

О моделировании физико-химических процессов, протекающих в электронных полярных сияниях

Дашкевич Ж.В., Иванов В.Е., Козлов Б.В.

ФГБНУ Полярный геофизический институт, Апатиты, Россия

Моделирование процессов, протекающих в ионосфере во время выпадения авроральных электронов, является важным элементом в исследовании и понимании физики возмущенной полярной ионосферы. Модели данного класса должны описывать как процессы возбуждения электронно-колебательных состояний компонент ионосферной плазмы прямым электронным ударом, так и последующее перераспределение выделившейся энергии вследствие инициированных химических реакций. Основными входными параметрами таких моделей являются параметры выпадающего потока электронов, модель нейтральной атмосферы и набор химических реакций с соответствующими коэффициентами скоростей.

МОДЕЛЬ

1. Выпадающие в полярную ионосферу авроральные электроны, теряя свою энергию при столкновениях с атомами и молекулами атмосферных газов, инициируют физико-химические процессы, включающие в себя возбуждение и ионизацию этих газов. Как следствие, возникает сложный комплекс химических реакций, определяющих состав возмущенной ионосферы. Для высокоэнергетической ионосферы на высотах E и F_1 -область (~90-160 км), где процессами переноса низэнергетических составляющих можно пренебречь, численное моделирование данных процессов сводится к решению системы нестационарных одномерных уравнений неразрывности вида:

$$\frac{dN_{ik}(h,t)}{dt} = Q_{ik}(h,t) + Q_{ik}^*(h,t) - L_{ik}(h,t),$$

где: $N_{ik}(h,t)$ – концентрация Y -компоненты атмосферного газа, возбужденного в k -е состоянии, $Q_{ik}(h,t)$ – скорость образования Yk -состояния за счет прямого удара, $Q_{ik}^*(h,t)$ – скорость образования Yk -состояния в химических реакциях, $L_{ik}(h,t)$ – скорость гашения Yk -состояния в химических реакциях и излучательных переходах, h – высота над поверхностью Земли, t – продолжительность выпадения.

Отличительной особенностью представляемой модели является метод расчета высотных профилей скоростей возбуждения и ионизации атмосферных газов $Q_{ik}(h,t)$ потоком выпадающих электронов. В основу данного метода положен функционал, который позволяет аналитически связать высотные профили возбужденных компонент атмосферы с энергетическим спектром выпадающих электронов $F(E)$. При условии, что поток выпадающих электронов не меняется во времени, эта связь будет следующей:

$$Q_{ik}(h) = P_i(h) \rho(h) \frac{1}{\epsilon_{ik}} \int_{E_{ik}}^{\infty} \frac{F(E) [1 - T_{ik}(E)]}{R(E)} \lambda(E, \chi) dE,$$

где: $P_i(h)$ – доля энергии, пошедшая на возбуждение атмосферного газа сорта Y , $\rho(h)$ – плотность атмосферы, ϵ_{ik} – энергетическая цена возбуждения k -состояния атмосферного газа сорта Y , $F(E)$ – энергетический спектр выпадающих электронов, $T_{ik}(E)$ – величина альbedo-потока по энергии, $R(E)$ – интегральная длина пробега, $\lambda(E, \chi)$ – безразмерная функция диссипации энергии, χ – глубина проникновения в атмосферу, нормированная на интегральную длину пробега.

Скорость возбуждения k -го состояния Y -ой составляющей атмосферных газов в столкновительных реакциях определяется как:

$$Q_{ik}(h,t) = \sum_X N_X(h,t) N_{ik}(h,t) k_{ikX},$$

где: $N_X(h,t)$ и $N_{ik}(h,t)$ – концентрации газов сорта X и Z , k_{ikX} – константа скорости реакции.

Потери $L_{ik}(h,t)$ складываются из потерь в столкновительных реакциях гашения и излучательных переходах и определяется как:

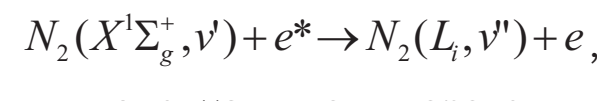
$$L_{ik}(h,t) = \sum_X N_X(h,t) N_{ik}(h,t) k_{ikX} + \sum_{j \neq k} A_{ij}^{ik} N_{ik}(h,t),$$

где: $N_X(h,t)$ и $N_{ik}(h,t)$ – концентрации газа в Yk -состоянии и газ сорта X , k_{ikX} – константа скорости реакции дезактивации, A_{ij}^{ik} – вероятность спонтанного излучения Yk -состояния с переходом в Yj . Таким образом, в представленной здесь модели концентрации ионизированных составляющих N_2^+ , O_2^+ , $O^+(^4S)$, $O^+(^2D)$, $O^+(^2P)$, $O^+(^2S)$, $N^+(^2D)$, $N^+(^2P)$, NO^+ , NO , NO^* , $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ и электронной концентрации n_e связаны 56-ю химическими реакциями. Реакции, используемые в модели, и соответствующие им константы скоростей приведены в таблице.

