

DOI: 10.37614/2588-0039.2020.43.023

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРА СВЕЧЕНИЯ НОЧНОГО НЕБА ЗЕМЛИ И ВЕНЕРЫ ДЛЯ СИСТЕМ ПОЛОС, ИЗЛУЧАЕМЫХ ПРИ СПОНТАННЫХ ПЕРЕХОДАХ МЕЖДУ РАЗЛИЧНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ЭЛЕКТРОННО – ВОЗБУЖДЁННОЙ МОЛЕКУЛЫ КИСЛОРОДА

О.В. Антоненко, А.С. Кириллов

ФГБНУ “Полярный геофизический институт”, г. Апатиты, Россия

Аннотация

Рассмотрены процессы возбуждения и гашения электронно-возбужденных состояний $A^3\Sigma_u^+$, $A^1\Delta_u$ молекулярного кислорода в атмосфере Земли и $c^1\Sigma_u^-$, $A^1\Delta_u$ в атмосфере Венеры на высотах свечения ночного неба планет. Проведено сравнение рассчитанных интегральных интенсивностей полос Герцберга I и полос Чемберлена с экспериментальными данными, полученными с космических кораблей. Показано, что лучшее согласие наблюдается при коррекции квантовых выходов колебательных уровней состояния $A^3\Sigma_u^+$ в результате тройных столкновений, полученных ранее в научной литературе.

Ключевые слова: молекулярный кислород, возбуждение электронных уровней, высоты свечения ночного неба, интегральные интенсивности полос, коррекция квантовых выходов.

1. Введение

Известно, что источником ночного свечения являются процессы с участием атомарного кислорода O, возникающего при фотодиссоциации молекул O₂ солнечным УФ излучением в дневное время. Эти реакции происходят в очень узком слое атмосферы Земли толщиной около 10 км с центром на высоте около 90 км [1]. В верхней атмосфере Венеры интенсивно протекают процессы фотодиссоциации CO₂, доминирующего газа на планете, при которых также образуется атомарный кислород. Процессы диссоциации в верхних слоях атмосфер планет земной группы протекают очень эффективно [2].

Таким образом, в атмосферах планет Земли и Венеры на высотах более 75-80 км, с максимумом около 85-100 км, содержатся высокие концентрации атомарного кислорода O. Основным механизмом образования электронно-возбужденного молекулярного кислорода O₂^{*} являются тройные столкновения с участием двух атомов кислорода O и третьей частицы из атмосферных составляющих:



(где M – это третья частица при столкновении), образуется молекула возбужденного кислорода.

Цель данной работы – провести сравнение результатов теоретических расчетов интенсивностей свечения различных полос с экспериментальными данными по ночному свечению молекулярного кислорода O₂^{*} в атмосфере Земли и Венеры, а также рассмотреть принципиальные различия кинетики возбуждения электронных уровней энергии кислородных составляющих в атмосферах планет земной группы.

2. Свечение планет ночного неба земной группы

Спонтанные переходы с электронно-возбужденного на основное состояние молекулы кислорода или на состояние с меньшей энергией приводит к свечению различных полос. Таким образом, по свечению полос кислорода мы можем констатировать факт наличия кислорода в атмосфере.

В спектрах свечения ночного неба Земли наиболее чётко прослеживается наличие молекулярного кислорода, что было зафиксировано ещё в начале 60х годов прошлого века (показано присутствие полос Герцберга I) [3]. Позже указано на интенсивное свечение полос Чемберлена [1]. При этом на Земле эти переходы происходят с ненулевых колебательных уровней на различные уровни основного и других нижележащих состояний.

Ночной спектр свечения атмосферы Венеры, полученный с орбитальных станций Венера 9 и Венера 10 впервые был опубликован в 70х годах прошлого столетия [4]. Несколько позже американскими учёными было показано, что в спектрах свечения атмосферы Венеры, кроме полос Герцберга II присутствует также некоторый вклад от полос Чемберлена [5]. В 2013 г опубликован спектр ночного свечения Венеры, где

показано наличие полос Герцберга II, а также полос Чемберлена [2]. Причем на Венере эти переходы происходят только с нулевых уровней на ненулевые уровни нижележащих состояний.

