосферы и/или солнечного ветра (Sieveka и др., 1982; Johnson, 2008). Планеты-гиганты обладают протяженными магнитосферами, соответственно кольца и спутники, образующие системы таких планет, непосредственно погружены в магнитосферную плазму, поддерживаемую вращающимся магнитным полем планеты. Следовательно, поверхности ледяных спутников и ледяных частиц колец подвержены как воздействию магнитосферных ионов и электронов с высокими энергиями, так и облучению солнечным УФ-излучением. Одним из наблюдаемых проявлений данных воздействий на ледяные поверхности небесных тел является образование газовых оболочек, обычно весьма разреженных из-за малого гравитационного поля рассматриваемых небесных тел. Лабораторные данные показывают, что молекулы O_2 и H_2 непосредственно образуются при воздействии плазмы и УФ-излучения на водяной лед (Brown и др., 1982; Westley и др., 1995), что известно как процесс радиолиза водяного льда плазмой и излучением (Johnson, 2004).

В данной статье рассматривается процесс распыления поверхности под воздействием ионов H^+ , так как они являются основной компонентой ионизирующего облучения, достигающего поверхности безатмосферных космических тел. Данный процесс был изучен экспериментально (Pedrys и др., 1987; Johnson и др., 1990; Baragiola и др., 2003) и теоретически (Cassidy и др., 2005; Dukes и др., 2011) для различных мишеней и типов ионного излучения (H^+ , He^+), в том числе для объектов Солнечной системы (спутники Юпитера, Сатурна, Луна и др.).

Развитие столкновительных каскадов и распыление атомов и молекул с поверхности твердых тел изучались с помощью аналитических расчетов (Leroige и др., 1983; Reimann и др., 1984; Schou и др., 1995; 2001) и методами компьютерного моделирования (Taglauer и др., 1976; Biersack и др., 1978; Eckstein, 2007) для случаев аморфных и кристаллических твердых тел. При использовании аналитических ме-

тодов с помощью теории переноса Больцмана вычисляют средние величины коэффициентов распыления, а компьютерное моделирование позволяет проследить траектории отдельных частиц в твердых телах. Результаты обоих приближений хорошо согласуются между собой, если в них используются одни и те же предположения (например, механизмы распыления: выбивание, линейные или нелнейные каскады и т.д.).

Эксперименты показали, что распыление атомов и молекул с поверхности под воздействием ионов H , He зависит от многих параметров (Schou и др., 2001; Barghouthy и др., 2011), таких как: энергия ударяющих ионов, их масса, угол падения, температура поверхности и др. Кроме того, большинство выбитых из решетки атомов и молекул реагирует с соседними атомами и напрямую не выходят с поверхности мишени (Johnson, 1989; Cassidy и др., 2010). Столкнувшись с другими атомами мишени, выбитые продукты могут затем десорбировать или даже вступать в химические реакции.

Распыление атомов и молекул с ледяных поверхностей под воздействием ионов H , He и O может происходить под влиянием как упругих, так и неупругих (электронных) процессов (Lanzerotti и др., 1978; Brown и др., 1982; Bringa и др., 1995). Как впервые было показано в работе (Johnson и др., 1980) процесс электронного распыления связан с десорбцией с поверхности и радиолизом льда. Также было обнаружено, что выход атомов и молекул с поверхности в связи с этим может быть очень большим (до $1000 H_2O/ион$ для $100 кэВ O^+$). При низких температурах ($<110 K$) доминирующей компонентой в суммарном выходе являются молекулы H_2O , но с увеличением температуры начинают преобладать молекулы H_2 и O_2 . В работе Baragiola (2003) показано, что коэффициенты распыления молекул H_2O для ионов H^+ , He^+ , Ar^+ и O^+ с энергией $30 кэВ$ не зависят от температур льда в диапазоне $60–100 K$ и полный коэффициент распыления поверхности протонами не зависит от плотности потока H^+ в диапазоне до $10^{16} ат/см^2$.

Эффекты изотопного перераспределения, происходящие в процессе распыления мало исследованы. Однако существует фундаментальная проблема изотопных аномалий на поверхности метеоритов, спутников планет и других космических тел, которые могут быть вызваны различными процессами на поверхностях этих тел. Одним из процессов, приводящих к изотопному перераспределению, может быть распыление под воздействием ионного облучения.

В последнее время было предложено и усовершенствованно множество аналитических уравнений и моделей, позволяющих рассчитывать коэффициенты распыления для различных пар ион-мишень, каждая из которых имеет свои достоинства и недостатки (Sigmund и др., 1969; Yamamura и др., 1983; Fama и др., 2008).

Задачей данного исследования является выбор наиболее точных моделей для расчета коэффициентов распыления льда и моделирование с их помощью эффектов перераспределения изотопов Н и О в процессе распыления ледяных поверхностей под воздействием ионов Н⁺. В качестве космического объекта для моделирования были выбраны спутники Юпитера, для которых известны спектры облучения поверхностей космической плазмой.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСПЫЛЕНИЯ ЛЕДЯНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Принято считать, что распыление твердых тел ионами происходит вследствие 3-х основных механизмов: прямого выбивания атомов мишени ионами, линейных каскадов атомных столкновений и нелинейных каскадов или термических пиков (Мартыненко, 1982; Бериш, 1984). Для большинства ионов с энергиями до 10–50 кэВ и массами до 60 а. е. м. каскадный механизм является основным. Теория каскадного механизма показывает, что коэффициент распыления пропорционален потере энергии E ионом на единицу пройденного расстояния при упругих столкновениях с атомами мишени вблизи поверхности (dE/dx) (Бериш, 1984). При этом распылять могут: входящий ион; выходящий, отраженный ион; первичный смещенный атом; вторичный смещенный атом. При бомбардировке тяжелыми или молекулярными ионами, когда велика плотность выделенной энергии (dE/dx)_n, распыление определяется режимом нелинейных каскадов. Коэффициент распыления $Y = Y(Z_i, a, M_i, a, E, \theta, U)$ зависит от следующих характеристик распыляющих ионов: атомный номер Z_i (число электронов в атоме), масса M_i (масса всех протонов и нейтронов в ядре атома), энергия налетающего иона E , угол падения на мишень θ ; следующих характеристик атомов материала мишени: атомный номер Z_a , масса M_a , энергия связи поверхностных атомов U .