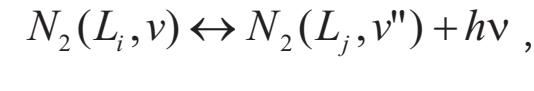
2. Триплетные состояния молекулярного азота $N_2(A^3\Sigma_u^+)$, $N_2(B^3\Pi_g)$, $N_2(C^3\Pi_u)$ являются источниками уверенно регистрируемых в полярных сияниях эмиссий полос системы Вегарда-Капалана. Первой положительной системы полос и второй положительной системы полос, соответственно. Кроме того, триплетное состояние $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ участвует в образовании возбужденного атомарного кислорода $O(^1S)$ – источника авроральной зеленой линии, причем скорость образования возбужденного кислорода зависит от колебательного числа триплетного уровня $A^3\Sigma_u^+$.

Описание электронно-колебательной кинетики в формировании триплетных состояний N_2 и базируется на учете следующих процессов:

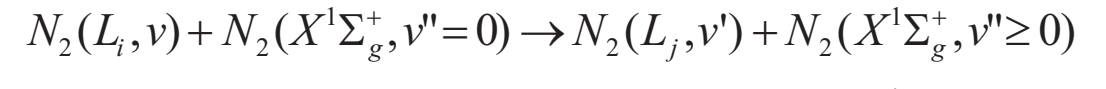
- возбуждение прямым электронным ударом с основного невозбужденного уровня молекулярного азота



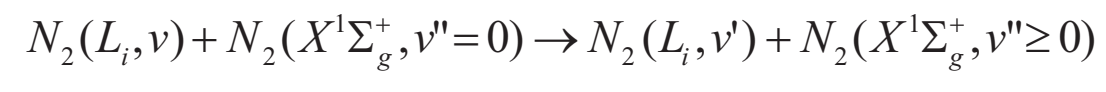
- спонтанные переходы между триплетными уровнями молекулярного азота



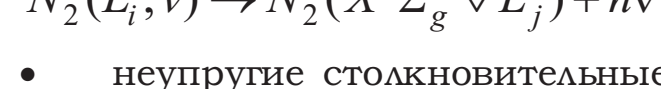
- передачу энергии между триплетными состояниями посредством столкновительных реакций возбужденных молекул



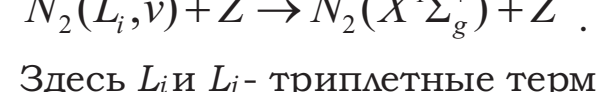
- перераспределение энергии между колебательными уровнями триплетного состояния



- излучательные спонтанные переходы



- неупругие столкновительные реакции гашения с основными атмосферными газами O , N_2 , O_2



Здесь L_i и L_j – триплетные термы, v – колебательное квантовое число.

Расчет скорости образования каждого колебательного уровня триплетного состояния сводится к решению системы балансных уравнений. Принимая во внимание малое радиационное время жизни триплетных термов, балансные уравнения можно записать в приближении фотохимического равновесия:

$$Q_i k_{ik}^* + \sum_{j \neq i} N_j^* k_{ij}^* + \sum_{j \neq i} N_j^* [N_2] k_{ij}^* + \sum_{j \neq i} N_j^* [N_2] k_{ij}^* =$$

$$\sum_{j \neq i} N_j^* k_{ji}^* + \sum_{j \neq i} N_j^* k_{ji}^* + \sum_{j \neq i} N_j^* [N_2] k_{ji}^* + \sum_{j \neq i} N_j^* [N_2] k_{ji}^* + \sum_{j \neq i} N_j^* [Z]$$

где: N_j^* – заселенность колебательного уровня v терма L_i , Q_i – скорость образования триплетного терма L_i , k_{ik}^* – факторы Франка-Кондона, k_{ij}^* – коэффициенты Эйнштейна для перехода с уровня L_i, v на уровень L_j, v' , k_{ij}^* – скорость столкновительной реакции с

передачей энергии с уровня L_i, v на уровень L_j, v' , k_{ij}^* – скорость гашения уровня L_i, v атмосферным газом Z , $[Z]$ – концентрация атмосферного газа Z

