

DOI: 10.51981/2588-0039.2021.44.043

## ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ОСНОВНЫХ АТМОСФЕРНЫХ СОСТАВЛЯЮЩИХ ВО ВРЕМЯ ВЫСЫПАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГИЧНЫХ ПРОТОНОВ В СРЕДНЮЮ АТМОСФЕРУ ЗЕМЛИ

А.С. Кириллов, В.Б. Белаховский, Е.А. Маурчев,  
Ю.В. Балабин, А.В. Германенко, Б.Б. Гвоздевский

ФГБНУ «Полярный геофизический институт», г. Апатиты

### Абстракт

В настоящей работе рассмотрена кинетика триплетных ( $A^3\Sigma_u^+$ ,  $B^3\Pi_g$ ,  $W^3\Delta_u$ ,  $V^3\Sigma_u^-$ ,  $C^3\Pi_u$ ) состояний молекулярного азота и синглетных ( $a^1\Delta_g$ ,  $b^1\Sigma_g^+$ ) состояний молекулярного кислорода на высотах средней атмосферы во время вторжения высокоэнергичных протонов. При этом были учтены процессы прямого электронного возбуждения вторгающимися в атмосферу высокоэнергичными протонами и вторичными электронами, процессы спонтанного излучения, а также перенос энергии возбуждения молекул между электронно-возбужденными состояниями  $N_2$  и  $O_2$  при молекулярных столкновениях. Константы скоростей переноса энергии возбуждения между электронно-возбужденными состояниями молекулярного азота и кислорода при столкновениях с молекулами  $N_2$  и  $O_2$  были теоретически рассчитаны согласно квантово-химическим приближениям. Впервые рассмотрена кинетика синглетных состояний  $O_2$  на высотах средней атмосферы как с учетом прямого возбуждения высокоэнергичными протонами и вторичными электронами, так и с учетом процессов переноса электронного возбуждения с метастабильного молекулярного азота  $N_2(A^3\Sigma_u^+, v=0)$  на состояния Герцберга  $O_2$  и перераспределения энергии возбуждения между колебательными уровнями синглетных состояний при неупругих молекулярных столкновениях. Показано, что доминирующий вклад в возбуждение  $O_2(a^1\Delta_g)$  и  $O_2(b^1\Sigma_g^+)$  вносят процессы прямого электронного возбуждения.

### Введение

При вторжении в атмосферу Земли первичных космических лучей (КЛ) протоны составляют около 85 % от их общего количества, остальные частицы – это ядра гелия и элементов с  $Z > 2$ , а также электроны с позитронами. При прохождении через верхние, разреженные, слои атмосферы преобладающим процессом является ионизация, причем наиболее активными здесь являются частицы с энергией до 1 ГэВ. При достижении высоты 10-30 км над уровнем моря все более вероятными становятся неупругие соударения с ядрами атомов воздуха (в основном частицы с энергией более 1 ГэВ с азотом и кислородом) [Дорман, 1975; Широков и Юдин, 1980; Simpson, 1983]. В результате ядерных взаимодействий возникают каскады вторичных частиц различного сорта, условно эту реакцию можно выразить через формулу генерации частиц:



где  $p$  – протоны;  $n$  – нейтроны;  $\pi^\pm$ ,  $\pi^0$  – пионы;  $k^\pm$ ,  $k^0$  – каоны.