Для теоретических расчетов коэффициентов распыления молекул водяного льда, а также атомов Н, О и их изотопов Н и D, ¹⁸О и ¹⁶О используются следующие модели:

Линейная каскадная модель А (Sigmund и др., 1969)

$$Y(E) = \frac{0.04}{U} \alpha(M_i/M_i) S_n(E), \quad (1)$$

где S_n – функция энергетических ядерных потерь (Berger, Seltrre, 1964), $\alpha(M_i/M_i)$ – функция, зависящая от соотношения массы атома мишени к массе налетающего иона.

Модель А не учитывает влияние температуры поверхности, функцию энергетических электронных потерь на коэффициент распыления. Предназначена для моноатомных мишеней.

Модель В (Yamaturo и др., 1983)

$$Y(E) = \frac{0.04}{U} \alpha(M_i/M_i) Q S_n(E) \left[1 - \left(\frac{E_{th}}{E} \right)^{0.5} \right]^2, \quad (2)$$

$$Q = \frac{q_T}{1 + S_e(\epsilon)}, \quad (3)$$

где S_e – функция энергетических электронных потерь (Berger, Seltrre, 1964), E_{th} – пороговая энергия распыления атомов в мишени, q_T – заряд мишени.

Модель В является модификацией модели А и учитывает функцию энергетических электронных потерь, а также включает в себя некоторые поправочные эмпирические коэффициенты и так называемую пороговую энергию распыления. Возможно использование для большого количества пар ион-мишень. Для использования на многокомпонентных мишенях необходимо вносить некоторые поправки для получения корректных значений. Не учитывается температура поверхности мишени.

Модель С (Fata и др., 2008)

$$Y(E) = \frac{1}{U} \left[\left(\frac{3}{4\pi^2 C_0} \right) \alpha S_n + \eta S_e^2 \right] \left[1 + \frac{Y_1}{Y_0} e^{-E_a/kT} \right] \cos^{-f}(\theta), \quad (4)$$

где α , η , Y_0 , Y_1 , C_0 , f – эмпирические параметры, зависящие от состава мишени (Johnson и др. 2008), θ – угол падения налетающих ионов, E_a – энергия активации, T – температура поверхности, k – константа Больцмана скорости химической реакции.

Модель С разработана специально для ледяных поверхностей (пары ион-лед) с большим количеством эмпирических коэффициентов, что усложняет ее использование для различных пар ион-мишень.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Сравнение и проверка на устойчивость моделей А, В и С

Для сравнения и проверки на устойчивость к вариациям параметров рассмотренных выше моделей разработана программа на MATLAB с использованием метода бутстрэп (Диаконис, Эфрон, 1983). Данный метод позволяет просто и быстро оценивать самые разные статистики (доверительные интервалы, дисперсию, корреляцию и так далее) для сложных моделей. Суть метода состоит в том, чтобы из имеющейся выборки сформировать достаточно большое количество псевдовыборок, размер каждой из которых совпадает с исходной, состоящих из случайных комбинаций исходного набора, и для каждой полученной псевдовыборки

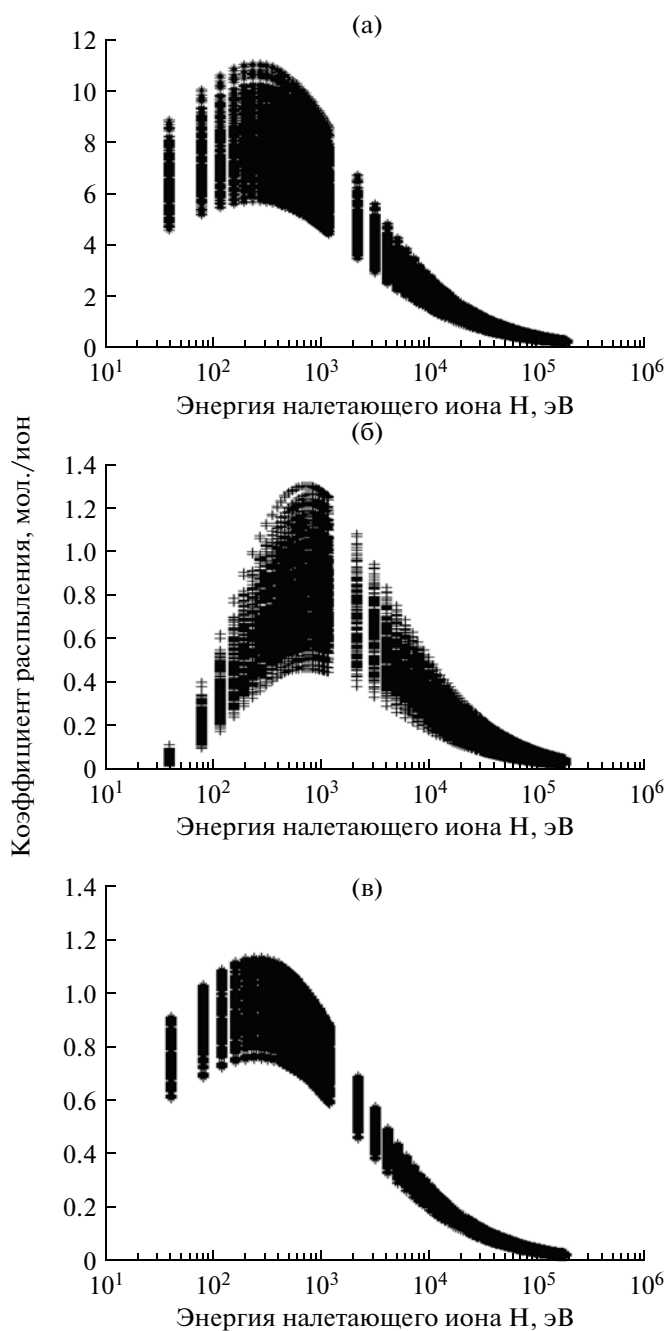


Рис. 1. Результаты расчетов зависимости коэффициента распыления льда ($\rho = 0.94 \text{ г/см}^3$, $T = 80 \text{ К}$) от энергии налетающих ионов H^+ , для различных вариаций параметров моделей А(а), В(б) и С(в) в диапазоне 20%.

определить значения анализируемых статистических характеристик с целью изучить их разброс, устойчивость.

Варьируемыми параметрами в моделях являлись все эмпирические константы (α , η , C_0 , Y_1 , Y_2), энергия связи поверхностных атомов U и пороговая энергия распыления атомов в мишени E_{Th} , а также некоторые константы, входящие в формулы для

расчетов S_e , S_n . Относительный диапазон варьирования параметров был выбран равным 20% от величины, что оптимально для проверки на устойчивость и расчета доверительных интервалов. Варьирование параметров произведено равномерно на отрезке $X \pm \pm 0.2 X$ с помощью встроенной в MATLAB функции случайных чисел, где X – выбранный параметр.

