

Исследование кинетических процессов с участием электронно-возбужденных молекул N_2 и ионов N_2^+ на высотах средней атмосферы Земли и в разрядной камере

Кириллов А.С.¹, Тарасенко В.Ф.^{1,2}, Виноградов Н.П.^{1,2}, Кириллов В.А.¹

¹ Полярный геофизический институт, Апатиты

² Институт сильноточной электроники, Томск

Молекулярный азот в атмосферах планет Солнечной системы



Земля

Смесь N_2 и O_2



Титан

Смесь N_2 , C_xH_y , CO

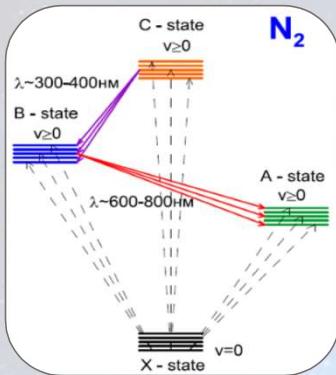


Тритон

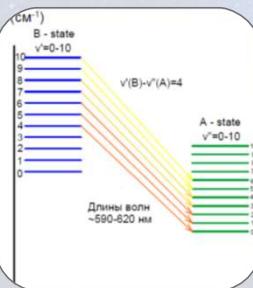
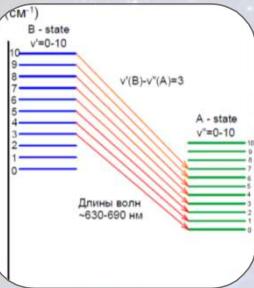
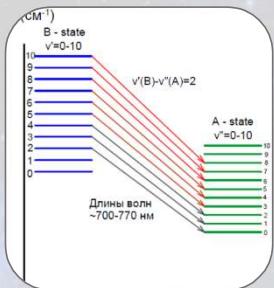
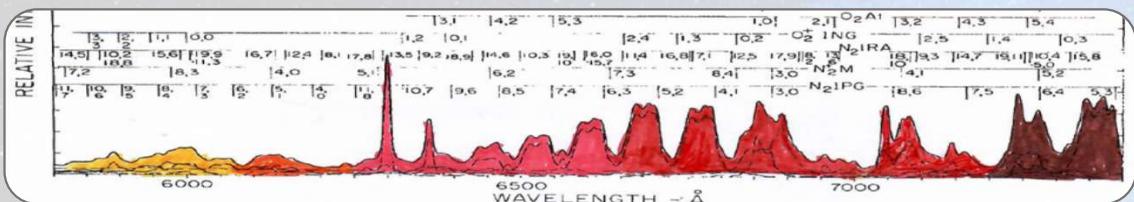
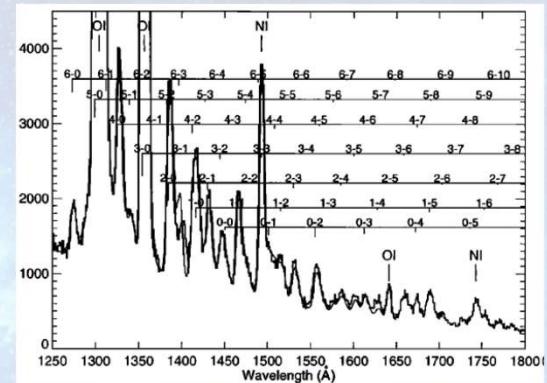


