

СИНТЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ИЗЛУЧЕНИЯ НЕКОТОРЫХ СИСТЕМ ПОЛОС СИНЕ-ЗЕЛЕННОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

Ж.В. Дашкевич, Б.В. Козелов

Полярный геофизический институт, Апатиты, Россия

Аннотация. Представлены методики расчета синтетических спектров излучения Первой отрицательной системы полос иона молекулярного азота $N_2^+(B^2 \sum_u^+ - X^2 \sum_g^+)$ и Второй положительной системы полос молекулярного азота $N_2(C^3 \Pi_u - B^3 \Pi_g)$. В методиках используются спектрометрические молекулярные константы и учитываются индивидуальные строения соответствующих молекул. Входными параметрами расчета синтетического спектра в полярных сияниях являются начальные параметры потоков авроральных электронов и протонов, модель нейтральной атмосферы и характеристики регистрирующего прибора.

Введение

Анализ экспериментально полученных спектров свечения полярных сияний предполагает владение методикой расчета этих спектров в широком диапазоне длин волн. Молекулярные полосы и атомарные линии, образующие спектр сияний в диапазоне от ультрафиолетовой до инфракрасной областей, накладываются друг на друга. Перед исследователями стоит задача разделения суммарного спектра на полосы и линии, соответствующие конкретным радиационным переходам атомов и молекул атмосферных газов. Синтетические спектры используются в авроральных и лабораторных исследованиях, включающих в себя спектральную идентификацию экспериментально полученных спектров, определение вращательных температур молекул, сечений возбуждения атмосферных газов.

Алгоритм расчета синтетических спектров

Входными параметрами расчета синтетического спектра в полярных сияниях являются начальные параметры потоков авроральных электронов и протонов, модель нейтральной атмосферы и характеристики регистрирующего прибора. Алгоритм расчета синтетического спектра системы полос состоит в определении для каждой полосы набора интенсивностей вращательных линий всех ветвей системы. Интенсивность линии может быть получена из формулы:

$$E_{J'J''} = A_{J'J''} N_{v'} (2J' + 1) \frac{(1 + \delta_s)}{2} \cdot \frac{hcB_{v'}}{kT} \exp\left[-\frac{hc}{kT} F(J')\right],$$

где T - вращательная температура, $F(J')$ - положение уровней вращательной энергии, $N_{v'}$ - заселенность колебательного уровня, определяемая факторами Франка-Кондона, $B_{v'}$ - вращательная постоянная, h - постоянная Планка, k - постоянная Больцмана, c - скорость света, $\delta_s=1$ для симметричных вращательных подуровней и 0 для несимметричных. Здесь и далее в формулах v - колебательное квантовое число, J - вращательное квантовое число, один штрих соответствует верхнему электронному состоянию, два штриха - нижнему.

Положение уровней вращательной энергии определяется исходя из типа связи Гунда в рассматриваемой молекуле:

для дуплетных состояний молекулы с типом связи «b»:

$$F_{K=J-\frac{1}{2}}(J) = v_0 + B_v \left[\left(J + \frac{1}{3} \right) - \Lambda^2 + \frac{1}{2} \sqrt{4J(J+1)^2 + Y(Y-4)\Lambda^2} \right]$$

$$F_{K=J+\frac{1}{2}}(J) = v_0 + B_v \left[\left(J + \frac{1}{3} \right) - \Lambda^2 - \frac{1}{2} \sqrt{4J(J+1)^2 + Y(Y-4)\Lambda^2} \right]$$