Взаимодействие элементарных частиц, образованных в процессе (1), с молекулами составляющих средней атмосферы Земли приводит к образованию потоков вторичных электронов. Неупругие столкновения высокоэнергичных вторичных электронов с молекулами азота и кислорода приводят к образованию электронно-возбужденных молекул  $N_2(A^3\Sigma_u^+$ ,  $B^3\Pi_g$ ,  $W^3\Delta_u$ ,  $V^3\Sigma_u^-$ ,  $C^3\Pi_u$ ),  $N_2(a^1\Sigma_u^-$ ,  $a^1\Pi_g$ ,  $w^1\Delta_u$ ),  $O_2(c^1\Sigma_u^-$ ,  $A^3\Delta_u$ ,  $A^3\Sigma_u^+)$ ,  $O_2(a^1\Delta_g$ ,  $b^1\Sigma_g^+)$ . Поскольку молекулярный азот и молекулярный кислород доминируют в составе атмосферы Земли, спектры свечения атмосферы содержат множество полос азота и кислорода. В работах [Кириллов и Белаховский, 2020; Kirillov and Belakhovskiy, 2019, 2021] были проведены расчеты профилей интенсивностей свечения полос первой (1PG) и второй положительных (2PG) систем молекулярного азота, а также полос Инфракрасной Атмосферной (IRAtm) и Атмосферной (Atm) систем молекулярного кислорода, обусловленных спонтанными излучательными переходами между электронно-возбужденными состояниями молекул  $N_2$  и  $O_2$



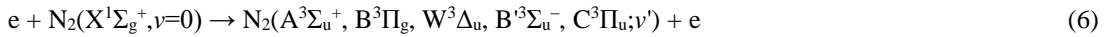


на разных высотах верхней и средней атмосферы во время высыпания высокоэнергичных электронов в атмосферу Земли.

В настоящей работе рассмотрена кинетика триплетных ( $A^3\Sigma_u^+$ ,  $B^3\Pi_g$ ,  $W^3\Delta_u$ ,  $B^3\Sigma_u^-$ ,  $C^3\Pi_u$ ) состояний молекулярного азота и синглетных ( $a^1\Delta_g$ ,  $b^1\Sigma_g^+$ ) состояний молекулярного кислорода на высотах средней атмосферы во время события GLE (Ground level enhancement) №69 от 20 января 2005 г., при котором произошло возрастание скорости счета нейтронных мониторов, возникшее вследствие увеличения числа протонов (в основном с энергией до 10 ГэВ) в потоке первичных КЛ.

### Моделирование электронной кинетики молекулярного азота и молекулярного кислорода в средней атмосфере Земли

Кинетическая модель электронно-возбужденного триплетного молекулярного азота для высот средней атмосферы Земли во время высыпания высокоэнергичных электронов (ВВЭ) представлена в работах [Kirillov and Belakhovsky, 2019; Кириллов и Белаховский, 2020]. В настоящих расчетах при вторжении КЛ аналогично рассмотрены процессы возбуждения пяти триплетных состояний  $N_2$  вторичными электронами, образованных в процессах ионизации элементарными частицами, образованными в процессах (1):

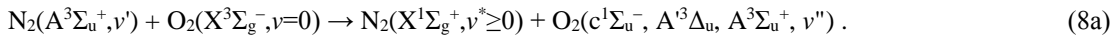


При этом учтены следующие колебательные уровни указанных пяти состояний:  $A^3\Sigma_u^+(v'=0-29)$ ,  $B^3\Pi_g(v'=0-18)$ ,  $W^3\Delta_u(v'=0-21)$ ,  $B^3\Sigma_u^-(v'=0-15)$ ,  $C^3\Pi_u(v'=0-4)$ . Кроме спонтанных переходов (2) и (3) с излучением 1PG и 2PG полос, также было учтено излучение полос Ву-Бенеша (WB) (переход  $W^3\Delta_u, v' \leftrightarrow B^3\Pi_g, v''$ ) и полос инфракрасного послесвечения (IRAG) (переход  $B^3\Sigma_u^-, v' \leftrightarrow B^3\Pi_g, v''$ ), а также спонтанные переходы  $A^3\Sigma_u^+, v' \rightarrow X^1\Sigma_g^+, v''$  (полосы Вегарда-Каплана) (VK) [Gilmore et al., 1992].