Плутон

Полосы N_2 в верхней атмосфере Земли

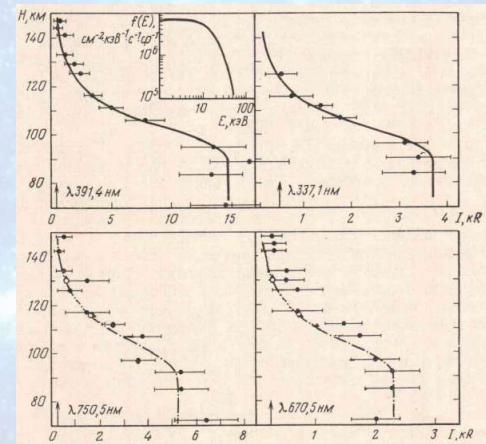


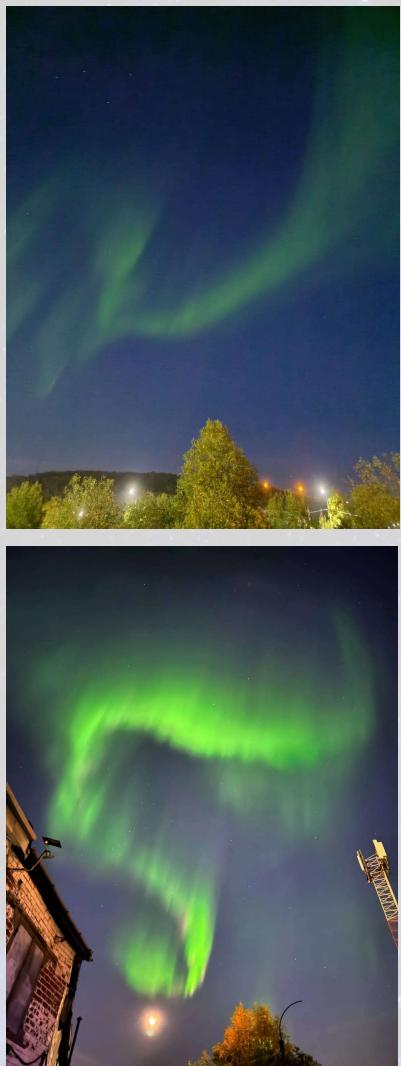
УФ спектры N_2 в
дневном свечении
(Discovery, STS-39)
[Budzien et al., 1994, J.
Geophys. Res. - A, v.99,
p.23275]



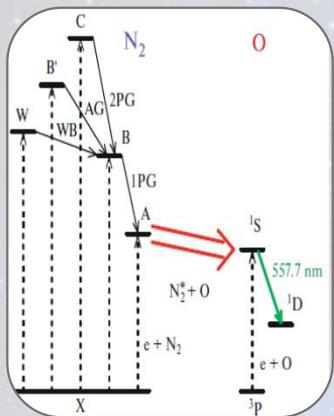
Ракетные измерения N_2 и
 N_2^+ полос на о. Хейса
(13.12.1972)
[Кириллов и др., 1987,
Геом. Аэрон.]

Переходы для 1PG полос при $\Delta v = v'(B) - v''(A) = 2, 3, 4$. Vallance Jones, Aurora, 1974

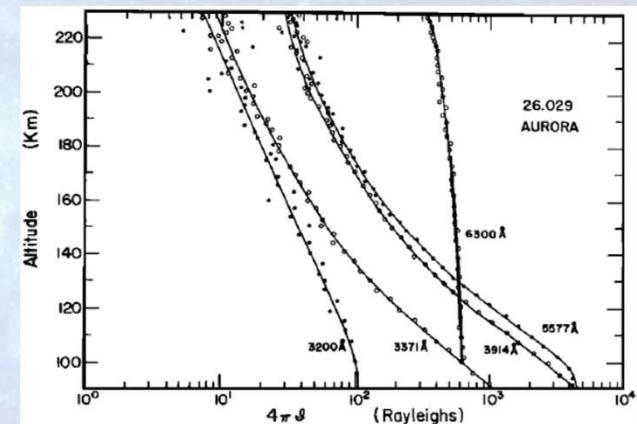




Вклад метастабильного $N_2(A)$ в излучение зеленой линии O



Sharp et al., 1979,
J. Geophys. Res., 84,
p.1977
Churchill Research
Range
(20.03.1974)



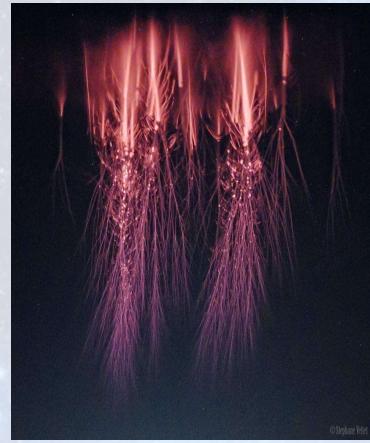
McDade and Llewellyn [1984, Planet. Space Sci., 32, p.1195] показали, что результаты ракетных измерений [Sharp et al., 1979] можно объяснить только реакцией



Расчеты в [Кириллов и Аладьев, 1998, Космич. Исслед., т.36, с.451] на основании приближения Ландау-Зинера показали, что константа скорости для $v=0$ в несколько раз больше констант для $v>0$.

