

DOI: 10.51981/2588-0039.2023.46.039

ИНФРАКРАСНОЕ СВЕЧЕНИЕ ОКИСИ АЗОТА В СРЕДНЕЙ АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ ВО ВРЕМЯ GLE69

А.С. Кириллов¹, В.Б. Белаховский¹, Е.А. Маурчев²,
Ю.В. Балабин¹, А.В. Германенко¹, Б.Б. Гвоздевский¹

¹Полярный геофизический институт, Апатиты, Мурманская область

²Институт земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова
РАН, Москва, Троицк

Аннотация

Релятивистские энергетические протоны обнаруживаются наземными нейтронными мониторами, размещенными в полярных областях. Использование данных сети нейтронных мониторов позволяет определять спектры высокоэнергичных протонов, выбрасываемых в атмосферу Земли во время Ground Level Enhancements (GLE). В настоящей работе рассмотрены механизмы образования колебательно-возбужденных молекул окиси азота NO на высотах средней атмосферы Земли при высыпании высокоэнергичных протонов. Расчеты сделаны для события GLE69 (20.01.2005). Основные результаты этих расчетов состоят в следующем. Проведен расчет колебательных заселенностей $\text{NO}(X^2\Pi, \nu=1-20)$ во время события GLE69 на высотах средней атмосферы. Показано, что химическая реакция метастабильного атомарного азота $\text{N}(^2D)$ с молекулярным кислородом O_2 является основным механизмом образования колебательно-возбужденных молекул окиси азота $\text{NO}(X^2\Pi, \nu>0)$ и излучения 5.3 мкм и 2.7 мкм инфракрасных полос NO на высотах потери энергии высыпающихся протонов. Свечение данных инфракрасных полос происходит при спонтанных одноквантовых $\Delta\nu=1$ и двухквантовых $\Delta\nu=2$ переходах в колебательно-возбужденной молекуле $\text{NO}(X^2\Pi, \nu>0)$. Рассчитанные интенсивности излучения 5.3 мкм сравниваются с экспериментальными данными прибора SABER TIMED, полученными во время GLE69 20 января 2005 г. Сравнение показывает, что рассчитанные интенсивности объемного излучения превышают экспериментальные значения.

1. 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). 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^\pm, π^0 – пионы; k^\pm, k^0 – каоны.

Колебательно-возбужденные молекулы NO эффективно образуются на высотах верхней и средней атмосферы и могут играть очень важную роль в инфракрасном радиационном балансе атмосферы Земли (Lopez-Puertas and Taylor, 2001; Funke et al., 2012). Кроме того, нечетный азот эффективно образуется в верхних слоях атмосферы при авроральных высыпаниях и в средней атмосфере при высыпании высокоэнергетических протонов или при импульсных разрядах, связанных со спрайтовыми стримерами. Концентрации оксида азота могут повышаться, оказывая существенное влияние на химический и радиационный баланс полярной верхней и средней атмосферы. Sentman et al. (2008) и Gordillo-Vazques (2008) показали увеличение концентрации NO в средней атмосфере под воздействием спрайтов. Kockarts (1980), Caledonia and Kennealy (1982), Gordiets et al. (1982), Sharma et al. (1996), Kirillov and Aladjev (1998), Mlynczak et al. (2003), Winick et al. (2004), Campbell and Brunger (2007), Venkataramani et al. (2016), Bouziane et al. (2022) исследовали механизмы образования и гибели колебательно-возбужденных молекул NO как для спокойной атмосферы, так и для возмущенной высыпаниями высокоэнергетических частиц. Особое внимание в статьях было уделено инфракрасному излучению 5.3 мкм и 2.7 мкм молекул оксида азота, излучаемых при спонтанных переходах.



где $X^2\Pi$ — основное состояние молекулы окиси азота. В этих работах было показано, что интенсивность инфракрасного излучения в спектре атмосферы увеличивается при возмущении атмосферы высокоэнергетическими частицами.