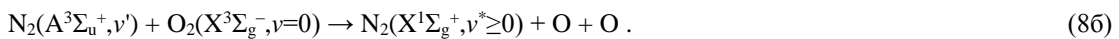
Кинетическая модель электронно-возбужденного синглетного молекулярного кислорода для высот средней атмосферы Земли во время ВВЭ представлена в работе [Kirillov and Belakhovsky, 2021]. В настоящих расчетах интенсивностей свечения полос молекулярного кислорода при высыпании КЛ аналогично [Kirillov and Belakhovsky, 2021] рассмотрены процессы возбуждения двух синглетных состояний  $O_2$  вторичными электронами:



а также процесс переноса энергии электронного возбуждения метастабильного молекулярного азота при столкновении с молекулами  $O_2$  и возбуждение состояний Герцберга  $c^1\Sigma_u^-$ ,  $A^3\Delta_u$ ,  $A^3\Sigma_u^+$  у молекулярного кислорода



В дальнейшем в результате излучательных процессов и внутримолекулярных и межмолекулярных переносов энергии при неупругих молекулярных столкновениях энергия электронного возбуждения состояний Герцберга  $c^1\Sigma_u^-$ ,  $A^3\Delta_u$ ,  $A^3\Sigma_u^+$  трансформируется в энергию возбуждения синглетных состояний  $a^1\Delta_g$  и  $b^1\Sigma_g^+$  молекулярного кислорода. Сравнение рассчитанных констант процесса (8a) со всеми имеющимися в мировой научной литературе экспериментальными данными приведено в [Kirillov and Belakhovsky, 2021]. Как показали теоретические расчеты, при исследовании роли межмолекулярных процессов переноса энергии электронного возбуждения (8a) в возбуждении молекул кислорода необходимо учитывать только нулевой колебательный уровень  $N_2(A^3\Sigma_u^+, v'=0)$ . Для неупругих столкновений молекул  $N_2(A^3\Sigma_u^+, v' > 0)$  с  $O_2$  доминирующим каналом взаимодействий является процесс диссоциации молекулы  $O_2$  и образование двух атомов кислорода [Kirillov and Belakhovsky, 2021]

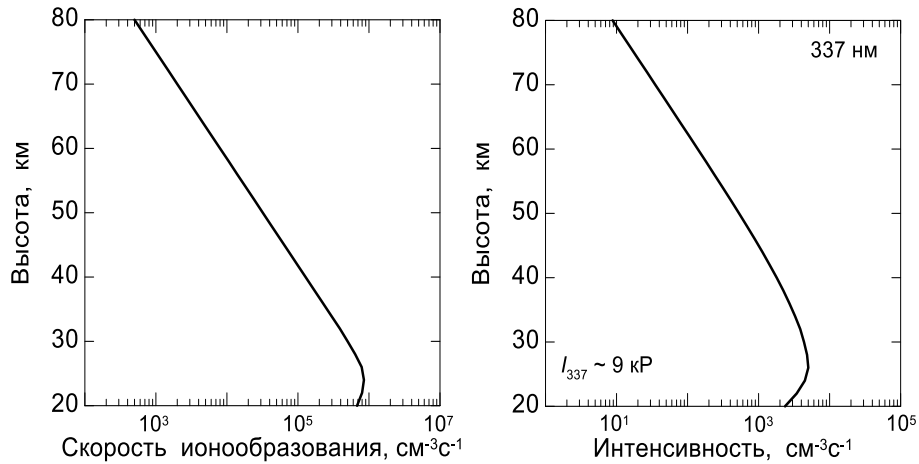


### Результаты расчетов интенсивностей полос $N_2$ и $O_2$

В настоящей работе рассмотрено событие GLE, которому сопутствовало увеличение скорости образования пар ионов на высотах от 0 до 80 км. Для расчетов прохождения частиц КЛ через атмосферу Земли используется пакет для разработки программ GEANT4, при помощи которого создаются соответствующие модели. В Полярном геофизическом институте был разработан программный пакет RUSCOSMICS, который как более современный инструмент для замены PLANETOCOSMICS [Маурчев и др., 2015, 2019; Маурчев и Балабин, 2016]. Описание методики получения данных спектров первичных КЛ, используемых в моделировании, приводится в работе [Vashenyuk et al., 2011].