Фотографии красных спрайтов

(Авторы благодарят профессионального фотографа Frankie Lucena за предоставленные фотографии и разрешение их использовать)

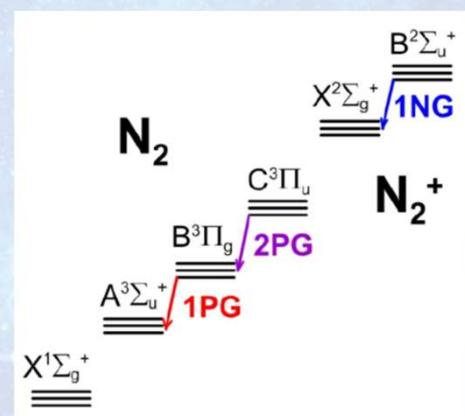
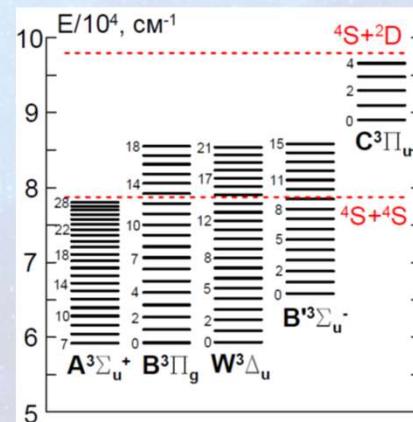
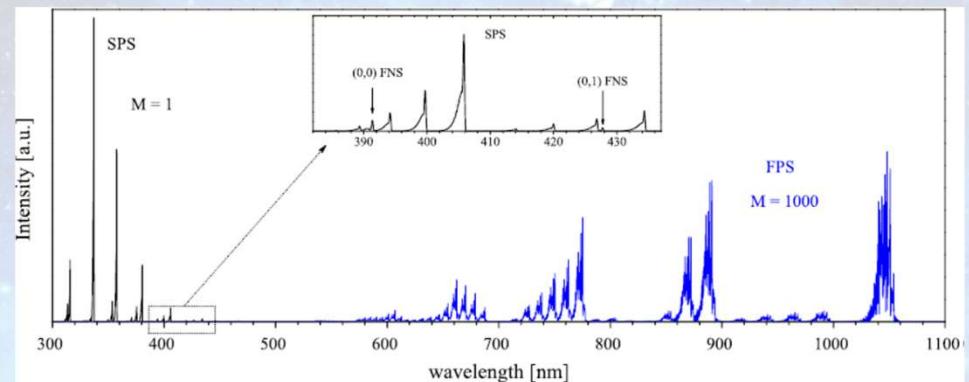
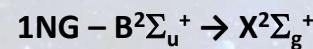
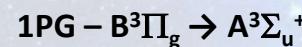
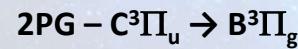
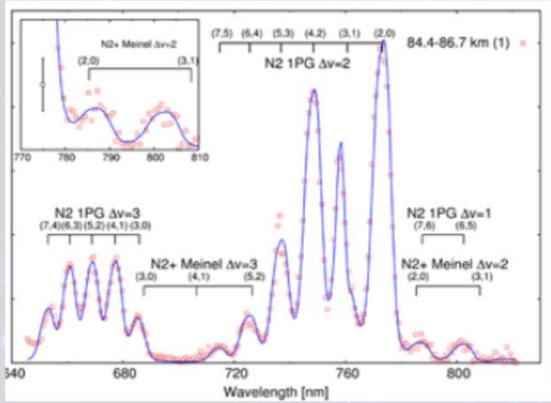
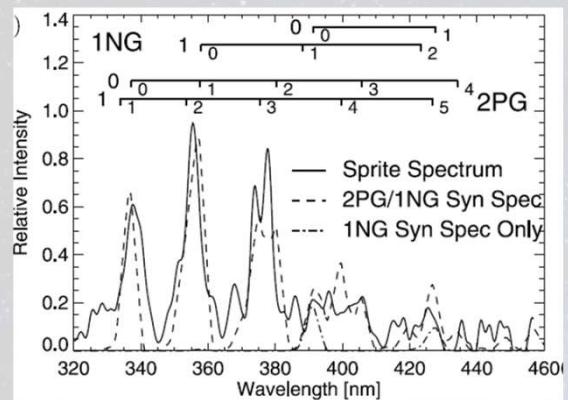