На основании проведенного выше моделирования показано, что наиболее точной, и в то же время наиболее устойчивой к варьированию параметров является модель С (рис. 1, табл. 1). Видно, что модель А дает сильно завышенные результаты, хотя максимум распределения и его вид совпадает с расчетами по модели С. Результаты расчета по модели В сдвинуты по оси энергии в большую сторону. Разность между средним и минимальным, максимальным и средним значениями в соответствующих выборках равны ± 37 , ± 32 и $\pm 20\%$ для моделей А, В и С, соответственно.

Модель С, используемая в последних работах (Johnson и др., 2003; Plainaki и др., 2011) позволяет с хорошей точностью рассчитывать коэффициенты распыления молекул воды с ледяных поверхностей, но ее применение ограничено составом мишени.

С помощью разработанной авторами программы возможно нахождение различных поправочных коэффициентов (например α , η , C_0), в зависимости от состава мишени и налетающего иона, с использованием верификации модели и экспериментальных данных.

Полученные в работе коэффициенты распыления поверхности льда под воздействием потока H^+ представлены в табл. 1 и на рис. 2. Как следует из табл. 1, расчетные данные для модели С в пределах погрешностей хорошо согласуются с данными лабораторных измерений (Baragiola и др., 2003; Johnson и др., 2003).

Для моделирования в качестве объекта был выбран чистый лед. Но, как известно, ледяные спутники имеют на поверхности не чистый лед, а пористый ледяной реголит, загрязненный метеоритным материалом. Использование загрязненного ледяного реголита при моделировании коэффициентов распыления повлияет на конечный результат.

Также проведено моделирование влияния температуры ледовой поверхности на коэффициент распыления под воздействием H^+ . Показано, что в интервале температур 40–100 К никаких изменений величины коэффициента распыления не происходит. При дальнейшем увеличении температуры поверхности, увеличивается и коэффициент распыления. В максимуме распределения при $T = 40\text{--}100 \text{ К}$ коэффициент распыления $Y(E = 200 \text{ эВ}) = 0.87 \text{ H}_2\text{O/ион}$, при $T = 200 \text{ К} = 1.08 \text{ H}_2\text{O/ион}$ (табл. 2, рис. 3).

Таблица 1. Коэффициенты распыления молекул воды с ледяной поверхности ($\rho = 0.94 \text{ г/см}^3$, $T = 80 \text{ К}$) под воздействием ионов H^+

$E_{\text{налет. иона}}, \text{ эВ}$	Модель А	Модель В	Модель С	Johnson и др., (2003)
50	7 ± 3	0.2 ± 0.1	0.7 ± 0.2	0.7
100	9 ± 4	0.3 ± 0.1	0.8 ± 0.2	0.8
200	11 ± 4	0.6 ± 0.2	0.9 ± 0.2	0.9
500	10 ± 4	0.8 ± 0.3	0.8 ± 0.2	0.8
1000	7 ± 3	0.9 ± 0.3	0.7 ± 0.1	0.7
2000	6 ± 2	0.6 ± 0.2	0.5 ± 0.1	0.5
5000	3 ± 1	0.3 ± 0.1	0.3 ± 0.1	

Таблица 2. Коэффициенты распыления молекул воды с ледяной поверхности под воздействием ионов H^+ в зависимости от T поверхности, рассчитанные по модели С

$E_{\text{налет. иона}}, \text{ эВ}$	$T = 40\text{--}100 \text{ К}$	$T = 120 \text{ К}$	$T = 140 \text{ К}$	$T = 160 \text{ К}$	$T = 180 \text{ К}$	$T = 200 \text{ К}$
50	0.7 ± 0.2	0.7 ± 0.2	0.8 ± 0.2	0.8 ± 0.2	0.8 ± 0.2	0.8 ± 0.2
200	0.9 ± 0.2	0.9 ± 0.2	0.9 ± 0.2	0.9 ± 0.2	1.0 ± 0.2	1.1 ± 0.2
500	0.8 ± 0.2	0.8 ± 0.2	0.8 ± 0.2	0.9 ± 0.2	0.9 ± 0.2	1.0 ± 0.2
1000	0.7 ± 0.1	0.7 ± 0.1	0.8 ± 0.1	0.8 ± 0.1	0.8 ± 0.1	0.9 ± 0.2
5000	0.3 ± 0.1	0.3 ± 0.1	0.3 ± 0.1	0.4 ± 0.1	0.4 ± 0.1	0.4 ± 0.1

Распределение по кинетической энергии распыленных молекул H_2O и атомов H , O с ледяной поверхности под воздействием потока ионов H^+

Распределение паров воды и других молекулярных продуктов радиолитической поверхности ледяного спутника в образующейся разреженной газовой оболочке определяется из баланса скоростей образования в процессе фотолиза и потери за счет про-

цессов убегания из атмосферы, ионизации и захвата новых ионов магнитосферной плазмой, перезарядки с высокоэнергетичными ионами коротационной магнитосферной плазмы и абсорбции нейтральных молекул обратно на поверхность ледяного спутника (Shematovich и др., 2005; Шематович, 2006). Доступны лишь данные нескольких лабораторных измерений энергетических спектров молекул воды при ионном распылении ледяных поверхностей

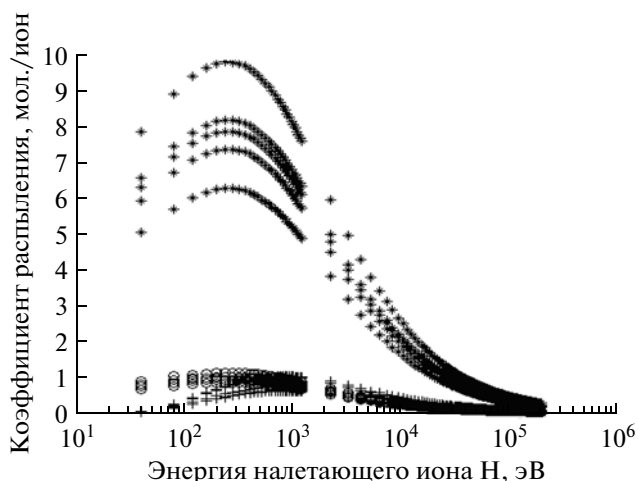


Рис. 2. Коэффициенты распыления молекул H_2O с ледяной поверхности под воздействием потока H^+ : по моделям А(*), В(+), С(о).