2. Механизмы образования и потерь колебательно-возбужденного окиси азота в средней атмосфере при протонных высыпаниях

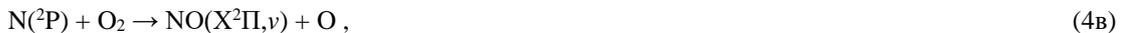
Колебательно-возбужденные молекулы NO эффективно излучают инфракрасные эмиссии на длинах волн 5.3 мкм и 2.7 мкм, и расчет интенсивностей инфракрасного излучения окиси азота в атмосфере требует знания основных механизмов образования $\text{NO}(X^2\Pi, v>0)$ и квантовых выходов в реакциях образования различных колебательных уровней молекул NO. Также необходимо учитывать все процессы потерь, включая спонтанные излучательные переходы и колебательную релаксацию при неупругих столкновениях молекул NO с другими компонентами атмосферы.

Первичные источники колебательно-возбужденной молекулы NO в верхних слоях атмосферы обсуждались в следующих работах (*Kockarts, 1980; Caledonia and Kennealy, 1982; Gordiets et al., 1982; Sharma et al., 1996; Kirillov and Aladjev, 1998; Mlynczak et al., 2003; Winick et al., 2004; Campbell and Brunger, 2007; Venkataramani et al., 2016; Bouziane et al., 2022*). Целью этих работ было изучение механизмов, ответственных за образование $\text{NO}(X^2\Pi, v>0)$ в верхних слоях атмосферы и инфракрасное излучение окиси азота, причем как в спокойных условиях, так и во время высыпания авроральных частиц.

Основными механизмами образования $\text{NO}(X^2\Pi, v)$ в смеси N_2 и O_2 при высокой поступательной температуре и при высыпаниях высокоэнергичных частиц в верхнюю атмосферу является TV-перенос энергии при тепловых столкновениях с атомами кислорода

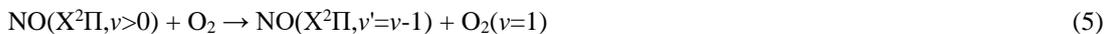


и химические реакции невозбужденного и метастабильного атомарного азота с молекулярным кислородом



где атомы $\text{N}(^4\text{S}, ^2\text{D}, ^2\text{P})$ образуются в основном при диссоциации и диссоциативной ионизации молекул N_2 за счет столкновения с авроральными частицами и вторичными электронами или в ионном цикле авроральной ионосферы. Поскольку концентрации атомарного кислорода в средней атмосфере имеют низкие значения, то процессом (3) можно пренебречь при расчете скоростей образования колебательно-возбужденного $\text{NO}(X^2\Pi)$ на данных высотах атмосферы. Также константа скорости процесса (4а) имеет экспоненциальную зависимость $k_{4a} \sim \exp(-3220/T)$ от температуры атмосферы T (*Burkholder et al., 2015*), а температура на высотах средней атмосферы находится в пределах 200—260 К. Поэтому скорости реакции (4а) имеют малые значения и в данном высотном диапазоне ими можно пренебречь.

Гашение колебательно-возбужденного окиси азота $\text{NO}(X^2\Pi)$ на высотах средней атмосферы происходит как при излучении инфракрасных эмиссий 5.3 и 2.7 мкм (процессы (2а) и (2б)) (*Rawlins et al., 1998*) или при неупругих столкновениях с молекулами O_2 (*Hancock et al., 2006*)



с переносом энергии колебательного возбуждения и образованием молекулы $\text{O}_2(X^3\Sigma_g^-)$ на первом колебательном уровне $v=1$. Мы применяем здесь вероятности перехода из работы (*Rawlins et al., 1998*) для излучения инфракрасных полос 5.3 мкм и 2.7 мкм (2а,б) и коэффициенты скоростей гашения $\text{NO}(X^2\Pi, v \geq 0)$ в процессе (5) согласно (*Hancock et al., 2006*).