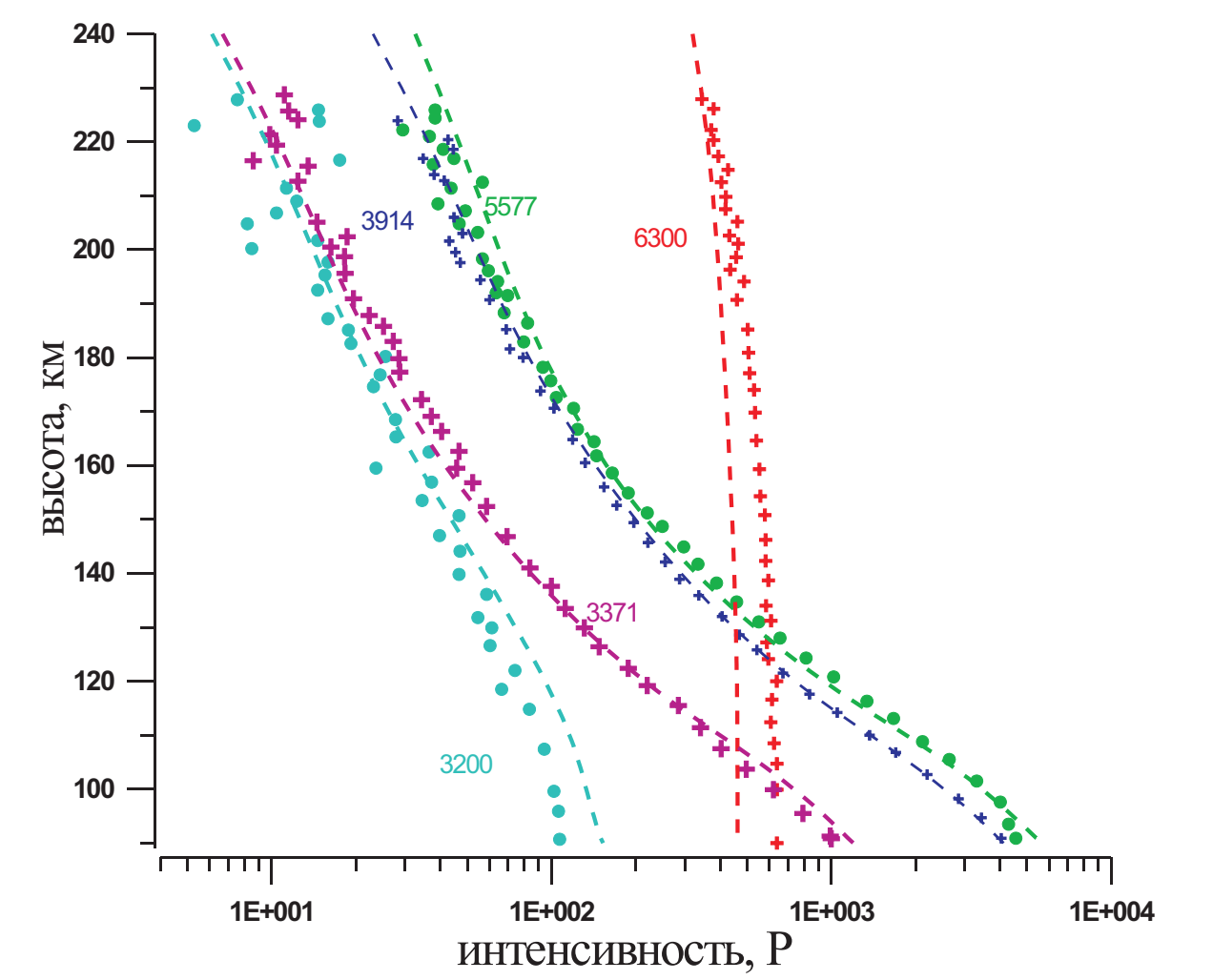
РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Модель взаимодействия атмосферных компонент позволяет рассчитать концентрации следующих атмосферных компонент: N_2^+ , O_2^+ , $O^+(^4S)$, $O^+(^2D)$, $O^+(^2P)$, $O^+(^2S)$, $N^+(^2D)$, $N^+(^2P)$, NO , NO^+ , N , $N_2(A^3\Sigma_u^+)$, $N_2(B^3\Pi_g)$, $N_2(W^3\Delta_u)$, $N_2(B^3\Sigma_u^+)$, $N_2(C^3\Pi_u)$ и электронов в авроральной полярной ионосфере. Отличительными особенностями данной модели являются следующие: 1) функционал, позволяющий рассчитывать высотные профили скоростей возбуждения атмосферных газов N_2 , O_2 и O в различных электронно-колебательных состояниях при произвольно заданном дифференциальном потоке выпадающих электронов, 2) алгоритм для восстановления энергетического спектра выпадающего потока электронов по высотному профилю светимости полос, изучение которых соответствует разрешенным переходам, в данной работе – полосам Первой отрицательной системы N_2^+ , 3) метод расчета заселенности колебательных уровней триплетных электронных состояний N_2 , что особенно важно для терма $A^3\Sigma_u^+$, который играет доминирующую роль в возбуждении 1S состояния атомарного кислорода, являющегося источником эмиссии 557.7 нм.