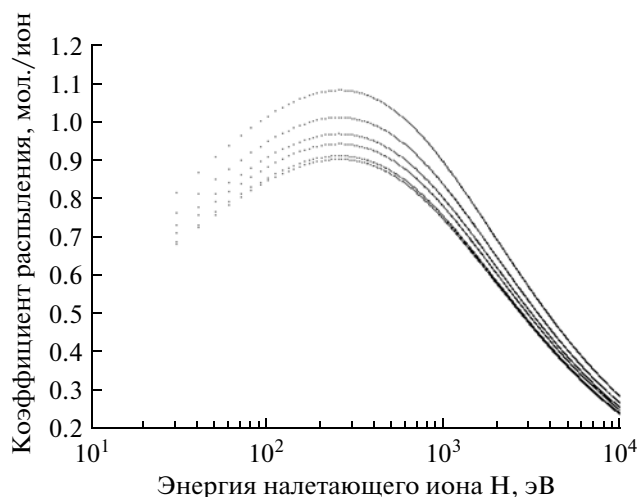


Рис. 3. Влияние температуры ($T = 40\text{--}200 \text{ К}$ с шагом 20 К) ледовой поверхности на коэффициент распыления под воздействием H^+ (нижняя кривая соответствует диапазону температур $40\text{--}100 \text{ К}$, верхняя – $T = 200 \text{ К}$).

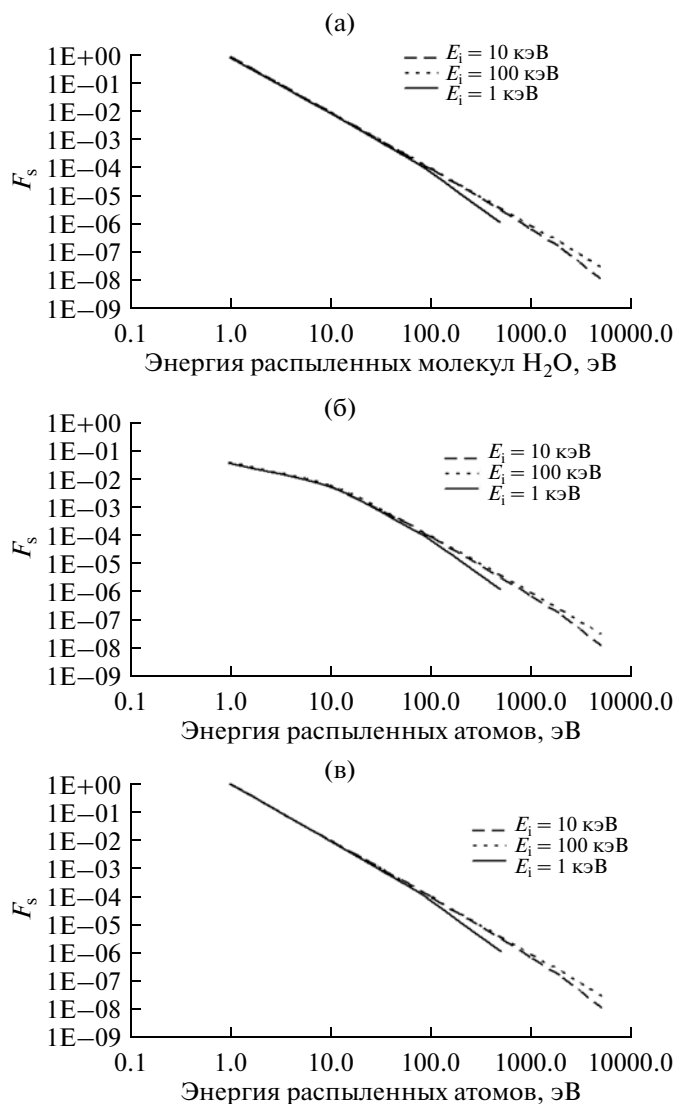


Рис. 4. Распределение по кинетической энергии распыленных молекул H_2O (а) и атомов H (б), O (в) с ледяной поверхности спутников Юпитера под потоком ионов H^+ . F_s – выход атомов H , O и молекул H_2O ; $U_{\text{H}} = 2$ кэВ, $U_{\text{O}} = 0.02$ кэВ, $U_{\text{H}_2\text{O}} = 0.055$ эВ; E_i (энергия налетающего иона H^+) = 1, 10, 100 кэВ.

(Johnson, 1990; 1998). Эти спектры характеризуются преимущественно термализованным ядром в области низких кинетических энергий, так как процесс разбрызгивания замороженных молекулярных твердых тел в основном определяется иницируемой проникающим ионом химией твердого тела (так называемым радиолизом льда) (Johnson и др., 2003), дополненным нетепловым распределением в области высоких кинетических энергий.

Распределения по энергии выбрасываемых в атмосферу молекул воды за счет источников на поверхности приближаются степенным распределением при разбрызгивании ледяной поверх-

ности магнитосферными ионами с высокими кинетическими энергиями

$$F_{\text{H}_2\text{O}}(E, \theta) \sim \frac{2EU_{\text{H}_2\text{O}}}{(E + U_{\text{H}_2\text{O}})^3} \cos \theta, \quad (5a)$$

где E это кинетическая энергия свежей молекулы воды, θ – угол, под которым молекула покидает поверхность, а константа $U_{\text{H}_2\text{O}} = 0.055$ эВ (Johnson, 1990). Такое распределение обычно используется для глобального источника, равномерно распределенного по поверхности ледяного спутника, например, вызванного радиолизом ледяной поверхности. Лабораторные измерения показывают, что при бомбардировке ледяной поверхности тяжелыми ионами молекулы O_2 выбиваются из поверхности со следующим распределением с константой $U_{\text{O}_2} = 0.015$ эВ (Johnson, 1990)

$$F_{\text{O}_2}(E, \theta) \sim \frac{U_{\text{O}_2}}{(E + U_{\text{O}_2})^2} \cos \theta, \quad (5б)$$

На основе рассмотренного выше, нами было смоделировано распределение по кинетической энергии распыленных молекул H_2O и атомов H , O с ледяной поверхности под воздействием потока ионов H^+ (рис. 4).

Показано (рис. 4), что F_s (выход молекул H_2O) не зависит от энергии налетающего иона при $E_{\text{H}_2\text{O}} < 100$ эВ, а также стремится к 0 при $E_{\text{H}_2\text{O}} > > 10$ кэВ. Результаты сопоставимы с данными, полученными в работе (Plainiki и др., 2011).