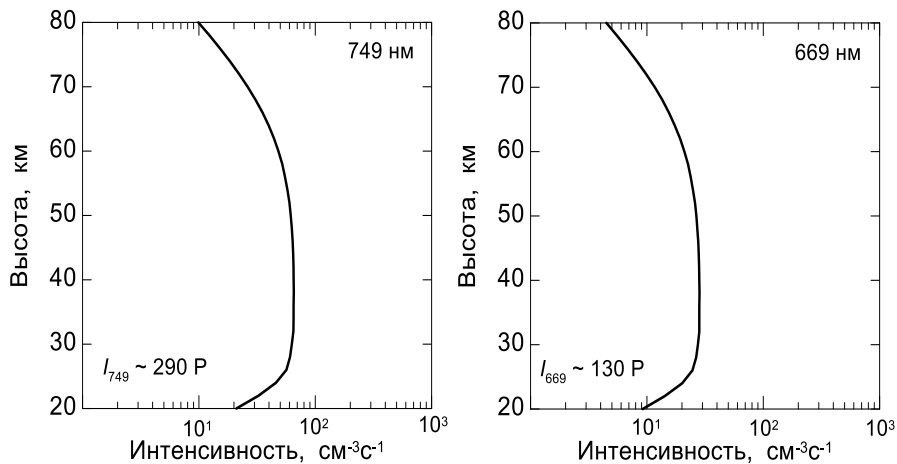
При расчете объемных интенсивностей свечения полос первой и второй положительных систем молекулярного азота воспользуемся решением систем уравнений [Kirillov and Belakhovsky, 2019; Кириллов и

Белаховский, 2020] для получения концентраций электронно-возбужденных молекул  $N_2(B^3\Pi_g, v')$  и  $N_2(C^3\Pi_u, v')$ . При этом воспользуемся спектром вторичных электронов и набором данных поперечных сечений для молекул  $N_2$  и  $O_2$  [Itikawa, 2006, 2009]. Кроме того, при расчете концентраций  $N_2(C^3\Pi_u, v')$  учтем гашение данного состояния [Kirillov, 2019], поскольку на нижних высотах рассматриваемого диапазона столкновительные времена жизни состояния  $C^3\Pi_u$  становятся порядка излучательных времен или меньше. При расчете объемных интенсивностей свечения полос Инфракрасной Атмосферной и Атмосферной систем молекулярного кислорода воспользуемся решением систем уравнений [Kirillov and Belakhovsky, 2021] для получения концентраций электронно-возбужденных молекул  $O_2(a^1\Delta_g, v')$  и  $O_2(b^1\Sigma_g^+, v')$ .



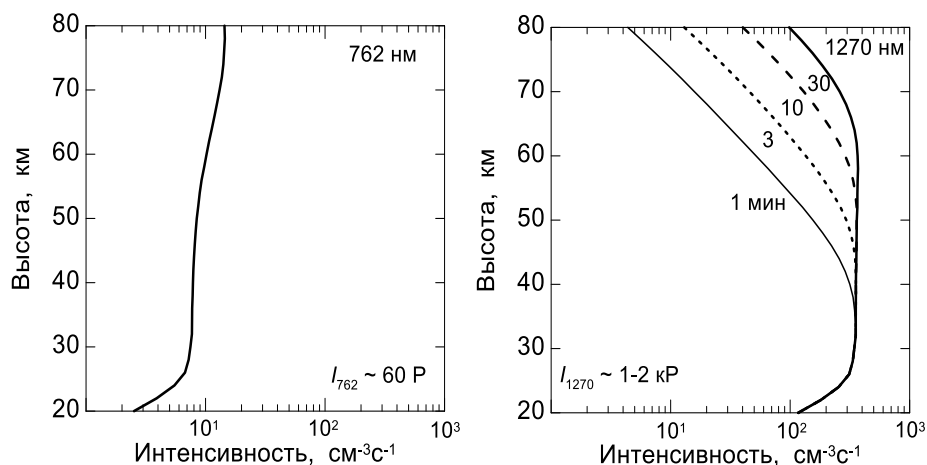
**Рисунок 1.** Профили рассчитанных скоростей ионизации и скоростей объемной интенсивности свечения полосы 337 нм молекулярного азота.