для триплетных уровней в случае связи «a», «b» и промежуточной между ними:

$$F_{K=J-1}(J) = \nu_0 + B_v \left[-\Lambda^2 + \frac{2}{3} + J(J+1) - \sqrt{y_1 + 4J(J+1)} - \frac{2(y_2 - 2J(J+1))}{3(y_1 + 4J(J+1))} + \dots \right]$$

$$F_{K=J}(J) = \nu_0 + B_v \left[-\Lambda^2 + \frac{2}{3} + J(J+1) + \frac{4(y_2 - 2J(J+1))}{3(y_1 + 4J(J+1))} + \dots \right]$$

$$F_{K=J+1}(J) = \nu_0 + B_v \left[-\Lambda^2 + \frac{2}{3} + J(J+1) + \sqrt{y_1 + 4J(J+1)} - \frac{2(y_2 - 2J(J+1))}{3(y_1 + 4J(J+1))} + \dots \right]$$

$$y_1 = \Lambda^2 Y(Y-4) + \frac{4}{3}, \quad y_2 = \Lambda^2 Y(Y-1) - \frac{4}{9}, \quad Y = \frac{A_e}{B_v}$$

где Λ - орбитальный момент молекулы, T_e , ω_e , $\omega_e x_e$, A_e - молекулярные константы.

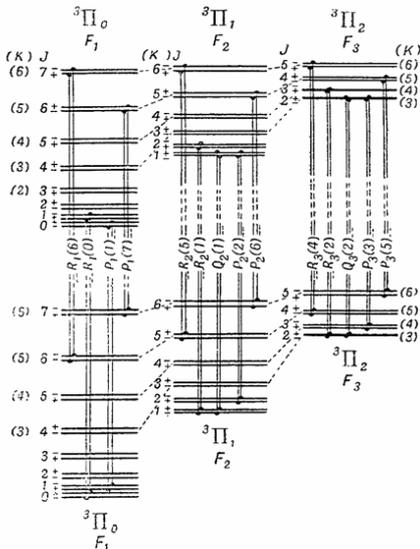


Рисунок 1. Структура перехода $C^3 \Pi_u \rightarrow B^3 \Pi_g$.

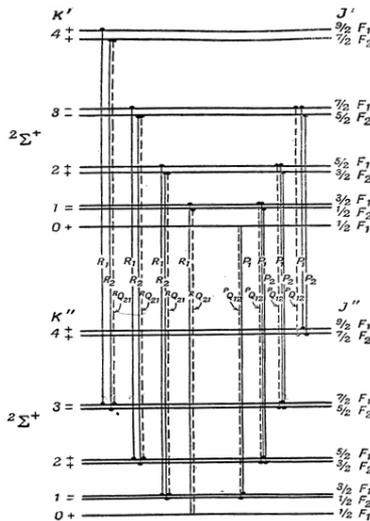


Рисунок 2. Структура перехода $B^2 \Sigma_u^+ \rightarrow X^2 \Sigma_g^+$.

Вращательная постоянная B_v является функцией колебательного квантового числа v :

$$B_v = B_e - \alpha_e(v+0.5) + \gamma_e(v+0.5)^2,$$

B_e, α_e, γ_e - молекулярные константы.

Вероятность спонтанных переходов $A_{J',J''}$ для дипольного излучения:

$$A_{J',J''} = \frac{64\pi^4}{3h} \nu_{J',J''}^3 q_{v',v''} (R_e^D)^2 \frac{S_{J',J''}^D}{2J'+1},$$

где $q_{v',v''}$ - фактор Франка-Кондона соответствующего перехода, $\nu_{J',J''}$ - волновое число электронно-колебательно-вращательного перехода, R_e^D - дипольный момент молекулы, $S_{J',J''}^D$ - факторы Хенля-Лондона, определяющие распределение интенсивностей во вращательной структуре полосы.

Волновое число электронно-колебательно-вращательного перехода $\nu_{J',J''}$ может быть вычислено по формулам:

$$\nu_{J',J''} = \nu_0 + F(J') - F(J''),$$

$$\nu_0 = T_e' - T_e'' + (G(v') - G(v'')),$$

$$\nu_0 = T_e + \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

где T_e - положение уровней электронной энергии, $G(v)$ - положение уровней колебательной энергии, которое определяется выражением:

$$G(v) = \omega_e(v+0.5) - \omega_e x_e(v+0.5)^2,$$

$T_e, \omega_e, \omega_e x_e$ - молекулярные константы.

