

DOI: 10.51981/2588-0039.2022.45.035

КИНЕТИКА N₂ И O₂ В СРЕДНЕЙ АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ ВО ВРЕМЯ СОБЫТИЙ GLE

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

Полярный геофизический институт, Апатиты

Абстракт

Рассмотрена кинетика пяти триплетных (A³Σ_u⁺, B³Π_g, W³Δ_u, B³Σ_u⁻, C³Π_u), трех синглетных (a¹Σ_u⁻, a¹Π_g, w¹Δ_u) состояний молекулярного азота и синглетных (a¹Δ_g, b¹Σ_g⁺) состояний молекулярного кислорода на высотах средней атмосферы во время вторжения высокоэнергичных протонов для трех событий Ground Level Enhancements: GLE65 (28.10.2003), GLE67 (02.11.2003), GLE69 (20.01.2005). 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 N₂ и O₂ при молекулярных столкновениях. Кинетика синглетных состояний O₂ 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 N₂(A³Σ_u⁺, v=0) на состояния Герцберга O₂ и перераспределения энергии возбуждения между колебательными уровнями синглетных состояний при неупругих молекулярных столкновениях. Расчеты показали, что практически на всем рассматриваемом интервале высот 20-80 км имеется значительный вклад процессов гашения состояний B³Π_g и a¹Π_g молекулярного азота при молекулярных столкновениях, а также состояний b¹Σ_g⁺ и a¹Δ_g молекулярного кислорода.

Введение

Солнечные протоны, проникающие в атмосферу Земли, характеризуются как мягкими энергетическими спектрами (энергии порядка нескольких десятков и сотен МэВ), так и релятивистскими энергиями. Релятивистские высокоэнергичные протоны обнаруживаются наземными нейтронными мониторами, размещенными в полярных областях, как Ground Level Enhancements события (события GLE). 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; π[±], π⁰ – пионы; k[±], k⁰ – 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 триплетных A³Σ_u⁺, B³Π_g, W³Δ_u, B³Σ_u⁻, C³Π_u и синглетных a¹Σ_u⁻, a¹Π_g, w¹Δ_u состояний у молекулярного азота N₂, состояний Герцберга c¹Σ_u⁻, A³Δ_u, A³Σ_u⁺ и синглетных состояний a¹Δ_g, b¹Σ_g⁺ у молекулярного кислорода. В работах [Кириллов и Белаховский, 2020а, 2020б; Кириллов и др., 2021; Kirillov and Belakhovsky, 2019, 2021] были проведены расчеты профилей интенсивностей свечения полос первой (1PG) и второй (2PG) положительных систем молекулярного азота, полос Лаймана-Бирджа-Хопфилда (LBH), а также полос Инфракрасной Атмосферной (IRAtm) и Атмосферной (Atm) систем молекулярного кислорода, обусловленных спонтанными излучательными переходами между электронно-возбужденными состояниями молекул N₂ и O₂



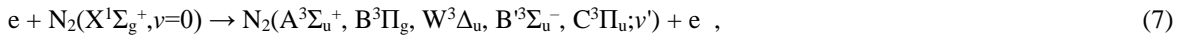


на разных высотах верхней и средней атмосферы во время высыпания высокоэнергичных электронов и протонов в атмосферу Земли.

В настоящей работе рассмотрены механизмы образования электронно-возбужденных триплетных ($A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_g$, $W^3\Delta_u$, $B^3\Sigma_u^-$, $C^3\Pi_u$), синглетных ($a^1\Sigma_u^-$, $a^1\Pi_g$, $w^1\Delta_u$) состояний молекулярного азота и синглетных ($a^1\Delta_g$, $b^1\Sigma_g^+$) состояний молекулярного кислорода на высотах средней атмосферы при высыпании космических лучей (КЛ) во время событий GLE: GLE65 (28.10.2003), GLE67 (02.11.2003), GLE69 (20.01.2005), при которых произошло возрастание скорости счета нейтронных мониторов, возникшее вследствие увеличения числа протонов (в основном с энергией до 10 ГэВ) в потоке первичных КЛ.