Спектры излучения N_2 в лабораторном разряде и спрайтах

[Hoder et al., 2015, *J. Appl. Phys.*, v.117, 073302] (1PG+2PG),

[Kanmae et al., 2007, *GRL*, v.34, L07810] (1PG),

[Heavner et al., 2010, *JGR-A*, v.115, A00E44] (2PG)



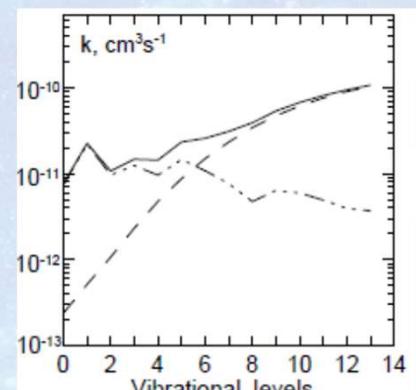
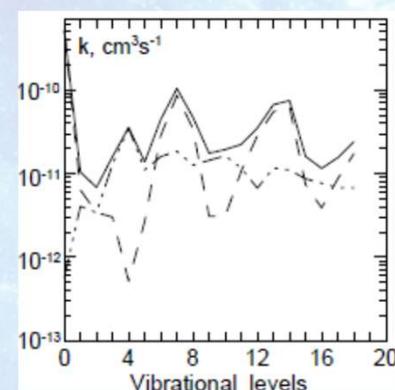
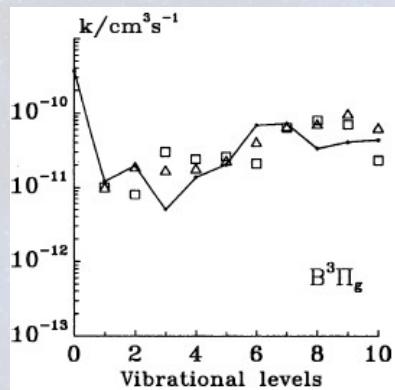
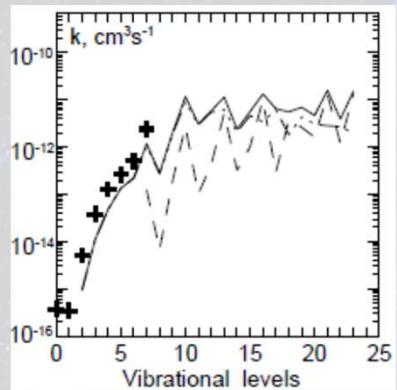
Константы скоростей гашения для $N_2(A,B,W,B')$ + N_2 столкновений

Kirillov, 2004, Adv. Space Res, v.33, p.998

Kirillov, 2010, Ann. Geophys., v.28, p.181

Kirillov, 2011, J. Quan. Spec. Rad. Tran., v.112, p.2164

Kirillov, 2016, Chem. Phys. Lett., v.643, p.131



$A^3\Sigma_u^+$

$B^3\Pi_g$

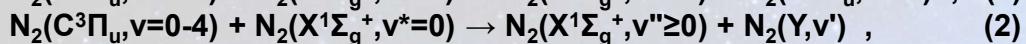
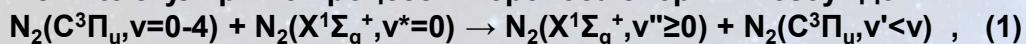
$W^3\Delta_u$