Расчеты распределения по кинетической энергии распыленных молекул H_2O и атомов H и O с ледяной поверхности спутников Юпитера под потоком ионов H^+ (рис. 4) будут использованы при моделировании изотопного состава экзосферы спутников Юпитера в процессе распыления.

Коэффициенты распыления атомов H , O и их изотопов H и D , ^{18}O и ^{16}O

Рассчитаны коэффициенты распыления атомов H , O и их изотопов H и D , ^{18}O и ^{16}O за 1 секунду с 1 cm^2 ледяных поверхностей спутников Юпитера: Европа, Ганимед и Каллисто (рис. 5, табл. 3). Для расчета сделано предположение об исходном изотопном соотношении водорода (D/H) и кислорода ($^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$) на поверхности спутников Юпитера на основе данных (Vagenal и др., 2004; Кусков и др., 2009), которые равны $1-3 \times 10^{-5}$ и $0.15-0.25$ соответственно для каждого спутника и выбрано среднее значение для каждого из интервалов. В данных расчетах использовались характеристики льда ($\rho = 0.94$, $T = 80$ К), как наиболее подходящего для моделирования поверхности спутников Юпитера.

Соотношения коэффициентов распыления $Y(\text{D})/Y(\text{H})$ и $Y(^{18}\text{O})/Y(^{16}\text{O})$ эквивалентны соотношениям концентраций покидающих поверхность изо-

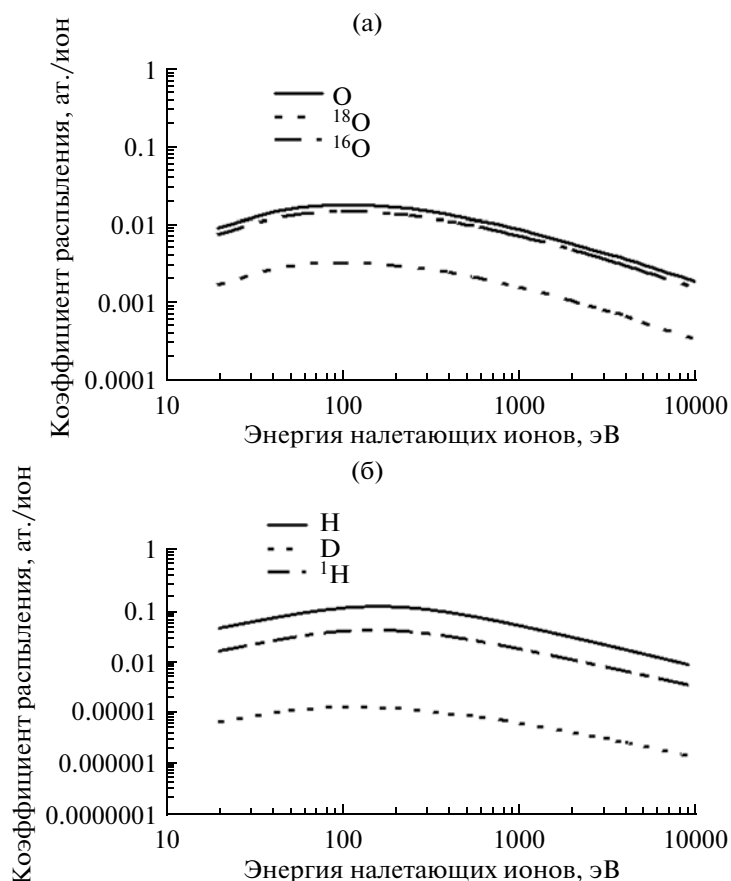


Рис. 5. Коэффициенты распыления атомов Н, О и их изотопов Н и D, ¹⁸О и ¹⁶О с 1 см² ледяной поверхности спутников Юпитера за 1 с в зависимости от энергии налетающего иона Н⁺: (а) О; (б) Н.

топов и атомов в процессе распыления $C(D)/C(H)$ и $C(^{18}O)/C(^{16}O)$, на основании $C(D) = FY(D)$, $C(H) = FY(H)$, где F – плотность налетающего потока ионов. Для спутников Юпитера при исходном изотопном соотношении на поверхности $D/H = 2 \times 10^{-5}$ и $^{18}O/^{16}O = 0.22$ равны $(1.7 \pm 0.3) \times 10^{-5}$ и 0.18 ± 0.03 соответственно по модели С (табл. 3). Полученные соотношения отличаются от исходных изотопных на поверхности и, при умножении на плотность потока налетающих ионов Н, показывают суммарный выход с поверхности изотопов Н, D и ¹⁸О, ¹⁶О. Это отличие значимое и может приводить к перераспределению изотопов на поверхности спутников Юпитера. Основной проблемой для расчета коэффициентов распыления изотопов Н, О с ледяных поверхностей спутников Юпитера, требующей дальнейшего обсуждения, является отсутствие экспериментальных данных по величине плотности потока облучающих поверхность ионов Н⁺ с энергиями от нескольких эВ до 20кэВ. Поэтому мы вынуждены использовать литературные данные и для расчетов вычислять среднее значение интересующего нас параметра. Следует заметить, что такие допущения приводят к увеличению погрешности конечных результатов в зависимости от величины диапазона варьирования параметра.

Изотопное перераспределение на поверхности в процессе распыления

На основании рассчитанных нами коэффициентов распыления атомов Н, О и их изотопов Н и D, ¹⁸О и ¹⁶О с 1 см² ледяной поверхности спутников Юпитера за 1 с в зависимости от энергии налетающего иона Н⁺ (табл. 3) разработана модель изотопного перераспределения водорода на ледяных поверхностях в процессе распыления во времени.