Механизмы образования электронно-возбужденных состояний молекулярного азота и молекулярного кислорода в средней атмосфере Земли во время GLE

Кинетическая модель электронно-возбужденного триплетного и синглетного молекулярного азота для высот средней атмосферы Земли во время высыпания высокоэнергичных электронов (ВВЭ) и КЛ представлена в работах [Kirillov and Belakhovsky, 2019; Кириллов и Белыховский, 2020а, 2020б; Кириллов и др., 2021]. В настоящих расчетах при вторжении КЛ аналогично рассмотрены процессы возбуждения пяти триплетных и трех синглетных состояний N₂ вторичными электронами, образованных в процессах ионизации элементарными частицами, образованными в процессах (1):

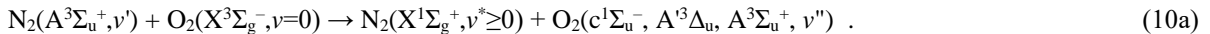


При этом учтены следующие колебательные уровни указанных состояний: $A^3\Sigma_u^+(v'=0-29)$, $B^3\Pi_g(v'=0-18)$, $W^3\Delta_u(v'=0-21)$, $B^3\Sigma_u^-(v'=0-15)$, $C^3\Pi_u(v'=0-4)$, $a^1\Sigma_u^-(v'=0-17)$, $a^1\Pi_g(v'=0-6)$, $w^1\Delta_u(v'=0-13)$. Кроме спонтанных переходов (2-4) с излучением 1PG, 2PG и LBH полос, также было учтено излучение полос Ву-Бенеша (WB) (переход $W^3\Delta_u, v' \leftrightarrow B^3\Pi_g, v''$), полос инфракрасного послесвечения (IRAG) (переход $B^3\Sigma_u^-, v' \leftrightarrow B^3\Pi_g, v''$), также спонтанные переходы $A^3\Sigma_u^+, v' \rightarrow X^1\Sigma_g^+, v''$ (полосы Вегарда-Каплана) (VK), излучение инфракрасных полос двух систем МакФарлана (переходы $w^1\Delta_u, v' \leftrightarrow a^1\Pi_g, v''$ и $a^1\Sigma_u^-, v' \leftrightarrow a^1\Pi_g, v''$), а также спонтанные переходы $a^1\Sigma_u^-, v' \rightarrow X^1\Sigma_g^+, v''$ (полосы Огавы-Танаки-Уилкинсона-Малликена) [Gilmore et al., 1992; Casassa and Golde, 1979].

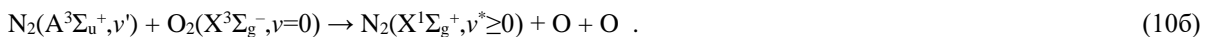
Кинетическая модель электронно-возбужденного синглетного молекулярного кислорода для высот средней атмосферы Земли во время ВВЭ и высыпания КЛ представлена в работах [Кириллов и др., 2021; Kirillov and Belakhovsky, 2021]. В настоящих расчетах интенсивностей свечения полос молекулярного кислорода при высыпании КЛ аналогично [Кириллов и др., 2021; Kirillov and Belakhovsky, 2021] рассмотрены процессы возбуждения двух синглетных состояний O₂ вторичными электронами:



а также процесс переноса энергии электронного возбуждения метастабильного молекулярного азота при столкновении с молекулами O₂ 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 (10a) 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 (10a) 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 O₂ доминирующим каналом взаимодействий является процесс диссоциации молекулы O₂ и образование двух атомов кислорода [Kirillov and Belakhovsky, 2021]



Результаты расчетов интенсивностей полос N₂ и O₂ для трех событий GLE65, GLE67, GLE69

В настоящей работе рассмотрены три события GLE65 (28.10.2003), GLE67 (02.11.2003), GLE69 (20.01.2005), которым 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, полос Лаймана-Бирджа-Хопфилда молекулярного азота воспользуемся решением систем уравнений [Kirillov and Belakhovsky, 2019; Кириллов и Белаховский, 2020а, 2020б] для получения концентраций электронно-возбужденных молекул $N_2(B^3\Pi_g, v')$, $N_2(C^3\Pi_u, v')$ и $N_2(a^1\Pi_g, v')$. 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 [Кириллов и др., 2021; Kirillov and Belakhovsky, 2021] для получения концентраций электронно-возбужденных молекул $O_2(a^1\Delta_g, v')$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+, v')$.