Таким образом, в результате наблюдений спектров полос молекулярного кислорода в свечении ночного неба Земли и Венеры было обнаружено их принципиальное различие: широкий спектр полос Герцберга I и Чемберлена в атмосфере Земли и система полос Герцберга II, с незначительным вкладом полос Чемберлена, причём в ночной атмосфере Земли переходы осуществляются с различных колебательных уровней состояний $A^3\Sigma_u^+(v)$ и $A^3\Delta_u(v)$, а в ночной атмосфере Венеры переходы осуществляются с нулевого колебательного уровня состояний $c^1\Sigma_u^-(v=0)$ и $A^3\Delta_u(v=0)$.

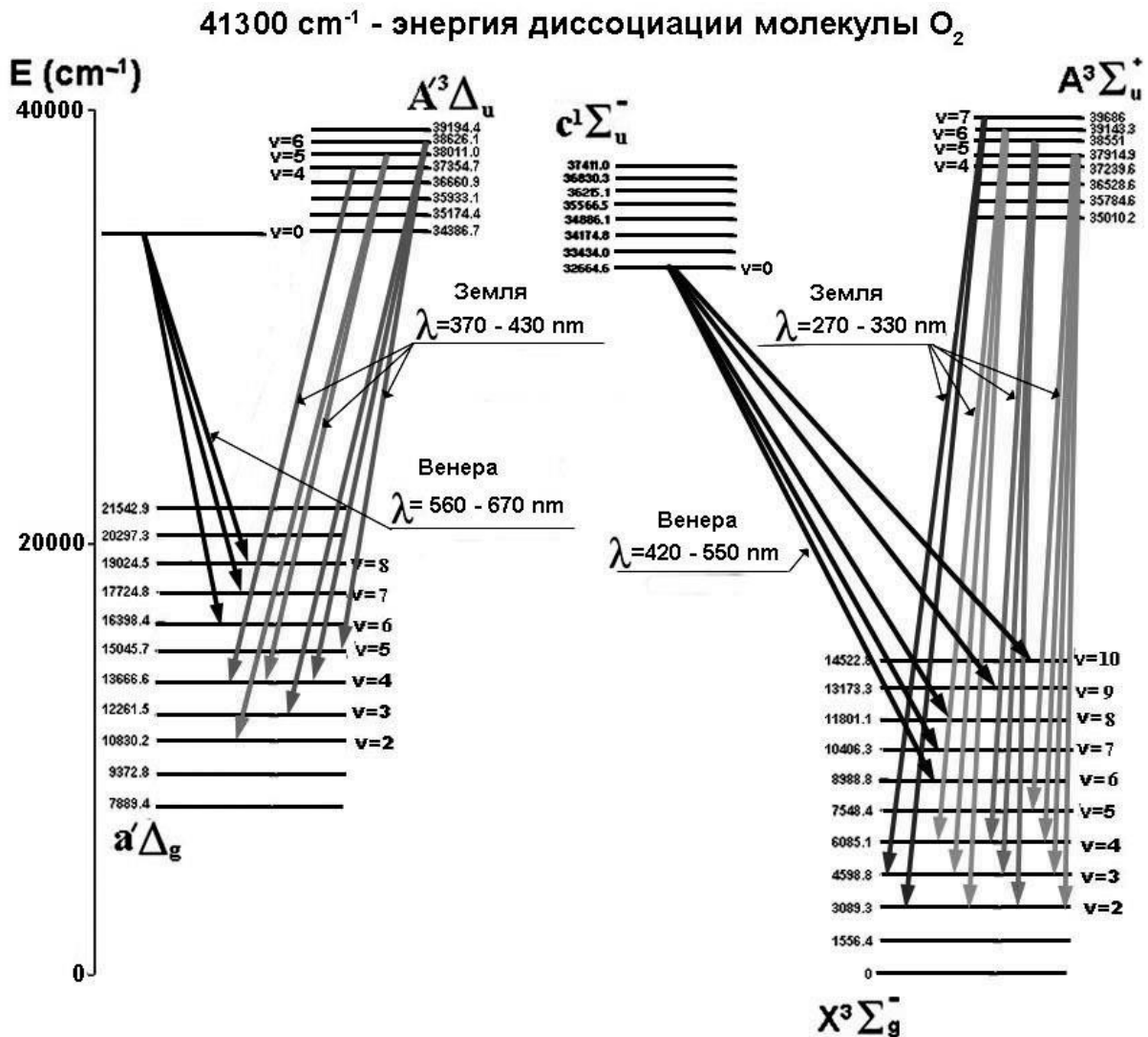


Рисунок 1. Электронные переходы внутри молекулы O_2 .

На рисунке 1 приведены электронно-возбужденные ($A^3\Sigma_u^+$, $A^3\Delta_u$, $c^1\Sigma_u^-$, $a^1\Delta_g$) и основное $X^3\Sigma_g^-$ состояния молекулы O_2 , а также - несколько систем полос, излучаемых при спонтанных переходах между различными состояниями молекулы. Все приведенные состояния находятся ниже энергии диссоциации молекулы $\text{O}_2 \sim 41300 \text{ cm}^{-1}$ ($8065 \text{ cm}^{-1} = 1\text{эВ}$). Показано, что в ночной атмосфере Земли переходы осуществляются с ненулевых колебательных уровней состояний $A^3\Sigma_u^+(v=4-7)$ и $A^3\Delta_u(v=4-6)$, в ночной атмосфере Венеры переходы осуществляются с нулевого колебательного уровня состояний $c^1\Sigma_u^-(v=0)$ и $A^3\Delta_u(v=0)$.