На рис.1 показаны профили рассчитанных скоростей ионизации и скоростей объемной интенсивности свечения полосы 337 нм второй положительной системы  $N_2$ , связанной со спонтанными излучательными переходами (3) с  $v'=0 \rightarrow v''=0$ . Как видно из рис.1, профиль объемной интенсивности полосы 337 нм во многом повторяет профиль скорости ионизации. Лишь на нижних высотах рассмотренного интервала высот начинается сказываться гашение состояния  $C^3\Pi_u$  [Kirillov, 2019]. Интегральная интенсивность свечения полосы 337 нм согласно расчетам  $I_{337} \sim 9$  кР (1 Рэлей =  $10^6$  фотон/см<sup>2</sup>·с). На рис.2 показаны профили рассчитанных скоростей объемных интенсивностей свечения полос 749 и 669 нм первой положительной системы, обусловленных спонтанными излучательными переходами (2) с  $v'=4 \rightarrow v''=2$  и  $v'=5 \rightarrow v''=2$ , соответственно. Как видно из рис.2, процессы гашения состояния  $B^3\Pi_g$  достаточно эффективны на высотах средней атмосферы Земли. Поэтому рассчитанные интегральные интенсивности свечения полос 749 и 669 нм составляют  $I_{749} \sim 290$  Р и  $I_{669} \sim 130$  Р, а отношения к интенсивности свечения полосы 337 нм второй положительной системы  $I_{749}/I_{337} \sim 3.2 \cdot 10^{-2}$  и  $I_{669}/I_{337} \sim 1.4 \cdot 10^{-2}$ . Эти значения намного меньше соответствующих величин 1.6 и 0.7, рассчитанных в [Кириллов и Белаховский, 2020] для высыпаний авроральных электронов и полученных с помощью результатов измерений оптических спектров полярных сияний во время запусков ракет на острове Хейса в 1972-1973 г.г. [Кириллов и др., 1987].



**Рисунок 2.** Профили рассчитанных скоростей объемной интенсивности свечения полос 749 и 669 нм молекулярного азота.

На рис.3 приведены профили рассчитанных скоростей объемных интенсивностей свечения полос 762 и 1270 нм молекулярного кислорода, связанных со спонтанными излучательными переходами (5) и (4) с  $v'=0 \rightarrow v''=0$ , соответственно. При этом для полосы 1270 нм расчеты приведены для времен  $t=1, 3, 10$  и 30 минут после начала высыпания высокоэнергичных протонов. Поскольку излучательное время жизни состояния  $a^1\Delta_g$  больше часа, а константа скорости гашения состояния  $a^1\Delta_g$  принимает очень маленькие значения, для высот выше  $\sim 40$  км наблюдается рост  $O_2(a^1\Delta_g, v=0)$  на протяжении десятков минут высыпания КЛ. Рассчитанная интегральная интенсивность Инфракрасной Атмосферной полосы  $I_{1270}$  варьируется от  $\sim 1$  кР при  $t=1$  минута до  $\sim 2$  кР при  $t=30$  минут.



**Рисунок 3.** Профили рассчитанных скоростей объемной интенсивности свечения полос 762 и 1270 нм молекулярного кислорода.

### Заключение

На основании моделей электронной кинетики триплетных состояний молекулярного азота и синглетных состояний молекулярного кислорода для средней атмосферы Земли, представленных в [Кириллов и Белаховский, 2020; Kirillov and Belakhovsky, 2019, 2021], проведен расчет профилей интенсивностей свечения полос первой и второй положительных систем  $N_2$ , Инфракрасной Атмосферной и Атмосферной систем  $O_2$  в случае высыпания в атмосферу Земли высокоэнергичных протонов во время события GLE (Ground level enhancement) №69 от 20 января 2005 г. Расчеты показали, что практически на всем рассматриваемом интервале высот 20-80 км имеется значительный вклад процессов гашения состояния  $B^3\Pi_g$  при молекулярных столкновениях. Это приводит к существенному уменьшению отношения интегральных интенсивностей  $I_{749}/I_{337}$  и  $I_{669}/I_{337}$  по сравнению с авроральными высыпаниями электронов [Кириллов и др., 1987; Кириллов и Белаховский, 2020]. Кроме того, кинетика синглетных состояний  $O_2$  на высотах средней атмосферы во время высыпания протонов рассмотрены как с учетом прямого возбуждения высокоэнергичными частицами, так и с учетом межмолекулярных процессов переноса электронного возбуждения. Показано, что процессы гашения состояния  $b^1\Sigma_g^+$  во время неупругих молекулярных столкновений приводят к значительному понижению интенсивностей свечения Атмосферных полос на высотах средней атмосферы.