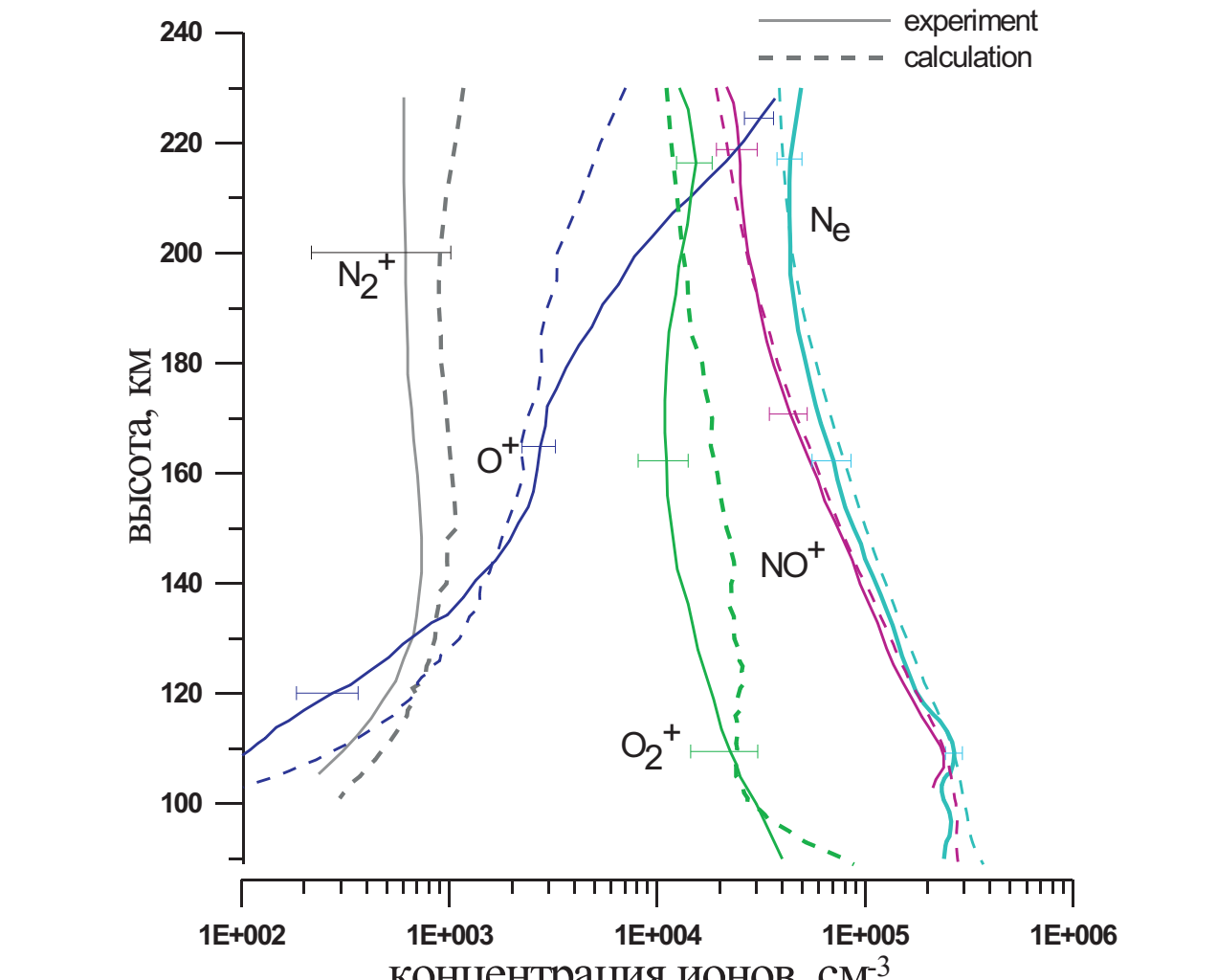
Для тестирования модели были использованы результаты координированного ракетно-спутникового эксперимента [Rees et al., 1977, Sharp et al., 1979], в котором были измерены: энергетический спектр авроральных электронов, концентрации атмосферных газов N_2 , O_2 и O в интервале высот 160-240 км, высотные профили концентрации ионов N_2^+ , O_2^+ , O^+ и NO^+ , высотные профили интенсивностей эмиссий 557.7 и 630.0 нм атомарного кислорода, 391.4 нм Первой отрицательной системы полос N_2^+ , 337.1 нм Второй положительной системы полос N_2 и 320.0 нм системы полос Вегарда-Капалана. Исходя из условий эксперимента, интегрирование проводилось в предположении, что выпадение электронов длится 20 минут. Модель нейтральной атмосферы была адаптирована под условия наблюдений. В качестве исходной модели нейтральной атмосферы была выбрана модель MSIS-90. Выше 160 км концентрации N_2 , O_2 и O были приведены в соответствие с измеренными концентрациями этих газов в эксперименте. Ниже 160 км концентрации молекулярного и атомарного кислорода были скорректированы для получения наилучшего согласия вычисляемых и экспериментальных концентраций соответствующих ионов.

Для определения колебательной заселенности триплетных уровней N_2 была составлена линейная система из 73 балансных уравнений: для 22-х колебательных уровней $A^3\Sigma_u^+$ терма, 13-ти колебательных уровней $B^3\Pi_g$ терма (начиная с тринадцатого колебательного уровня этот терм преддиссоциирует), 19-ти колебательных уровней $W^3\Delta_u$ терма, 14-ти колебательных уровней $B^3\Sigma_u^+$ терма и 5-ти колебательных уровней $C^3\Pi_u$ терма. Количество уровней выбиралось исходя из принципа целесообразности, учитывая расположение колебательных уровней триплетов относительно друг друга.

На рисунках приведены высотные профили концентрации ионов N_2^+ , O_2^+ , O^+ , NO^+ и концентрации электронов и высотные профили интенсивностей эмиссий 557.7 нм, 630.0 нм, 391.4 нм, 337.1 нм и 320.0 нм, рассчитанные по данной модели и измеренные в эксперименте.



Высотные профили интенсивностей эмиссий 557.7 нм, 630.0 нм, 391.4 нм, 337.1 нм и 320.0 нм: линии – результаты моделирования; кружки и кресты – экспериментальные данные (Sharp et al., 1979).