Проведены расчеты концентраций молекул возбуждённого кислорода $\text{O}_2(A^3\Sigma_u^+)$ и $\text{O}_2(A^3\Delta_u)$ на высотах верхней атмосферы Земли для колебательных уровней $v'=3-8$ для октября месяца, 1976 и 1986 гг. (низкая солнечная активность, $F_{10.7} = 75$). При расчетах учтем гашение электронно-возбужденной молекулы O_2 при столкновениях с молекулами азота N_2 , доминирующего на Земле и кислорода O_2 [6]:



Так же проведены расчеты концентраций молекул возбужденного кислорода $\text{O}_2(c^1\Sigma_u^-)$ и $\text{O}_2(A^1\Delta_u)$ на высотах верхней атмосферы Венеры для колебательного уровня $v'=0$. При расчетах учтем гашение электронно-возбужденной молекулы O_2 при столкновениях с молекулами углекислого газа CO_2 , доминирующего на Венере и кислорода O_2 [6]:



Поэтому при расчете концентраций возбужденного кислорода O_2 для Земли воспользуемся формулой:

$$[\text{O}_2] = q_{v'} \cdot \alpha \cdot k_2 \cdot [\text{O}]^2 \cdot [\text{N}_2] / (A_{v'} + k_{2a} \cdot [\text{N}_2] + k_{2b} \cdot [\text{O}_2]), \quad (4)$$

где α и $q_{v'}$ – квантовые выходы всего состояния $A^3\Sigma_u^+$ v' или, соответственно, всего состояния $A^1\Delta_u$, v' при тройных столкновениях (1) [7], соответственно, k_2 – константа скорости реакции рекомбинации при тройных столкновениях (1) [8], k_{2a} и k_{2b} – константы скоростей реакций (2a) и (2b), $A_{v'}$ – сумма коэффициентов Эйнштейна для всех переходов с колебательного уровня v' состояния $A^3\Sigma_u^+$ на $X^3\Sigma_g^-$ (переход Герцберга I) для состояния $\text{O}_2(A^3\Sigma_u^+)$, или, соответственно, для всех переходов с колебательного уровня v' состояния $A^1\Delta_u$ на $a^1\Delta_g$ (переход Чемберлена) для состояния $\text{O}_2(A^1\Delta_u)$, [9].