$B'^3\Sigma_u^-$

Константы скоростей гашения для $N_2(C) + N_2$ столкновений

Kirillov, 2019, Chem. Phys. Lett., v.715, p.263

Межмолекулярные процессы переноса энергии возбуждения:



Сравнение рассчитанных констант с экспериментальными
данными Dilecce et al. [2006, Chem. Phys. Lett., v.431, p.241] (● и ▲):

а – для процесса (1),

б – для процесса (2).

Вклад для $Y = B^3\Pi_g$ (○), $W^3\Delta_u$ (---), $B^1\Sigma_u^-$ (- - -)

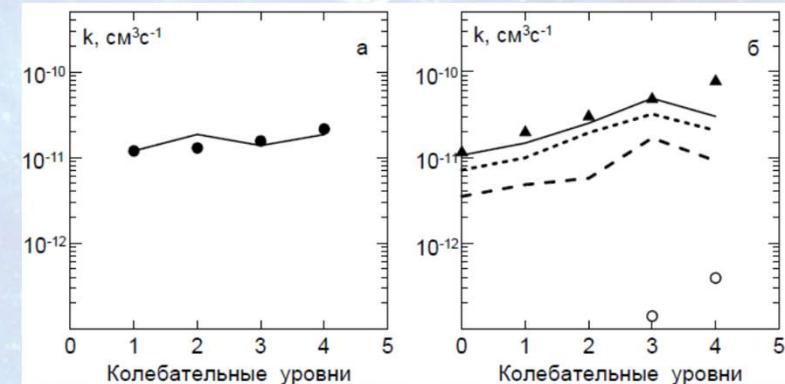


Table 1

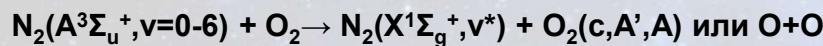
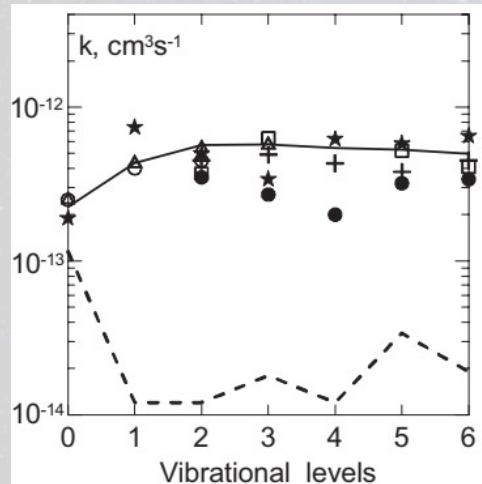
The calculated total quenching rate coefficients of the $C^3\Pi_u$ state are compared with experimental data [10,12–20] (in $10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$).

$v = 0$	$v = 1$	$v = 2$	$v = 3$	$v = 4$	References
1.06	2.66	4.37	6.27	4.86	This work
1.14 ± 0.12	3.14 ± 0.21	4.28 ± 0.21	6.34 ± 0.27	9.86 ± 0.46	Dilecce et al. [10]
1.0 ± 0.2	2.3 ± 0.3	3.0 ± 0.5	3.5 ± 0.7	–	Brocklehurst and Downing [12]
1.1 ± 0.1	2.2 ± 0.8	3.1 ± 0.7	–	–	Calo and Axtmann [13]
1.0 ± 0.1	2.6 ± 0.2	–	–	–	Millet et al. [14]
1.09 ± 0.11	2.53 ± 0.25	4.13 ± 0.41	4.28 ± 0.43	–	Chen et al. [15]
3.2 ± 0.3	–	–	–	8.8 ± 0.9	Becker et al. [16]
1.5	3.7	8	–	–	Urosevic et al. [17]
–	3.3 ± 0.4	6.3 ± 0.8	8 ± 2	–	Gat et al. [18]
1.3 ± 0.2	2.9 ± 0.3	4.6 ± 0.6	4.3 ± 0.6	–	Pancheshnyi et al. [19]
–	2.9 ± 0.4	4.3 ± 0.6	4.8 ± 0.8	4.9 ± 0.9	Simek et al. [20]