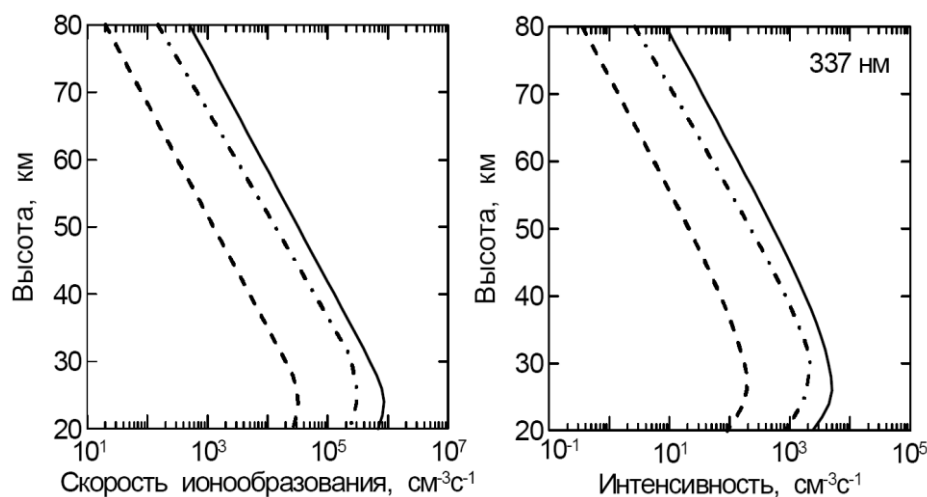


Рисунок 1. Профили рассчитанных скоростей ионообразования и скоростей объемной интенсивности свечения полосы 337 нм молекулярного азота для GLE65 (штрихи), GLE67 (штрих-пунктиры), GLE69 (сплошные линии).

На рис. 1 показаны профили рассчитанных скоростей ионообразования и скоростей объемной интенсивности свечения полосы 337 нм второй положительной системы N_2 , связанной со спонтанными излучательными переходами (3) с $v'=0 \rightarrow v''=0$ для GLE65, GLE67, GLE69. Как видно из рис. 1, профили объемной интенсивности полосы 337 нм во многом повторяют профили скоростей ионообразования. Лишь на нижних высотах рассмотренного интервала высот начинается сказываться гашение состояния $C^3\Pi_u$ [Kirillov, 2019].

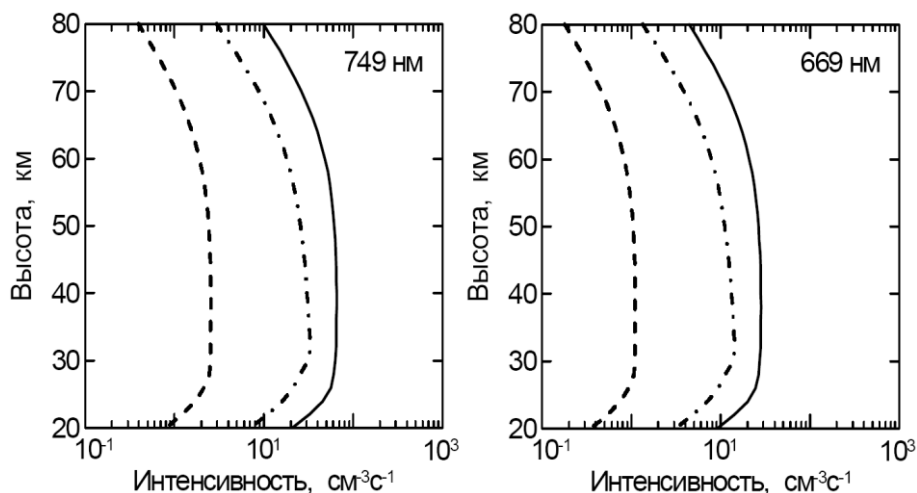


Рисунок 2. Профили рассчитанных скоростей объемной интенсивности свечения полос 749 и 669 нм молекулярного азота для GLE65, GLE67, GLE69. Обозначения как на рис. 1.