**Благодарность.** Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-77-10018) «Потоки высокоэнергичных заряженных частиц в околоземном космическом пространстве, и их воздействие на атмосферу Арктики».

### Литература

- Дорман Л.И. Экспериментальные и теоретические основы астрофизики космических лучей. 1975, М.: Наука, 462 с.
- Кириллов А.С., Белаховский В.Б. Свечение полос молекулярного азота в атмосфере Земли во время высыпания высокоэнергичных электронов // Геомагнетизм и аэронавигация, 2020, т.60, №1, с.93–98.
- Кириллов А.С., Ягодкина О.И., Иванов В.Е., Воробьев В.Г. Механизмы возбуждения 1PG системы  $N_2$  в полярных сияниях // Геомагнетизм и аэронавигация, 1987, т.27, №3, с.419-427.
- Маурчев Е.А., Балабин Ю.В., Гвоздевский Б.Б., Вашенюк Э.В. Новая численная модель для исследования космических лучей в атмосфере Земли // Известия РАН. Серия физическая, 2015, т.79, №5, с.711-713.

- Маурчев Е.А., Балабин Ю.В.** Модельный комплекс для исследования космических лучей RUSCOSMICS // Солнечно-земная физика, **2016**, т.2, №4, с.3-8.
- Маурчев Е.А., Михалко Е.А., Германенко А.В., Балабин Ю.В., Гвоздевский Б.Б.** Программный комплекс RUSCOSMICS как инструмент для оценки скорости ионизации вещества атмосферы Земли протонами космических лучей // Известия РАН. Серия физическая, **2019**, т.83, №5, с.712-716.
- Широков Ю.М., Юдин Н.П.** Ядерная физика, учебное пос.. **1980**, М.: Наука. 729 с.
- Gilmore F.R., Laher R.R., Espy P.J.** Franck-Condon factors, r-centroids, electronic transition moments, and Einstein coefficients for many nitrogen and oxygen band systems // J. Phys. Chem. Ref. Data, **1992**, v.21, №5, p.1005-1107.
- Itikawa Y.** Cross sections for electron collisions with nitrogen molecules // J. Phys. Chem. Ref. Data, **2006**, v.35, №1, p.31-53.
- Itikawa Y.** Cross sections for electron collisions with oxygen molecules // J. Phys. Chem. Ref. Data, **2009**, v.38, №1, p.1-20.
- Kirillov A.S.** Intermolecular electron energy transfer processes in the quenching of  $N_2(C^3\Pi_u, v=0-4)$  by collisions with  $N_2$  molecules // Chem. Phys. Lett., **2019**, v.715, p.263-267.
- Kirillov A.S., Belakhovsky V.B.** The kinetics of  $N_2$  triplet electronic states in the upper and middle atmosphere during relativistic electron precipitations // Geophys. Res. Lett., **2019**, v.46, №13, p.7734-7743.
- Kirillov A.S., Belakhovsky V.B.** The kinetics of  $O_2$  singlet electronic states in the upper and middle atmosphere during energetic electron precipitation // J. Geophys. Res.: Atmosphere, **2021**, v.126, №5, e2020JD033177.
- Simpson J.A.** Introduction to the galactic cosmic ray radiation // Composition and origin of cosmic rays, **1983**, p.1-24.
- Vashenyuk E.V., Balabin Yu.V., Gvozdevsky B.B.** Features of relativistic solar proton spectra derived from ground level enhancement events (GLE) modeling // Astrophysics and Space Sciences Transactions, **2011**, v.7, №4, p.459-463.