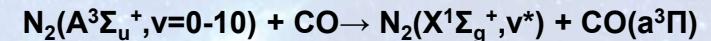
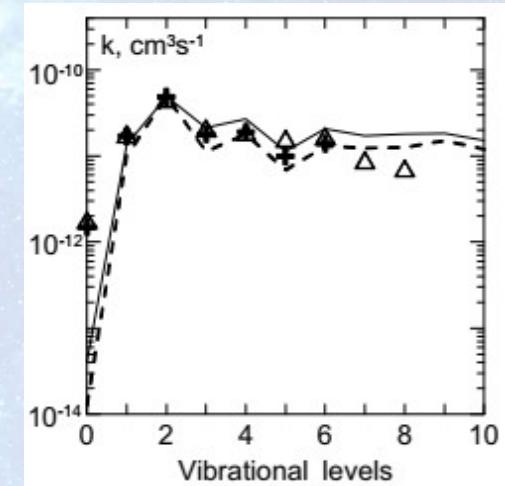
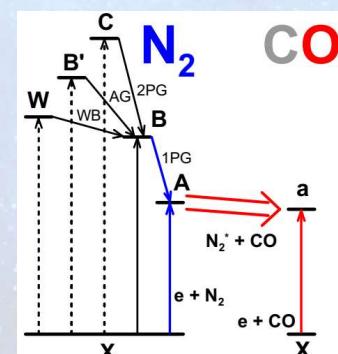
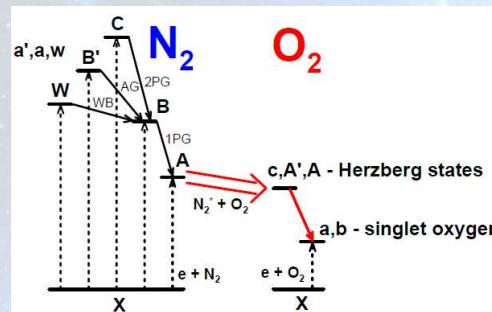
Константы скоростей гашения для $N_2(A) + O_2$, CO столкновений

Kirillov, 2016, Chem. Phys. Lett., v.715, p.263

Kirillov, Belakhovsky, 2021, J. Geophys. Res.: Atmosphere, v.126, e2020JD033177



Сплошная линия – результаты расчета,
штрихи – вклад $O_2(c, A', A)$ возбуждения,
● ○ □ Δ – различные экспериментальные данные



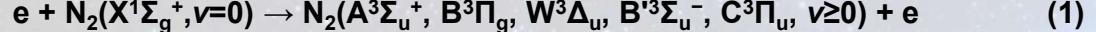
Сплошная линия и штрихи – результаты
расчетов,
+ Δ – экспериментальные данные

При моделировании кинетики триплетных состояний $N_2(A^3\Sigma_u^+, B^3\Pi_g, W^3\Delta_u, B^3\Sigma_u^-, C^3\Pi_u)$ на высотах свечения спрайтов используются константы, рассчитанные на основе квантово-химических приближений.