3. Рассчитанные колебательные населенности молекул $\text{NO}(X^2\Pi)$ во время события GLE69

20 января 2005 г. всемирная сеть нейтронных мониторов зарегистрировала увеличение потоков высокоэнергичных частиц (ей был присвоен номер GLE69), вызванные солнечными космическими лучами (СКЛ). Он оказался вторым по зафиксированной амплитуде. Только GLE05 (23 февраля 1956 г.) был более мощным, чем событие GLE69.

Событие GLE69 произошло от вспышки 2В/Х7.1 с координатами N14W61. Вспышка сопровождалась радиовсплесками II и IV типов, которые являются индикаторами ускорения частиц. Начало радиоизлучения II типа (вероятный момент генерации релятивистских СКЛ) было зарегистрировано в 06:44 UT, а СКЛ достигли Земли в ~06:53 UT. Событие GLE69 на своей начальной фазе характеризовалось очень большой амплитудой усиления и имело очень сильную северно-южную анизотропию в релятивистском потоке СКЛ.

В данной работе мы рассматриваем событие GLE69, которое сопровождалось увеличением скорости образования ионных пар на высотах от 0 до 80 км. Для расчета проникновения СКЛ через атмосферу Земли используется пакет разработки программ GEANT4 [Agostinelli et al., 2003], с помощью которого создаются соответствующие модели. Программный комплекс RUSCOSMICS разработан в Полярном геофизическом институте и описан в работе [Kirillov et al., 2021].

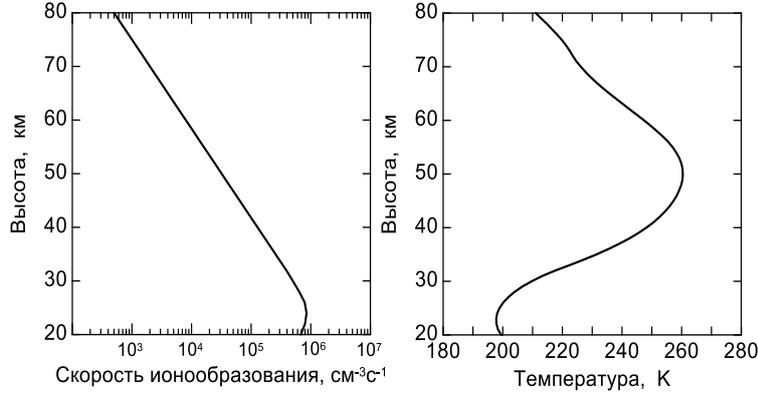


Рисунок 1. Рассчитанные скорости ионообразования на высотах 20-80 км согласно [Kirillov et al., 2021] и профиль температуры согласно MSIS-90 модели.

Рассчитанные скорости образования ионов в 08:00 UT 20 января 2005 г. на высотах 20-80 км по данным [Kirillov et al., 2021] показаны на рис.1. Температурный профиль средней атмосферы по данным MSIS-90 (https://ccmc.gsfc.nasa.gov/modelweb/models/msis_vitmo.php) одновременно для 67.5° северной широты и 33.5° восточной долготы (город Апатиты, Мурманская область) также представлена на рис.1.

Для расчета колебательной населенности $N_{v'}^X$ v' -ого колебательного уровня состояния $X^2\Pi$ молекулы NO мы используем следующие уравнения:

$$k_{46} f_{46}(v') [N(^2D)] [O_2] + (A_{v'+1v'}^{XX} + k_5 [O_2]) N_{v'+1}^X + A_{v'+2v'}^{XX} N_{v'+2}^X = \{A_{v'v'-1}^{XX} + A_{v'v'-2}^{XX} + k_5(v') [O_2]\} \cdot N_{v'}^X \quad (6)$$

Здесь $A_{v'v'}^{XX}$ - коэффициенты Эйнштейна для переходов (2а) и (2б) (согласно [Hancock et al., 2006]). Квантовые выходы $f_{46}(v')$ для процесса (4б) были рассчитаны в работе [Kirillov and Aladjev, 1998].