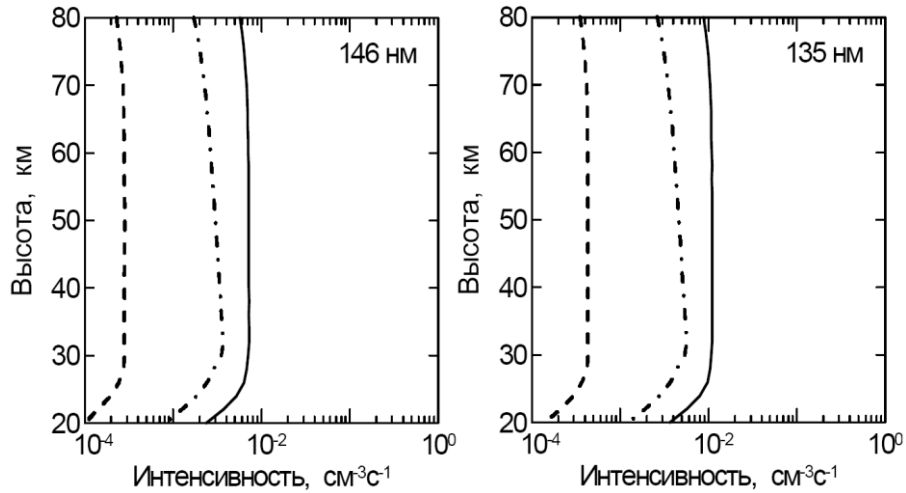


Рисунок 3. Профили рассчитанных скоростей объемной интенсивности свечения полос 146 и 135 нм молекулярного азота для GLE65, GLE67, GLE69. Обозначения как на рис. 1.

Аналогично 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, для GLE65, GLE67, GLE69. Как видно из рис. 2, профили свечения данных полос значительно отличаются от профилей скоростей ионообразования (рис. 1), что указывает на то, что процессы гашения состояния $V^3\Pi_g$ достаточно эффективны на высотах средней атмосферы Земли. И на рис. 3 представлены профили рассчитанных скоростей объемных интенсивностей свечения полос Лаймана-Бирджа-Хопфилда 146 и 135 нм, обусловленных спонтанными излучательными переходами (4) с $v'=1 \rightarrow v''=1$ и $v'=3 \rightarrow v''=0$, соответственно, для GLE65, GLE67, GLE69. Как и в случае триплетного состояния $V^3\Pi_g$ для синглетного состояния $a^1\Pi_g$ наблюдается достаточно эффективное гашение на высотах средней атмосферы Земли.