При расчете же концентраций возбужденного кислорода O_2 для Венеры воспользуемся несколько измененной формулой:

$$[\text{O}_2] = q_{v'} \cdot \alpha \cdot k_2 \cdot [\text{O}]^2 \cdot [\text{CO}_2] / (A_{v'} + k_{3a} \cdot [\text{CO}_2] + k_{3b} \cdot [\text{O}_2]), \quad (5)$$

где α и $q_{v'}$ – квантовые выходы всего состояния $c^1\Sigma_u^-$, v' или, соответственно, всего состояния $A^1\Delta_u$, v' при тройных столкновениях (1) [7], соответственно, k_2 – константа скорости реакции рекомбинации при тройных столкновениях (1) [8], k_{3a} и k_{3b} – константы скоростей реакций (3a) и (3b), $A_{v'}$ – сумма коэффициентов Эйнштейна для всех переходов с колебательного уровня v' состояния $c^1\Sigma_u^-$ на $X^3\Sigma_g^-$ (переход Герцберга II) для состояния $\text{O}_2(c^1\Sigma_u^-)$, или, соответственно, для всех переходов с колебательного уровня v' состояния $A^1\Delta_u$ на $a^1\Delta_g$ (переход Чемберлена) для состояния $\text{O}_2(A^1\Delta_u)$ [9].

При этом учитываем, что для состояния $\text{O}_2(A^1\Delta_u)$ складывается сумма коэффициентов Эйнштейна для всех переходов с колебательного уровня v' состояния $A^1\Delta_u$ на $a^1\Delta_g$ (переход Чемберлена) и сумма коэффициентов Эйнштейна для всех переходов с колебательного уровня v' состояния $A^1\Delta_u$ на $X^3\Sigma_g^-$ (переход Герцберга III). Это выполняется, поскольку с состояния $\text{O}_2(A^1\Delta_u, v')$ осуществляется и переход Герцберга III, и переход Чемберлена.

Константа скорости реакции рекомбинации при тройных столкновениях k_2 ($\text{см}^6 \text{с}^{-1}$) применялась как рассчитанная величина в зависимости от температуры атмосферы на рассмотренном интервале высот согласно [8]; концентрация азота $[\text{N}_2]$ значительно превышает концентрации остальных составляющих в атмосфере Земли, поэтому учитывается в формуле (4); соответственно, концентрация углекислого газа CO_2 значительно превышает концентрации остальных составляющих в атмосфере Венеры, поэтому учитывается в формуле (5); константы гашения электронно-возбужденного кислорода при двойных столкновениях молекулярного кислорода с частицами атмосферных составляющих k_{na} ($\text{см}^3 \text{с}^{-1}$) и k_{nb} ($\text{см}^3 \text{с}^{-1}$) коэффициенты Эйнштейна для всех спонтанных переходов – согласно [9], квантовый выход α – согласно [10].

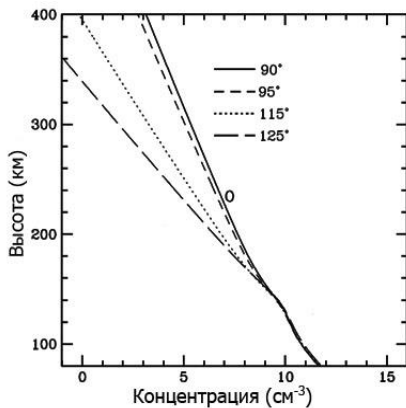


Рисунок 2. Сравнение профилей нейтральной плотности O из модели VTS3 для 90° (сплошные кривые), 95° (короткая пунктирная кривая), 115° (пунктирные кривые) и 125° (длинные штриховые кривые) SZA модели [11].

К сожалению, мы не нашли сведений о сезонном распределении атомарного кислорода на Венере. Можно лишь сказать о распределении атомарного кислорода O для различных значений солнечного зенитного угла (SZA), поскольку SZA меняется как в зависимости от вращения планеты вокруг своей оси, так и в зависимости от вращения планеты вокруг Солнца. Как видно из рисунка 2, профили плотности O для разных моделей SZA почти одинаковы до высоты около 142 км [11], в то время как наша расчётная высота распределения атомарного кислорода на Венере до 130 км. Выше этой высоты профиль O совпадает с профилем модели SZA для 90°.