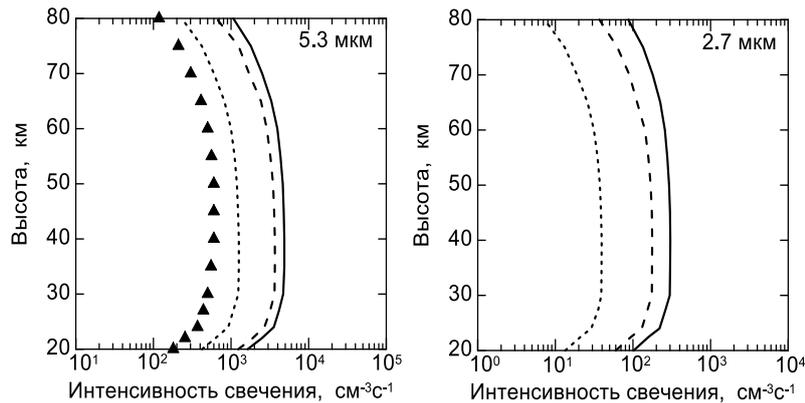


Рисунок 2. Рассчитанные интенсивности инфракрасного излучения NO 5.3 мкм и 2.7 мкм на высотах 20–80 км средней атмосферы. Левая панель: вклады $v'=1$, $v'=1-3$, $v'=1-20$ показаны короткой пунктирной линией, длинной пунктирной линией и сплошной линией соответственно; экспериментальные данные от SABER TIMED – треугольники. Правая панель: вклады $v'=2$, $v'=2-4$, $v'=2-20$ показаны короткой пунктирной линией, длинной пунктирной линией и сплошной линией соответственно.

На рис.2 представлены результаты расчетов интенсивностей свечения инфракрасных полос NO. Но поскольку молекула окиси азота является ангармоническим осциллятором, то и длины волн инфракрасного излучения зависят от номеров колебательных уровней основного состояния. Например, радиационные

переходы (2а) с уровней $v'=1, 3, 10, 20$ соответствуют излучениям с $\lambda=5.3$ мкм, 5.5 мкм, 6.2 мкм, 7.5 мкм соответственно. Аналогично радиационные переходы (2б) с уровней $v'=2, 4, 10, 20$ соответствуют излучениям с $\lambda=2.7$ мкм, 2.8 мкм, 3.1 мкм, 3.7 мкм соответственно. Поэтому мы показываем на рис.2 вклады $v'=1, v'=1-3, v'=1-20$ для 5.3 мкм и вклады $v'=2, v'=2-4, v'=2-20$ для 2.7 мкм.

Также мы сравниваем расчетные интенсивности с экспериментальными данными прибора SABER на космическом летательном аппарате (КЛА) TIMED, полученными во время GLE69 20 января 2005 г. КЛА TIMED был запущен 7 декабря 2001 г. (Mlynczak et al., 2003; Winick et al., 2004). Прибор SABER представляет собой широкополосный радиометр, измеряющий инфракрасное излучение в диапазонах от 1.27 до 15 мкм, включая излучение NO на длине волны 5.3 мкм. Из рис.2 видно, что расчетные интенсивности объемной эмиссии 5.3 мкм превышают экспериментальные значения. Одной из возможных причин такого расхождения между результатами расчетов и данными SABER может быть долготное расхождение между наблюдениями на нейтронных мониторах и с КЛА TIMED. Другой причиной расхождения результатов расчета с экспериментальными данными SABER могут быть завышенные значения коэффициентов ветвления $f_{46}(v')$ в процессе (4б), рассчитанные в работе (Kirillov and Aladjev, 1998).