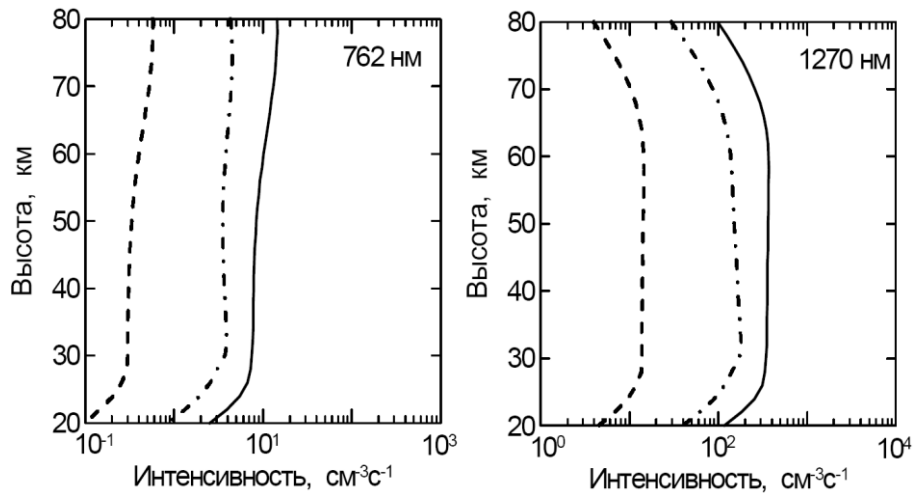


Рисунок 4. Профили рассчитанных скоростей объемной интенсивности свечения полос 762 и 1270 нм молекулярного кислорода для GLE65, GLE67, GLE69. Обозначения как на рис. 1.

На рис. 4 приведены профили рассчитанных скоростей объемных интенсивностей свечения полос 762 и 1270 нм молекулярного кислорода, связанных со спонтанными излучательными переходами (6) и (5) с $v'=0 \rightarrow v''=0$, соответственно, для GLE65, GLE67, GLE69. При этом для полосы 1270 нм расчеты приведены для времени $t=30$ 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 ~ 40 км наблюдается рост $O_2(a^1\Delta_g, v=0)$ на протяжении десятков минут высыпания КЛ [Кириллов и др., 2021]. Из сравнения рис. 1 и рис. 4 наглядно видно, что процессы гашения состояний $b^1\Sigma_g^+$ и $a^1\Delta_g$ во время неупругих молекулярных столкновений достаточно эффективны и приводят к значительному понижению интенсивности свечения Атмосферных и Инфракрасных Атмосферных полос по сравнению со скоростями ионообразования и свечения полосы 337 нм на высотах средней атмосферы.

Заключение

На основании моделей электронной кинетики триплетных состояний молекулярного азота и синглетных состояний молекулярного кислорода для средней атмосферы Земли, представленных в [Кириллов и Белаховский, 2020а, 2020б; Кириллов и др., 2021; Kirillov and Belakhovsky, 2019, 2021], проведен расчет профилей интенсивностей свечения полос первой и второй положительных систем N₂, полос Лаймана-Бирджа-Хопфилда N₂, полос Атмосферной и Инфракрасной Атмосферной систем O₂ в случае высыпания в атмосферу Земли высокоэнергичных протонов во время событий GLE65 (28.10.2003), GLE67 (02.11.2003), GLE69 (20.01.2005). Расчеты показали, что практически на всем рассматриваемом интервале высот 20-80 км имеется значительный вклад процессов гашения состояний B³Π_g и a¹Π_g молекулярного азота при молекулярных столкновениях. Кроме того, кинетика синглетных состояний O₂ 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 состояний b¹Σ_g⁺ и a¹Δ_g во время неупругих молекулярных столкновений приводят к значительному понижению интенсивностей свечения Атмосферных и Инфракрасных 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 аэрономия, 2020а, т.60, №1, с.93–98.
- Кириллов А.С., Белаховский В.Б. Свечение полос Лаймана–Бирджа–Хопфилда N₂ в атмосфере Земли во время высыпания высокоэнергичных электронов // Геомагнетизм и аэрономия, 2020б, т.60, №6, с.796–802.
- Кириллов А.С., Белаховский В.Б., Маурчев Е.А., Балабин Ю.В., Германенко А.В., Гвоздевский Б.Б. Свечение молекулярного азота и молекулярного кислорода в средней атмосфере Земли во время высыпания высокоэнергичных протонов // Геомагнетизм и аэрономия, 2021, т.61, №6, с.769–776.
- 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.
- Casassa M.P., Golde M.P. Vacuum UV emission by electronically-excited N₂: The radiative lifetime of the N₂(a¹Σ_u⁻) state // Chem. Phys. Lett., 1979, v.60, № 2, p.281–285.
- 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 N₂(C³Π_u, v=0-4) by collisions with N₂ molecules // Chem. Phys. Lett., 2019, v.715, p.263-267.
- Kirillov A.S., Belakhovsky V.B. The kinetics of N₂ 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 O₂ 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.