Таким образом, рассчитывается набор интенсивностей $E_{J',J''}(\lambda_{J',J''})$ электронно-колебательно-вращательных переходов с длиной волны

$$\lambda_{J',J''} = \frac{1}{\nu_{J',J''}}$$

заданной системы. Для получения синтетического спектра с заданным спектральным разрешением делается свертка предполагаемой аппаратной функции прибора $\alpha(\lambda, \Delta\lambda)$ с интенсивностью $E(\lambda)$:

$$I(\lambda) = \int_{\lambda} E(\lambda) \alpha(\lambda, \Delta\lambda) d\lambda.$$

Характеристики переходов

Вторая положительная система полос молекулярного азота N_2 есть результат разрешенного электродипольного перехода между его триплетными уровнями $C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$. Поскольку термы $C^3\Pi_u$ и $B^3\Pi_g$ имеют мультиплетность три, то каждый вращательный уровень расщепляется на три подуровня. Квантовое число Λ -абсолютная величина полного орбитального момента на ось молекулы- для обоих термов равна 0, поэтому все уровни еще и дважды вырождены, причем один из вырожденных уровней становится отрицательным, другой положительным. Последовательные вращательные уровни имеют противоположную симметрию, т.е. положительные и отрицательные уровни чередуются. Каждая полоса данного перехода имеет 27 ветвей. Термы $C^3\Pi_u$ и $B^3\Pi_g$ относятся к «а» связи Гунда (тип связи между электронным и вращательным движением молекулы). На рис. 1 показано возникновение шести главных ветвей перехода.

Первая отрицательная система полос иона молекулярного азота N_2^+ есть результат электродипольного перехода $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$. Термы $B^2\Sigma_u^+$ и $X^2\Sigma_g^+$ имеют мультиплетность два, поэтому каждый вращательный уровень расщепляется на два подуровня. Квантовое число Λ -абсолютная величина полного орбитального момента на ось молекулы- для обоих термов равно 0. Термы $B^2\Sigma_u^+$ и $X^2\Sigma_g^+$ относятся к «b» связи Гунда. Каждая полоса перехода имеет 8 ветвей. На рисунке 2 показано возникновение шести ветвей перехода $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$.

Расчет синтетических спектров

Синтетический спектры второй положительной системы полос $N_2(C^3\Pi_u - B^3\Pi_g)$ и первой отрицательной системы $N_2^+(B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+)$ были рассчитаны по описанным выше формулам. Для расчета были использованы молекулярные константы, представленные в табл. 1. Дипольные моменты переходов и факторы Франка-Кондона взяты из расчетов [Gilmoret. al., 1992]. Таблицы для расчетов факторов Хенля-Лондона $S_{J',J''}^Q, S_{J',J''}^D$ даны в работе [Kovacs, 1969].

Результаты расчетов показаны на рис. 3 и 4.

Литература

- Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. Перевод с английского Флеровой М.Н.-М: Иностранной литературы, 380 с., 1949.
 Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия.-М: Физико- математической литературы, , 892 с.,1962.
 Хьюбер К.-П., Герцберг Г. Константы двухатомных молекул. Перевод с английского языка.- М: Мир. Т.2. 365 с. 1984.
 Gilmore R.G., Russ R.L., P.J. Espy. Frank-Condon Factors, r-centroids, electronic transition moments, and Einstein coefficients for many nitrogen and oxygen band systems.// *J.Phys.Chem.Data*, V.21, N.5, 1005-1107,1992.
 Kovacs J. Rotational structure in the spectra of diatomic molecules.-Budapest: Academia Kiado. 320 p. 1969.