Следует также отметить, что при высыпании частиц в атмосферу в результате излучательных процессов возможно образование колебательно-возбужденного молекулярного азота $N_2(X^1\Sigma_g^+, v>0)$. В работе (Aladjev and Kirillov, 1995; Campbell et al., 2006) численно исследован вклад радиационных спонтанных переходов электронно-возбужденных молекул $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ в колебательное возбуждение молекул N_2 в высокоширотной ионосфере. Кроме того, в работе (Kirillov, 2012) был показан значительный вклад каскадных процессов при молекулярных столкновениях в колебательное заселение состояния $X^1\Sigma_g^+$ на высотах нижней термосферы и мезосферы во время авроральных электронных высыпаний. Поэтому в средах, где присутствуют газы N_2 и NO, возможен дополнительный вклад процесса



Однако концентрации окиси азота на высотах средней атмосферы Земли на много порядков меньше концентраций основных атмосферных составляющих, поэтому вкладом процесса (7) в образование $NO(X^2\Pi, v=1)$ по сравнению с вкладом процесса (4б) можно пренебречь.

4. Выводы

Рассмотрены механизмы образования колебательно-возбужденных молекул NO на высотах средней атмосферы при высыпании протонов высоких энергий. Расчеты сделаны для GLE69 (20 января 2005 года). Исследование колебательных населенностей $NO(X^2\Pi, v'=1-20)$ во время события GLE69 на высотах средней атмосферы показало, что химическая реакция метастабильного атомарного азота с молекулярным кислородом является основным механизмом образования колебательно-возбужденных $NO(X^2\Pi, v>0)$ и излучения инфракрасных диапазонов 5.3 мкм и 2.7 мкм на рассмотренных высотах. Рассчитанные интенсивности излучения 5.3 мкм сравниваются с экспериментальными данными прибора SABER на КЛА TIMED, полученными во время GLE69 20 января 2005 г. Сравнение показывает, что рассчитанные интенсивности объемного излучения превышают экспериментальные значения. Мы рассматриваем две возможные причины такого расхождения: либо долготное расхождение между наблюдениями на нейтронных мониторах и спутнике TIMED, либо мы используем завышенные значения квантовых выходов $f_{46}(v')$ в реакции (4б).

Благодарность

Авторы благодарят профессора Лопез-Пуэртас М. (Prof. Lopez-Puertas M., Granada, Spain) за предоставление данных по свечению инфракрасной полосы 5.3 мкм, полученных 20 января 2005 г. на КЛА TIMED.

Литература

- Дорман Л.И. Экспериментальные и теоретические основы астрофизики космических лучей. М.: Наука. 462 с. 1975.
- Широков Ю.М., Юдин Н.П. Ядерная физика. Уч. пос. М.: Наука. 729 с. 1980.
- Agostinelli S., Allison J., Amako K. et al. Geant4 — a simulation toolkit. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., v.506, Sect. A, p.250–303, 2003.
- Aladjev G.A., Kirillov A.S. Vibrational kinetics of molecular nitrogen and its role in the composition of the polar thermosphere. // Adv. Space Res., v.16, № 1, p.109-112, 1995.
- Bouziane A., Ferdi M.A., Djebli M. Nitric oxide vibrationally excited levels and controlling processes in the Earth's upper atmosphere during the daytime. // Adv. Space Res., v.69, № 2, p.905–914, 2022.
- Burkholder J.B., Sander S.P., Abbatt J., Barker J.R., Huie R.E., Kolb C.E., Kurylo M.J., Orkin V.L., Wilmouth D.M., Wine P.H. Chemical kinetics and photochemical data for use in atmospheric studies, Evaluation No.18, Jet Propulsion Laboratory Publication 15-10, Jet Propulsion Laboratory, Pasadena, 1392 p., 2015.