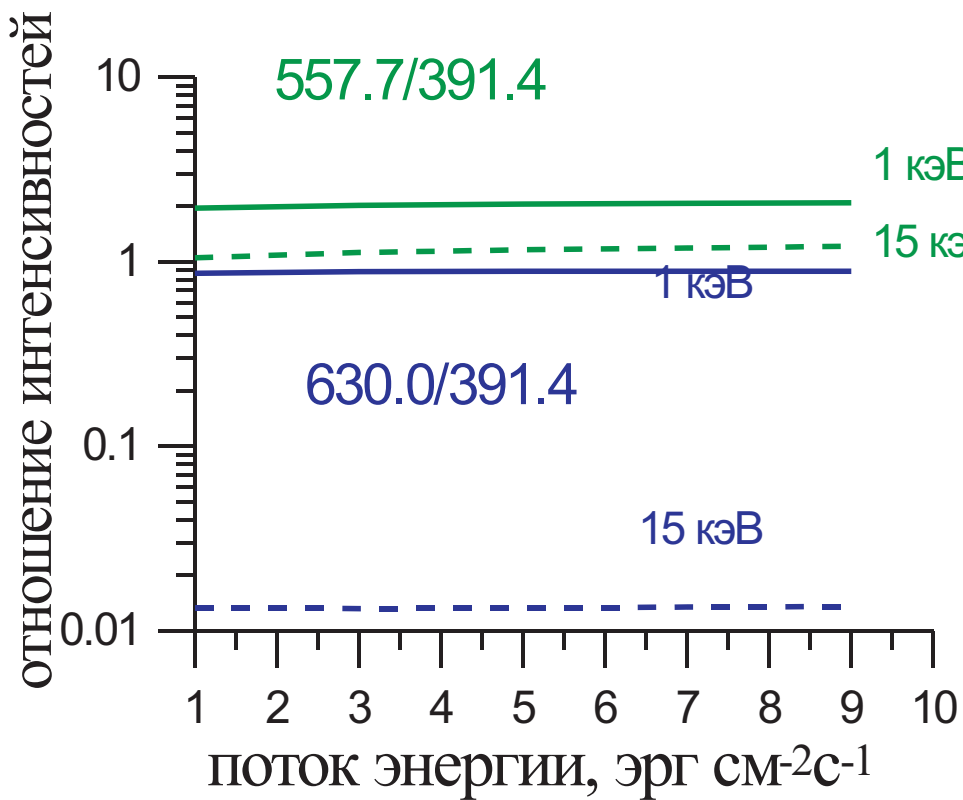


Высотные профили концентрации ионов N_2^+ , O_2^+ , O^+ , NO^+ и концентрации электронов: пунктирные линии – результаты моделирования; сплошные линии – экспериментальные данные (Sharp et al., 1979).

ДИАГНОСТИКА NO В ПОЛЯРНЫХ СИЯНИЯХ

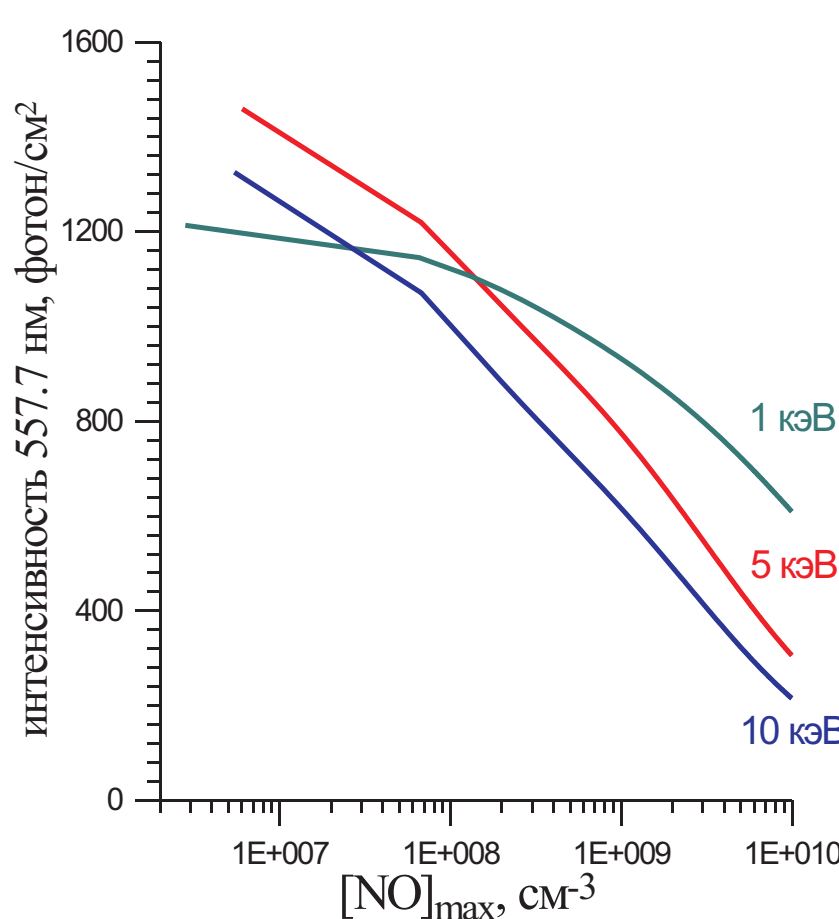
Оксид азота NO является активной малой составляющей атмосферы и играет существенную роль в цикле физико-химических процессов, протекающих в области полярных сияний. В высоких широтах количество NO в разы больше чем в средних широтах. Это происходит в том числе и благодаря образованию окиси азота во время выпадения авроральных электронов в атмосферу Земли. Результаты оценок содержания NO в полярных сияниях показали, что концентрация NO может меняться в диапазоне $10^7 - 10^9$ см⁻³. Из-за большой времени жизни окись азота может накапливаться в атмосфере. Поэтому, при анализе и моделировании процессов в полярных сияниях необходимо учитывать, что не смотря на корреляцию концентрации NO с интенсивностью сияний, содержание NO в значительной степени может определяться продолжительностью и интенсивностью авроральной активности, предшествующей исследуемому событию. В связи с этим представляется актуальным поиск возможностей диагностики содержания NO в полярных сияниях по данным наземных оптических наблюдений.