Таблица 3. Коэффициенты распыления изотопов Н и D, ¹⁸О и ¹⁶О с ледовой поверхности спутника Европа под воздействием Н⁺ (по модели С)

$E_{\text{налет. иона}}, \text{эВ}$	Н	D	¹⁶ О	¹⁸ О
50	0.13	2.32E-06	0.03	0.007
100	0.12	2.24E-06	0.03	0.006
500	0.06	1.17E-06	0.02	0.003
1000	0.05	8.51E-07	0.01	0.002
5000	0.02	2.86E-07	0.004	0.0008
10000	0.01	1.79E-07	0.002	0.0005

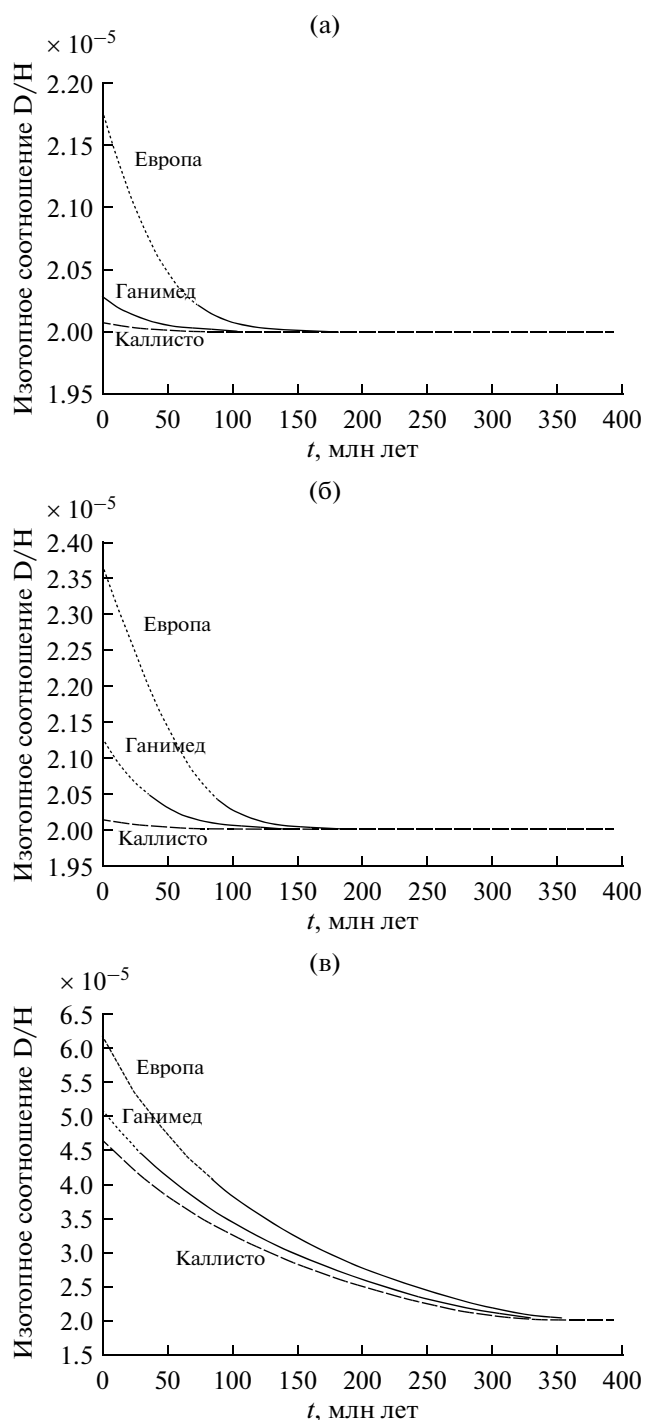


Рис. 6. Формирование изотопного соотношения D/H на поверхности спутников Юпитера во времени в зависимости от величины плотности потока налетающих ионов H^+ . Конечной точкой является изотопное соотношение равное 2×10^{-5} (Кусков и др., 2009): (а) – минимально возможная величина плотности потока H^+ для Европы $(6.9 \pm 0.9) \times 10^3$ ат./см² с, Ганимеда – $(2.1 \pm 0.2) \times 10^3$ ат./см² с, Каллисто – $(0.4 \pm 0.1) \times 10^3$ ат./см² с; (б) – оптимальная величина $(8.8 \pm 0.9) \times 10^4$, $(1.8 \pm 0.2) \times 10^4$, $(0.7 \pm 0.1) \times 10^4$ ат./см² с; (в) – максимальная величина $(9.2 \pm 0.9) \times 10^5$, $(2.3 \pm 0.2) \times 10^5$, $(0.9 \pm 0.1) \times 10^5$ ат./см² с (Соорег и др., 2001).

Экспериментальные данные величин плотностей потоков H^+ , полученные КА Galileo (Соорег и др., 2001), лежат в интервале от 30 кэВ до нескольких ГэВ, но, как показали наши расчеты, основное распыление поверхности под воздействием H^+ происходит в интервале низких энергий налетающих ионов в диапазоне от нескольких эВ до 10–20 кэВ. Поэтому, на основании поведения схожих по своей природе с энергетическими спектрами облучения поверхностей спутников Юпитера других энергетических спектров, сделано предположение, что функция зависимости плотности потока налетающих ионов H^+ от их энергии имеет максимум в интервале 1–10 кэВ и его численное значение равно $(8.8 \pm 0.9) \times 10^4$ ат./см² с для спутника Европа, $(1.8 \pm 0.2) \times 10^4$ ат./см² с для Ганимеда и $(0.7 \pm 0.1) \times 10^4$ ат./см² с для Каллисто.

Показано (рис. 6), что процесс распыления поверхности спутников Юпитера под воздействием ионов H^+ может приводить к изменению изотопного соотношения на его поверхности и сильно зависит от плотности потока налетающих ионов H^+ . Чем больше величина плотности потока, тем больше времени требуется для установления динамического равновесия между процессом распыления и процессом имплантации. В этом случае количества распыленного и имплантируемого веществ равны, а изотопное соотношение D/H остается постоянным. Так, для спутника Европа, при оптимальном значении плотности потока $(8.8 \pm 0.9) \times 10^4$ ат./см² с расчетное изотопное соотношение D/H 400 млн. лет назад было равно 2.4×10^{-5} , минимальном значении $(6.9 \pm 0.9) \times 10^3$ ат./см² с – 2.2×10^{-5} , максимальном значении $(9.2 \pm 0.9) \times 10^5$ ат./см² с – 6.2×10^{-5} ; для Ганимеда – 2.1×10^{-5} , 2×10^{-5} , 5.1×10^{-5} ; для Каллисто – 2×10^{-5} , 2×10^{-5} , 4.6×10^{-5} .

Показано, что значимое изменение изотопного соотношения D/H на поверхности спутников Юпитера происходит при выбранной максимальной величине плотности потока налетающих ионов для всех спутников. При оптимальной величине плотности потока изменение происходит только для спутника Европа. При минимальной – все расчетные значения лежат в области погрешностей вычислений.

Использование модели изотопного перераспределения водорода на поверхности спутников Юпитера во времени в процессе распыления позволяет проследить динамику формирования и изменения изотопного состава H, O на поверхности под воздействием ионов H^+ . Однако наше предположение о величине плотности потока ионов H^+ , достигающих поверхности спутников Юпитера, ввиду отсутствия экспериментальных данных в диапазоне энергий от нескольких эВ до 50 кэВ (Соорег и др., 2001) должно быть предметом дальнейшего изучения.