3. Результаты моделирования

Значения интегральной светимости (свечения в столбе) I ($\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$) для различных полос Герцберга I и Чемберлена рассчитывались по формуле:

$$I_{(\nu' \rightarrow \nu'')} = \int [\text{O}_2(\text{A}^3\Sigma_u^+, \text{A}^1\Delta_u, \nu')] A_{(\nu' \rightarrow \nu'')} dh, \quad (6)$$

где $A_{(\nu' \rightarrow \nu'')}$ - коэффициент Эйнштейна для излучательного перехода [9], dh – приращение высоты.

Рассчитанные значения интегральной светимости (свечения в столбе) I ($\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$) для различных полос Герцберга I и Чемберлена, обусловленных излучательными переходами, представленных на рис. 1, за октябрь 1976 и 1986 гг. (условия низкой солнечной активности $F_{10.7} = 75$). Как показали расчеты, наблюдается расхождение рассчитанных с экспериментальными значениями для 3 и 4 колебательных уровней для полос Герцберга I.

В работе [6] рассчитанные константы для процессов гашения электронного возбуждения показали хорошее согласие с результатами лабораторных измерений. Что касается квантовых выходов $q_{\nu'}$, то при оценке их в [7] изначально использовалась аналитическая формула, которая могла давать погрешность для колебательных уровней с малыми значениями. Аналитическая формула для расчета квантовых выходов $q_{\nu'}$ была представлена в [7]:

$$q_{\nu'} \sim \exp[-(E_{\Lambda(\nu')} - E_0)^2/\beta^2], \quad (7)$$

где $E_0=40000\text{ см}^{-1}$, $\beta=1500\text{ см}^{-1}$ – параметры, определённые методом наименьших квадратов путем сравнения рассчитанных колебательных населенностей состояния $\text{A}^3\Sigma_u^+$ с результатами наземных наблюдений. Формула (7) была использована для расчета значений $q_{\nu'}$, при этом было произведена нормировка каждого значения квантовых выходов, чтобы сумма была равна единице. Рассчитанные значения $q_{\nu'}$ приведены в табл. 1. Поэтому мы в настоящих расчетах варьируем значения нормирующих коэффициентов, увеличив их значения приблизительно на 1/3 для 3 и 4 колебательных уровней. Соответственно, значения нормирующих коэффициентов для других колебательных уровней были уменьшены. В табл. 1 представлены исходные нормирующие коэффициенты согласно [7] и изменённые.

Таблица 1. Квантовые выходы $q_{\nu'}$ колебательного уровня ν' при тройных столкновениях (1): согласно [7] и изменённые в данной работе.

ν'	энергия $E_{\nu'}$	$q_{\nu'}$ согласно [7]	Изменённые $q_{\nu'}$
0	35010,2	3,23E-06	3,27E-06
1	35784,6	7,77E-05	7,77E-05
2	36528,6	9,87E-04	9,87E-04
3	37239,6	7,07E-03	9,43E-03
4	37914,9	3,03E-02	5,04E-02
5	38551,0	8,22E-02	8,22E-02
6	39143,3	1,51E-01	1,51E-01
7	39686,0	2,00E-01	1,93E-01
8	40171,6	2,06E-01	1,81E-01
9	40589,5	1,79E-01	1,88E-01
10	40925,8	1,43E-01	1,44E-01
	Сумма:	1,00E+00	1,00E+00

При использовании измененных квантовых выходов q_{ν} достигнуто лучшее согласие рассчитанных спектров интегральной светимости возбужденного кислорода $O_2(A^3\Sigma_u^+, \nu=3-8)$ со спектрами, полученными с летательного аппарата во время миссии космического челнока STS 53, вылетевшего в декабре 1995 года [1]. Это согласие указывает на тот факт, что полученные экспериментальные данные по свечению молекулярных полос могут быть использованы при оценке скоростей образования и гашения различных колебательных уровней электронно-возбужденных состояний при различных столкновительных процессах. В данном случае лучшее согласие результатов расчетов с экспериментальными данными удалось получить благодаря коррекции квантовых выходов q_{ν} .