Рассмотрим возможность проведения оценок концентрации окиси азота в максимуме высотного профиля $[NO]_{max}$ по данным измерений интенсивностей свечения в столбе полярного сияния в эмиссиях 391.4, 557.7 и 630.0 нм. Отметим тот факт, что отношения интенсивностей свечения $I_{557.7}/I_{391.4}$ и $I_{630.0}/I_{391.4}$ слабо зависят от потока энергии выпадающих электронов, что можно видеть на следующем рисунке:

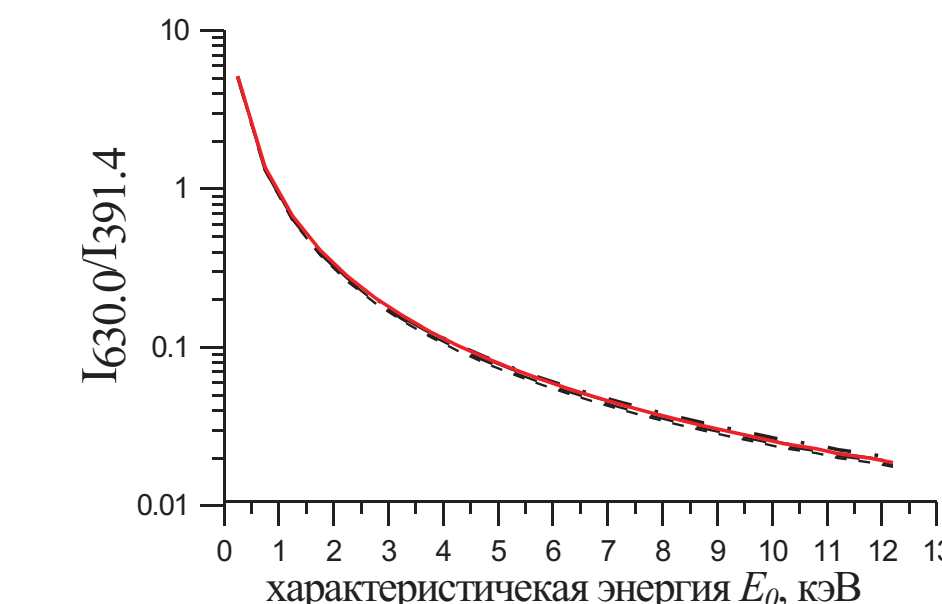


Зависимость отношений интенсивностей от величины потока энергии выпадающих электронов

Отношение $I_{557.7}/I_{391.4}$ будет в основном определяться величинами E_0 и $[NO]_{max}$. Это продемонстрировано на следующем рисунке, где представлены зависимости отношения $I_{557.7}/I_{391.4}$ от $[NO]_{max}$ для E_0 в диапазоне от 1 до 10 кВэ

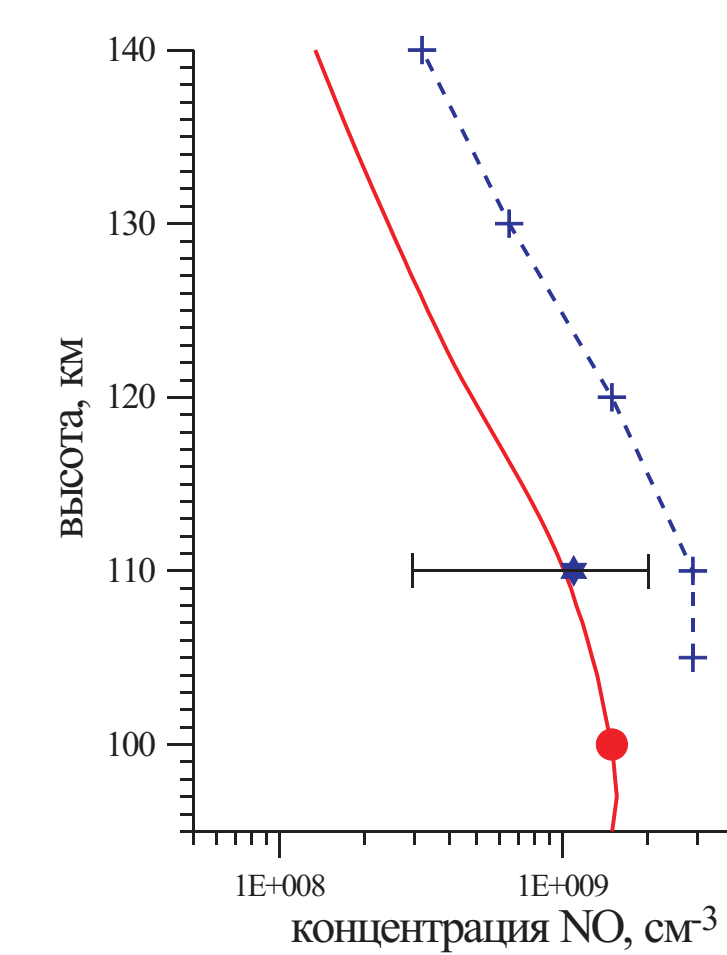


Оценку E_0 можно получить по отношению интенсивностей свечения $I_{630.0}/I_{391.4}$. Однако, среди каналов возбуждения 1D состояния атомарного кислорода, являющегося источником эмиссии 630.0 нм, присутствуют два, подверженные процессу дезактивации окисью азота: это диссоциативная рекомбинация $O(^1D) + e \rightarrow O(^2D) + h\nu$ и излучательный переход $O(^1D) \rightarrow O(^2D) + h\nu$. Из следующего рисунка, где построены зависимости отношения $I_{630.0}/I_{391.4}$ от E_0 для набора $[NO]_{max}$, лежащего в диапазоне $10^7 - 10^{10}$ см⁻³, видно, что это отношение незначительно зависит от $[NO]_{max}$.