Таблица 4. Расчетное изотопное соотношение D/H на поверхности спутников Юпитера в зависимости от величины плотности потока облучаемых ионов H⁺

	Расчетное изотопное соотношение D/H на поверхности спутников Юпитера		
	Европа	Ганимед	Каллисто
Минимальный поток	2.2×10^{-5}	2×10^{-5}	2×10^{-5}
Оптимальный поток	2.4×10^{-5}	2.1×10^{-5}	2×10^{-5}
Максимальный поток	6.2×10^{-5}	5.1×10^{-5}	4.6×10^{-5}

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью компьютерного моделирования проведено теоретическое исследование зависимости процесса распыления ледяных поверхностей, в приложении к спутникам Юпитера, от параметров налетающего иона (E , M_i , Z_i , F_i) и параметров мишени (M_t , Z_t , ρ_t , T), а также влияние данного процесса на перераспределение изотопов на поверхности спутников Юпитера. Расчеты выполнялись с помощью моделирования процесса распыления вещества с поверхности твердых тел под воздействием облучения ионами, рассмотренных выше:

- Программа на MATLAB позволила провести статистический анализ существующих моделей для расчета коэффициентов распыления ледяных поверхностей под воздействием ионов H⁺, а также получить численные значения коэффициентов распыления в широком диапазоне энергии и их доверительные интервалы (рис. 1 и 2). Наименее чувствительной к вариации параметров является модель С (Fama и др., 2008) с рассчитанным доверительным интервалом $\pm 20\%$.

- Рассчитаны коэффициенты распыления льда ($p = 0.94$) под воздействием ионов H⁺ в диапазоне энергии от нескольких эВ до 10 кэВ (табл. 1) и проведена верификация полученных результатов с экспериментальными данными. Показано, что максимальный коэффициент распыления равен $0.9 \text{ H}_2\text{O}/\text{ион}$ при энергии налетающих ионов H⁺ 200 эВ.

- Моделирование зависимости коэффициентов распыления молекул H₂O от температуры ледовой поверхности (табл. 2; рис. 3) показало, что в интервале температур 40–100 К никаких изменений величины коэффициента распыления не происходит. При дальнейшем увеличении температуры поверхности, увеличивается и коэффициент распыления. В максимуме распределения при $T = 40\text{--}100 \text{ K}$ коэффициент распыления $Y(E = 200 \text{ эВ}) = 0.9 \text{ H}_2\text{O}/\text{ион}$, при $T = 200 \text{ K} - 1.1 \text{ H}_2\text{O}/\text{ион}$.

- Проведено моделирование распределения по кинетической энергии распыленных молекул H₂O и атомов H, O (рис. 4) в диапазоне энергий налетающих ионов H⁺ 1–100 кэВ. Полученные результаты могут быть использованы для моделирования изменения изотопного состава экзосферы спутников Юпитера в процессе распыления.

- Рассчитанные коэффициенты распыления изотопов H, D и ¹⁸O, ¹⁶O с поверхности для спутников Юпитера (Европа, Ганимед, Каллисто) под воздействием ионов H⁺ в диапазоне энергии от нескольких эВ до 10 кэВ (рис. 5; табл. 3) равны $(1.7 \pm 0.3) \times 10^{-5}$ и 0.18 ± 0.03 соответственно. Полученные соотношения отличаются от исходных изотопных на поверхности спутников Юпитера. Установлено, что это отличие значимое и может приводить к перераспределению изотопов на поверхности спутников Юпитера.

- Разработана модель перераспределения изотопов водорода (H, D) и кислорода (¹⁸O, ¹⁶O) во времени в процессе распыления поверхностей спутников Юпитера под воздействием ионов H⁺ в зависимости от их плотности потока. Это позволило проследить динамику формирования и изменения изотопного состава ледяных поверхностей (табл. 4; рис. 6). Показано, что изменение изотопного соотношения на поверхности спутников Юпитера зависит от величины плотности потока облучаемых ионов. Значимые изменения изотопного соотношения D/H на поверхности спутников Юпитера происходят при выбранной максимальной величине плотности потока налетающих ионов для всех спутников. При оптимальной величине плотности потока изменение происходит только для спутника Европа. При минимальной – все расчетные значения лежат в области погрешностей вычислений.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 13-02-00642а и 14-02-00838а), Программы Президиума РАН №22 “Фундаментальные проблемы исследований и освоения Солнечной системы” и гранта ведущей научной школы НШ-3620.2014.2.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Бершиш Р. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. М.: Мир, 1984. 336 с.
- Диаконис П., Эфрон Б. Статистические методы с интенсивным использованием ЭВМ // В мире науки. 1983. Т. 7. С. 81–92.
- Кусков О.Л., Дорофеева В.А., Кронрод В.А., Макалкин А.Б. Системы Юпитера и Сатурна: Формирование, состав и внутреннее строение. 2009. М.: ЛКИ, 2009. 478 с.