Таблица 1. Молекулярные константы

	$C^3\Pi_u$	$B^3\Pi_g$	$B^2\Sigma_u^+$	$X^2\Sigma_g^+$
$T_e, \text{ см}^{-1}$	89136.88	59619.3	25461.4	0
ω_e	2047.17	1733.39	2419.84	2207.00
$\omega_e x_e$	28.445	14.122	23.18	16.10
B_e	1.8247	1.6374	2.07456	1.93176
α_e	0.01868	0.0179	0.024	0.01881
γ_e	-	-		
A_e	39.2	42.24		

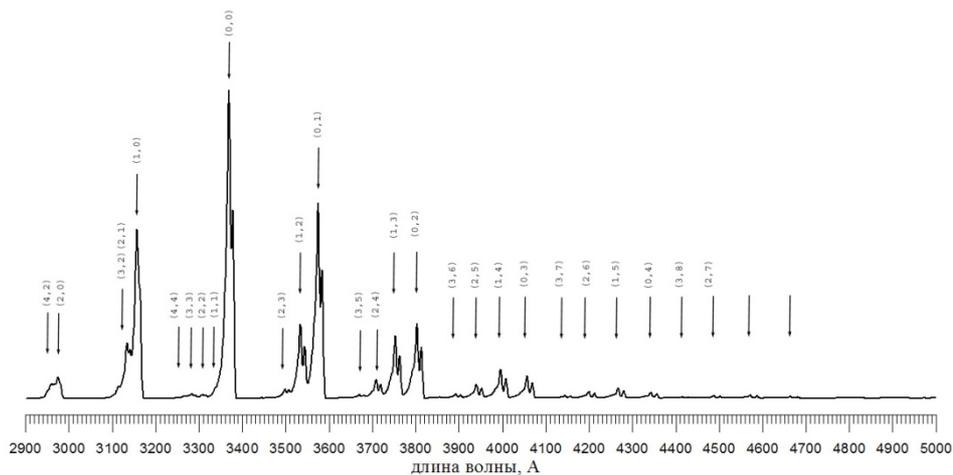


Рисунок 3. Рассчитанный синтетический спектр второй положительной системы полос $N_2(C^3\Pi_u - B^3\Pi_g)$

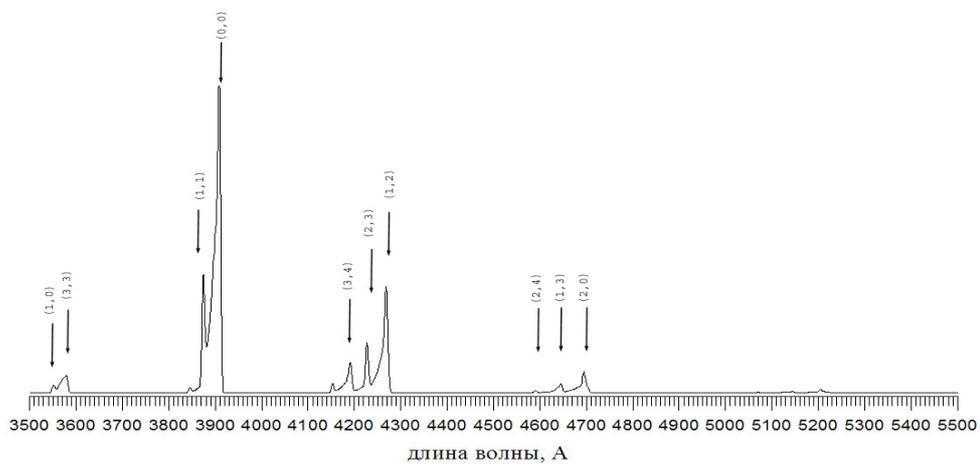


Рисунок 4. Рассчитанный синтетический спектр первой отрицательной системы $N_2^+(B^2\Sigma_u^+ - X^2\Sigma_g^+)$