Таким образом, по измеренному отношению $I_{630.0}/I_{391.4}$ можно получить оценку характеристической энергии E_0 выпадающего потока электронов. Знание E_0 и зависимости $I_{557.7}/I_{391.4}$ от $[NO]_{max}$ для данной E_0 позволяет получить оценку $[NO]_{max}$ в полярном сиянии в конкретный момент времени.

Апробируем предложенную методику оценки $[NO]_{max}$ в полярных сияниях на основе экспериментальных данных. В работах [Rees et al., 1977, Sharp et al., 1979] были представлены результаты измерений интенсивностей свечения эмиссий 391.4, 557.7 и 630.0 нм, и даны оценки содержания NO в полярном сиянии, полученные в ходе координированного ракетно-спутникового эксперимента. Используя приведенные там результаты измерений интенсивностей эмиссий 391.4 нм, 557.7 нм и 630.0 нм и изложенную выше методику, рассчитаем характеристическую энергию выпадающего потока электронов E_0 и получим оценку концентрации окиси азота $[NO]_{max}$. Полученное значение $[NO]_{max}$ показано красным кружком на следующем рисунке вместе с нормированным на этот максимум высотным профилем концентрации NO (красная линия), рассчитанным в рамках представленной здесь модели возмущенной атмосферы.



Здесь же представлены результаты оценок концентрации NO , полученные в [Rees et al., 1977, Sharp et al., 1979], на основе анализа континуума NO_2 в эмиссии 552.0 нм (синяя звездочка) и восстановленной из измеренного отношения концентраций $[NO]/[O_2]$ (синяя линия). Из рисунка видно хорошее согласие полученной в рамках предлагаемой в данной работе методики оценки NO с экспериментально полученными величинами.

ИСПОЛЗУЕМЫЕ В МОДЕЛИ РЕАКЦИИ И ИХ КОНСТАНТЫ СКОРОСТЕЙ

№	Реакция	Коэффициент скорости реакции, см ³ с ⁻¹
1	$N_2^+ + O_2 \rightarrow N_2 + O_2^+$	$k_1 = 5 \cdot 10^{-11} \cdot (300/T_e)^{0.8}$
2	$N_2^+ + O \rightarrow N_2 + O^+(^4S)$	$k_2 = 9.8 \cdot 10^{-12} \cdot (300/T_e)^{0.23}$
3	$N_2^+ + O \rightarrow NO^+ + N(^2D)$	$k_3 = 1.4 \cdot 10^{-10} \cdot (300/T_e)^{0.44} - k_2$
4	$N_2^+ + NO \rightarrow N_2 + NO^+$	$k_4 = 3.3 \cdot 10^{-10}$
5	$N_2^+ + e \rightarrow N(^4S) + N(^2D)$	$k_5 = 3.5 \cdot 10^{-7} \cdot (300/T_e)^{0.5}$ $f_{51} = 0.1, f_{52} = 1.9$
6	$O_2^+ + e \rightarrow O(^1S) + O(^1D)$	$k_6 = 1.9 \cdot 10^{-7} \cdot (300/T_e)^{0.5}$ $f_{61} = 1.2, f_{62} = 0.1$
7	$O_2^+ + N(^4S) \rightarrow NO^+ + O(^1S)$	$k_7 = 1.2 \cdot 10^{-10}$ $f_{71} = 0.2$
8	$O_2^+ + NO \rightarrow NO^+ + O_2$	$k_8 = 4.4 \cdot 10^{-10}$
9	$O_2^+ + N(^2D) \rightarrow NO^+ + O_2$	$k_9 = 1.8 \cdot 10^{-10}$
10	$O^+(^4S) + N_2 \rightarrow NO^+ + N(^4S)$	$k_{10} = 1.533 \cdot 10^{-12}$
11	$O^+(^4S) + O_2 \rightarrow O_2^+ + O$	$k_{11} = 2.82 \cdot 10^{-11}$
12	$O^+(^4S) + NO \rightarrow NO^+ + O$	$k_{12} = 8.36 \cdot 10^{-13}$
13	$O^+(^2D) + N_2 \rightarrow N_2^+ + O$	$k_{13} = 7.2 \cdot 10^{-10}$
14	$O^+(^2D) + N_2 \rightarrow NO^+ + N(^4S)$	$k_{14} = 8 \cdot 10^{-11}$
15	$O^+(^2D) + O_2 \rightarrow O_2^+ + O$	$k_{15} = 6.3 \cdot 10^{-10}$
16	$O^+(^2D) + O_2 \rightarrow O^+(^4S) + O_2$	$k_{16} = 7 \cdot 10^{-11}$
17	$O^+(^2D) + O \rightarrow O^+(^4S) + O$	$k_{17} = 1 \cdot 10^{-11}$
18	$O^+(^2D) + e \rightarrow O^+(^4S) + e$	$k_{18} = 6.6 \cdot 10^{-8} \cdot (300/T_e)^{0.5}$
19	$O^+(^2D) \rightarrow O^+(^4S) + h\nu$	$A_{19} = 0.97 \cdot 10^{-4}$