4. Заключение

Обнаружено принципиальное различие спектров полос молекулярного кислорода в свечении ночного неба Земли и Венеры: широкий спектр полос в свечении атмосферы Земли, система полос Герцберга II, с незначительным вкладом полос Чемберлена в атмосфере Венеры. Причём в ночной атмосфере Земли переходы осуществляются главным образом с ненулевых колебательных уровней состояний $A^3\Sigma_u^+(\nu>0)$ и $A^3\Delta_u(\nu>0)$, а в ночной атмосфере Венеры переходы осуществляются с нулевого колебательного уровня состояний $s^1\Sigma_u^-(\nu=0)$ и $A^3\Delta_u(\nu=0)$.

Достигнуто лучшее согласие рассчитанных спектров интегральной светимости возбужденного кислорода $O_2(A^3\Sigma_u^+, \nu=3-8)$ со спектрами, полученными с летательного аппарата во время миссии космического челнока STS 53, вылетевшего в декабре 1995 года [1]. Сравнение экспериментальных данных с рассчитанными значениями интенсивностей полос показало, что лучшее согласие наблюдается после коррекции квантовых выходов колебательных уровней q_{ν} состояния $A^3\Sigma_u^+$ в результате тройных столкновений (1), которые были получены в [7].

Литература

1. Broadfoot A.L., Bellaire P.J., Jr. Bridging the gap between ground-based and space-based observations of the night airglow // Journal of Geophysical Research, 1999, v.104, №A8, p.17127-17138.
2. Migliorini A., Piccioni G., Gerard J.C., Soret L., Slangier T.G., Politi R., Snels M., Drossart P., Nuccilli F. The characteristics of the O_2 Herzberg II and Chamberlain bands observed with VIRTIS/Venus Express // Icarus, 2013, v.223, №1, p.609-614.
3. Krassovsky V.I., Shefov N.N., Yarin V.I. Atlas of the airglow spectrum 3000-12400 Å // Planetary and Space Science, 1962, v.9, №12, p.883-915.
4. Краснопольский В.А., Крысько А.А., Рогачев В.Н., Паршев В.А. Спектроскопия ночного свечения Венеры на АМС Венера-9 и Венера-10 // Космические исследования, 1976, т.14, №5, с.789-795.
5. Slangier T.G., Black G. The $O_2(C^3\Delta_u \rightarrow a^1\Delta_g)$ bands in the nightglow spectrum of Venus // Geophysical Research Letters, 1978, v.5, №11, p.947-948.
6. Kirillov A.S. Electronic kinetics of molecular nitrogen and molecular oxygen in high-latitude lower thermosphere and mesosphere // Ann. Geophys., 2010, v.28, №1, p.181-192.
7. Кириллов А.С. Моделирование населенностей колебательных уровней состояний молекулярного кислорода, исходных для полос Герцберга, на высотах нижней термосферы и мезосферы // Геомагнетизм и Аэронавигация, 2012, т.52, №2, с.258-264.
8. Gagné M.-É., Melo S.M.L., Lefèvre F., González-Galindo F., Strong K. Modeled O_2 airglow distributions in the Martian atmosphere // Journal of Geophysical Research, 2012, v.117, E06005, doi:10.1029/2011JE003901
9. Bates D.R. Oxygen band system transition arrays // Planet. Space Sci., 1989, v.37, №7, p.881-887.
10. Krasnopolsky V.A. Excitation of the oxygen nightglow on the terrestrial planets // Planet. Space Sci., 2011, v.59, №8, p.754-766.
11. Brecht A.S., Bougher S.W., Gerard J.-C., Soret L. Atomic oxygen distributions in the Venus thermosphere: Comparisons between Venus Express observations and global model simulations // http://Icarus, 2011, 217, 759-766.