- Мартыненко Ю.В.* Взаимодействие плазмы с поверхностью // Итоги науки и техники. Сер. Физика плазмы. М.: ВИНТИ, 1982. Т. 3. С. 119–173.
- Шематович В.И.* Стохастические модели горячих планетных и спутниковых корон: атомарный кислород в короне Европы // Астрон. вест. 2006. Т. 40. № 3. С. 195–212. (*Shematovich V.I.* Stochastic models of hot planetary and satellite coronas: Atomic oxygen in Europa's corona // Sol. Syst. Res. 2006. Т. 40. № 3. С. 175–191).
- Шематович В.И.* Химия ионизации в H₂O-доминантных атмосферах ледяных спутников // Астрон. вестн. 2008. Т. 42. № 6. С. 505–520. (*Shematovich V.I.* Ionization chemistry in H₂O-dominated atmospheres of icy moons // Sol. Syst. Res. 2008. Т. 42. № 6. С. 473–487).
- Bagenal F., Dowling T., McKinnon W.* Jupiter: The planet, satellites and magnetosphere // Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2004. P. 748.
- Baragiola R.A., Vidal R.A., Svendsen W., Schou J., Shi M., Bahr D.A., Ateberry C.L.* Sputtering of water ice // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. 2003. V. 209. P. 294–303.
- Barghouty A.F., Meyer F.W., Harris P.R., Adams Jr.J.H.* Solar-wind protons and heavy ions sputtering of lunar surface materials // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. 2011. V. 269. P. 1310–1315.
- Berger M.J., Seltzer S.M.* Tables of energy losses and ranges of electrons and positrons // NASA Publication SP-3012. 1964.
- Biersack J.P., Kaczerowski W., Ney J., Rahim B.K.H., Riccato A., Thacker G.R., Uecker H.* Simulation of 14 MeV neutrons by protons of higher energies // J. Nucl. Mater. 1978. V. 76/77. P. 640.
- Bringa E.M., Johnson R.E., Jakas M.* Molecular-dynamics simulation of electronic sputtering // Phys. Rev. 1995. V. 60. P. 15107–15116.
- Brown W.L., Augustyniak W.M., Simmons E., Marcantonio K.J., Lanzerotti L.J., Johnson R.E., Boring J.W., Reimann C.T., Foti G., Pirronello V.* Erosion and molecular formation in condensed gas films by electronic energy loss of fast ions // Nucl. Instrum. Methods. 1982. V. 198. P. 1–8.
- Cassidy T.A., Johnson R.E.* Monte Carlo model of sputtering and other ejection processes within a regolith // Icarus. 2005. V. 176. P. 499–507.
- Cassidy T., Coll P., Raulin F., Carlson R.W., Johnson R.E., Loeffler M.J., Hand K.H., Baragiola R.A.* Radiolysis and photolysis of icy satellite surfaces: experiments and theory // Space Sci. Rev. 2010. V. 115. P. 299–315. DOI:10.1007/s11214-009-9625-3.
- Cooper J.F., Johnson R.E., Mauk B.H., Garrett H.B., Gehrels N.* Energetic ion and electron irradiation of the Icy Galilean Satellites // Icarus. 2001. V. 149. P. 133–159.
- Dukes C.A., Chang W.-Y., Fama M., Baragiola R.A.* Laboratory studies on the sputtering contribution to the sodium atmospheres of Mercury and the Moon // Icarus. 2011. V. 212. P. 463–469.
- Eckstein W.* Sputtering by Particle Bombardment // Topics in Applied Physics. 2007. V. 110. P. 33–187.
- Fama M., Shi J., Baragiola R.A.* Sputtering of ice by low-energy ions // Surf. Sci. 2008. V. 602. P. 156–161.
- Johnson R.E., Sittler E.C.* Sputter-produced plasma as a measure of satellite surface composition: The Cassini mission // Geophys. Res. Lett. 1980. V. 17. P. 1629–1632.
- Johnson R.E.* Electronic sputtering: Angular and charge-state dependence of the yield via superposition // J. Phys. Colloq. 1989. Т. 50. P. 251–257.
- Johnson R.E.* Energetic charged particle interaction with atmospheres and surfaces. New York: Springer-Verlag. 1990. P. 344.
- Johnson R.E.* Sputtering and desorption from icy surfaces // Sol. Syst. Ices. Dordrecht. WCAP. Astrophys. And Space Sci. Library. 1998. P. 303–331.
- Johnson R.E., Quickenden T.I., Cooper P.D., et al.* The production of oxidants in Europa's surface // Astrobiology. 2003. V. 3. P. 823–850.
- Johnson R.E.* The magnetospheric plasma-driven evolution of satellite atmospheres // Astrophys. J. 2004. V. 609. P. 99–102.
- Johnson R.E., Carlson R.W., Cooper J.F., Paranicas C., Moore M.H., Wong M.C.* Radiation effects on the surface of the Galilean satellites // Jupiter-the planet, satellites and magnetosphere / Eds Bagenal F., Dowling T., McKinnon W.B. Cambridge: Cambridge Univ. Press., 2004. P. 485–512. Chapter 20.
- Johnson R.E., Fama M., Liu M., Baragiola R.A., Sittler E.C. Jr., Smith H.T.* Sputtering of ice grains and icy satellites in Saturn's inner magnetosphere // Planet and Space Sci. 2008. V. 56. P. 1238–1243.
- Lanzerotti L.J., Brown W.L., Poate J.M., Augustyniak W.M.* On the contribution of water products from Galilean satellites to the Jovian magnetosphere // Geophys. Res. Lett. 1978. V. 5. P. 155–158.
- Lepoivre D.J., Cooper B.H., Melcher C.L., Tombrello T.A.* Sputtering of SO₂ by high energy Ions // Rad. Effects. 1983. V. 71. P. 245–255.
- Pedrys R., Warczak B., Schou J., Stenum B., Ellegaard O.* Ejection of molecules from solid deuterium excited by keV electrons // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 79. P. 3070–3073.
- Plainaki C., Milillo A., Mura A., Massetti S., Orsini S., Cassidy T.* Ion sputtering and radiolysis of ice at the Galilean moons // 10th Hellenic Astron. Conf. Ioannina. 5–8 September 2011. P. 1–16.
- Reimann C.T., Johnson R.E., Brown W.L.* Sputtering and luminescence in electronically excited solid argon // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 600–603.
- Schou J., Stenum B., Ellegaard O., Dutkiewicz L., Pedrys R.* Sputtering of the most volatile solids: the solid hydrogen // Nucl. Instrum. Methods. 1995. V. 100. P. 217–223.
- Schou J., Pedrys R.* Sputtering of carbon monoxide ice by hydrogen ions // J. Geophys. Res. 2001. V. 106. P. 33309–33314.
- Schou J., Stenum B., Pedrys R.* Sputtering of solid deuterium by He-ions // Nucl. Instrum. Meth. 2001. V. 182. P. 116–120.
- Shematovich V.I., Johnson R.E., Cooper J.F., Wong M.C.* Surface-bounded atmosphere of Europa // Icarus. 2005. V. 173. P. 480–498.
- Sieveka E., Johnson R.E.* Thermal- and plasma-induced molecular redistribution on the icy satellites // Icarus. 1982. V. 51. P. 528–548.
- Sigmund P.* Theory of sputtering. I. Sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets // Phys. Rev. 1969. V. 84. P. 383–416. *Taglauer E., Beiat U., Marin G., Heiland W.* Inelastic particle-surface collisions // Nucl. Mater. 1976. V. 63. P. 193.
- Yamamura Y., Matsunami J., Itoh N.* Radiation effects and defects in solids // Rad. Eff. 1983. V. 71. P. 65.
- Westley M.S., Baragiola R.A., Johnson R.E., Baratta G.A.* Photodesorption from low-temperature water ice in interstellar and circumsolar grains // Nature. 1995. V. 373. P. 405.