№	Реакция	Коэффициент скорости реакции, см ³ с ⁻¹
20	$O^+(^2P) + N_2 \rightarrow O^+(^4S) + N_2$	$k_{20} = 4 \cdot 10^{-10}$
21	$O^+(^2P) + N_2 \rightarrow N_2^+ + O$	$k_{21} = 5 \cdot 10^{-11}$
22	$O^+(^2P) + O \rightarrow O^+(^4S) + O$	$k_{22} = 5 \cdot 10^{-11}$
23	$O^+(^2P) + O_2 \rightarrow O_2^+ + O$	$k_{23} = 4.8 \cdot 10^{-10}$
24	$O^+(^2P) \rightarrow O^+(^2D) + h\nu$	$A_{24} = 0.171$
25	$O^+(^2P) \rightarrow O^+(^4S) + h\nu$	$A_{25} = 0.048$
26	$O^+(^2P) + e \rightarrow O^+(^2D) + e$	$k_{26} = 1.4 \cdot 10^{-7} \cdot (300/T_e)^{0.5}$
27	$O^+(^2P) + e \rightarrow O^+(^4S) + e$	$k_{27} = 4.4 \cdot 10^{-8} \cdot (300/T_e)^{0.5}$
28	$O(^1D) + N_2 \rightarrow O + N_2$	$k_{28} = 2 \cdot 10^{-11} \cdot \exp(107.8/T_e)$
29	$O(^1D) + O_2 \rightarrow O + O_2$	$k_{29} = 2.9 \cdot 10^{-11} \cdot \exp(67.5/T_e)$
30	$O(^1D) + O \rightarrow O + O$	$k_{30} = 8 \cdot 10^{-12}$
31	$O(^1D) \rightarrow O + h\nu$	$A_{31} = 9.3 \cdot 10^{-3}$
32	$O(^1D) + e \rightarrow O + e$	$k_{32} = 1.6 \cdot 10^{-12} \cdot T_e^{0.01}$
33	$O(^1S) + O \rightarrow O + O$	$k_{33} = 2 \cdot 10^{-14}$
34	$O(^1S) \rightarrow O(^1D) + h\nu$	$A_{34} = 1.06$
35	$O(^1S) \rightarrow O + h\nu$	$A_{35} = 0.045$
36	$O(^1S) + O_2 \rightarrow O + O_2$	$k_{36} = 4 \cdot 10^{-12} \cdot \exp(-860/T_e)$
37	$O(^1S) + NO \rightarrow O + NO$	$k_{37} = 5.5 \cdot 10^{-13}$
38	$N(^4S) + O_2 \rightarrow O + O_2$	$k_{38} = 4.4 \cdot 10^{-12} \cdot \exp(-3600/T_e)$
39	$N(^4S) + NO \rightarrow N_2 + O$	$k_{39} = 3.4 \cdot 10^{-11}$
40	$N(^2D) + O_2 \rightarrow NO + O(^2P, ^2D)$	$k_{40} = 6 \cdot 10^{-12}$ $f_{40} = 0.1$

№	Реакция	Коэффициент скорости реакции, см ³ с ⁻¹
41	$N(^2D) + O \rightarrow N(^4S) + O(^2P, ^2D)$	$k_{41} = 6.9 \cdot 10^{-13}$ $f_{41} = 0.1$
42	$N(^2D) + NO \rightarrow N_2 + O$	$k_{42} = 6.7 \cdot 10^{-11}$
43	$N(^2D) + NO \rightarrow N(^4S) + NO$	$k_{43} = 6.3 \cdot 10^{-11}$
44	$N(^2D) + e \rightarrow N(^4S) + e$	$k_{44} = 5.5 \cdot 10^{-10} \cdot (T_e/300)^{0.5}$
45	$N(^2D) \rightarrow N(^4S) + h\nu$	$A_{45} = 1.07 \cdot 10^{-5}$
46	$N(^2P) + O_2 \rightarrow NO + O(^1S, ^1D, ^1P)$	$k_{46} = 3.5 \cdot 10^{-12}$ $f_{46SP} = 0.33$
47	$N(^2P) + O \rightarrow N(^2D) + O$	$k_{47} = 1 \cdot 10^{-11}$
48	$N(^2P) + NO \rightarrow N_2 + O$	$k_{48} = 5.4 \cdot 10^{-3}$
49	$N(^2P) \rightarrow N(^4S) + h\nu$	$A_{49} = 7.9 \cdot 10^{-2}$
50	$N(^2P) + NO \rightarrow N_2 + O$	$k_{50} = 2.9 \cdot 10^{-11}$
51	$NO^+ + e \rightarrow O + N(^4S, ^2D)$	$k_{51} = 2.3 \cdot 10^{-7} \cdot (300/T_e)^{0.5}$ $f_{51} = 0.24, f_{52} = 0.76$
52	$N^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + N(^4S, ^2D)$	$k_{52} = 3 \cdot 10^{-10}$ $f_{52} = 0.8, f_{53} = 0.2$
53	$N^+ + O_2 \rightarrow NO^+ + O(^1D, ^1S)$	$k_{53} = 2.6 \cdot 10^{-10}$ $f_{53} = 0.7, f_{54} = 0.01$
54	$N^+ + O_2 \rightarrow O^+(^4S) + NO$	$k_{54} = 4 \cdot 10^{-11}$
55	$N^+ + O \rightarrow O^+(^4S) + N(^4S)$	k_{55}