- Caledonia G.E., Kennealy J.P. NO infrared radiation in the upper atmosphere // *Planet. Space Sci.*, v.30, № 10, p.1043–1056, 1982.
- Campbell L., Brunger M.J. Electron impact contribution to infrared NO emissions in auroral conditions // *Geophys. Res. Lett.*, v.34, № 22, L22102, 2007.
- Campbell L., Cartwright D.C., Brunger M.J., Teubner P.J.O. Role of electronic excited N₂ in vibrational excitation of the N₂ ground state at high latitudes. // *J. Geophys. Res.: Space Phys.*, v.111, A09317, 2006.
- Funke B., Lopez-Puertas M., Garcia-Comas M., Kaufmann M., Höpfner M., Stiller G.P. GRANADA: A Generic RAdiative traNSfer AnD non-LTE population algorithm // *J. Quan. Spec. Rad. Tran.*, v.113, № 14, p.1771–1817, 2012.
- Gordiets B.F., Kulikov Yu.N., Markov M.N., Marov M.Ya. Numerical modelling of the thermospheric heat budget. // *J. Geophys. Res.*, v.87, № A6, p.4504–4514, 1982.
- Gordillo-Vazquez F.J. Air plasma kinetics under the influence of sprites. // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, v.41, № 23, 234016, 2008.
- Hancock G., Morrison M., Saunders M. Vibrational relaxation of NO(v=1–16) in collisions with O₂ studied by time resolved Fourier transform infrared emission. // *Chem. Phys. Lett.*, v.425, № 4–6, p.216–220, 2006.
- Kirillov A.S. Influence of electronically excited N₂ and O₂ on vibrational kinetics of these molecules in the lower thermosphere and mesosphere during auroral electron precipitation. // *J. Atmos. Sol.-Terr. Phys.*, v.81-82, p.9-19, 2012.
- Kirillov A.S., Aladjev G.A. Estimation of atomic oxygen concentrations from measured intensities of infrared nitric oxide radiation. // *Ann. Geophys.*, v.16, № 7, p.847–852, 1998.
- Kirillov A.S., Belakhovsky V.B., Maurchev E.A., Balabin Yu.V., Germanenko A.V., Gvozdevskiy B.B. Luminescence of molecular nitrogen and molecular oxygen in the Earth's middle atmosphere during the precipitation of high-energy protons. // *Geomagnetism and Aeronomy*, v.61, № 6, p.864–870, 2021.
- Kockarts G. Nitric oxide cooling in the terrestrial thermosphere. // *Geophys. Res. Lett.*, v.7, № 2, p.137–140, 1980.
- Lopez-Puertas M., Taylor F.W. Non-LTE radiative transfer in the atmosphere. Singapore: World Scientific Publishers, 506 p., 2001.
- Mlynczak M., Martin-Torres F.J., Russell J. et al. The natural thermostat of nitric oxide emission at 5.3 μm in the thermosphere observed during the solar storms of April 2002. // *Geophys. Res. Lett.*, v.30, № 21, 2100, 2003.
- Rawlins W.T., Person J.C., Fraser M.E., Miller S.M., Blumberg W.A.M. The dipole moment and infrared transition strengths of nitric oxide. // *J. Chem. Phys.*, v.109, № 9, p.3409–3417, 1998.
- Sentman D.D., Stenbaek-Nielsen H.C., McHarg M.G., Morrill J.S. Plasma chemistry of sprite streamers. // *J. Geophys. Res. – Atmosphere*, v.113, № 11, D11112, 2008.
- Sharma R.D., Dothe H., von Esse F., Kharchenko V.A., Sun Y., Dalgarno A. Production of vibrationally and rotationally excited NO in the night time terrestrial thermosphere. // *J. Geophys. Res. – Space*, v.101, № A9, p.19707–19713, 1996.
- Venkataramani K., Yonker J.D., Bailey S.M. Contribution of chemical processes to infrared emissions from nitric oxide in the thermosphere. // *J. Geophys. Res. – Space*, v.121, № 3, p.2450–2461, 2016.
- Winick J.R., Mlynczak M.G., Wintersteiner P.P., Martin-Torres F.-J., Picard R.H., Paxton L., Lopez-Puertas M., Russell J.M., Christensen A., Gordley L. Thermospheric infrared radiance response to the April 2002 geomagnetic storm from SABER infrared and GUVI ultraviolet limb data. // *Proceedings SPIE*, v.5235, p.250–263, 2004.