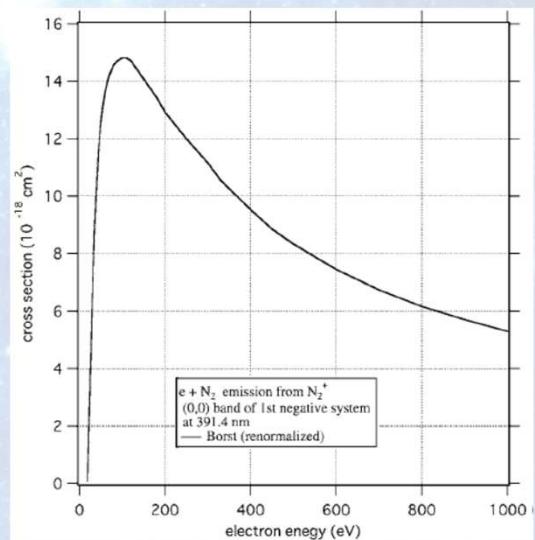
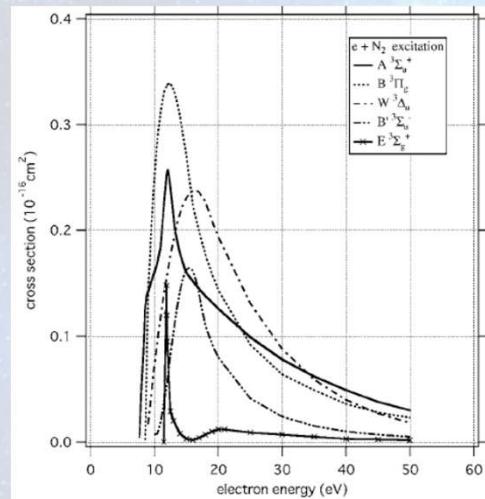
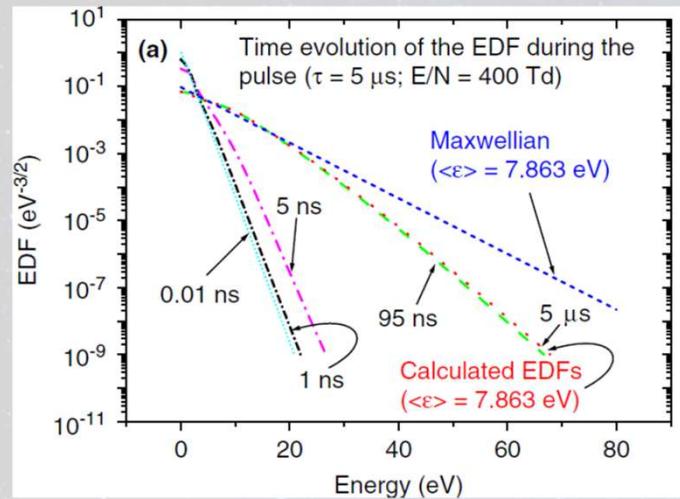
Для столкновений $N_2^+(B^2\Sigma_u^+) + N_2, O_2$ используются константы, измеренные в [Pancheshnyi et al., 1998, Chem. Phys. Lett., v.294, p.523].

При расчетах использован спектр электронов разряда, рассчитанный в [Gordillo-Vazquez, 2008, J. Phys. D, v.41, 234016] для импульса порядка $\tau \approx 5$ мкс.

Поперечные сечения возбуждения для триплетных состояний N_2 и $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$ при столкновениях электронами разряда



берутся согласно [Itikawa, 2006, J. Phys. Chem. Ref. Data].



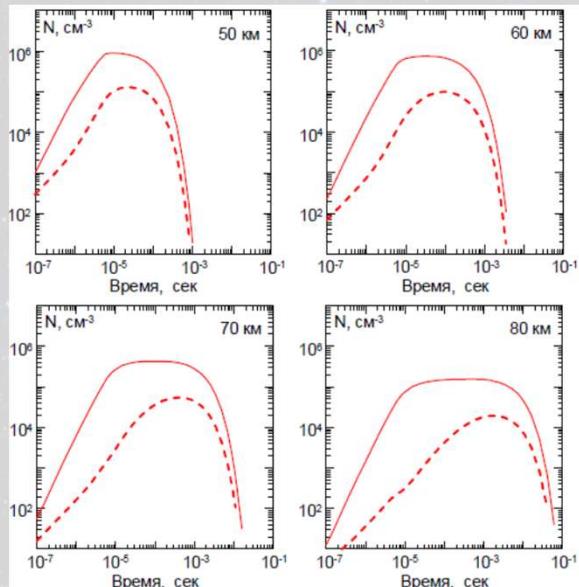
Спектр электронов разряда, рассчитанный в [Gordillo-Vazquez, 2008, J. Phys. D, v.41, 234016] для $\tau \approx 5$ мкс

Поперечные сечения для триплетных состояний

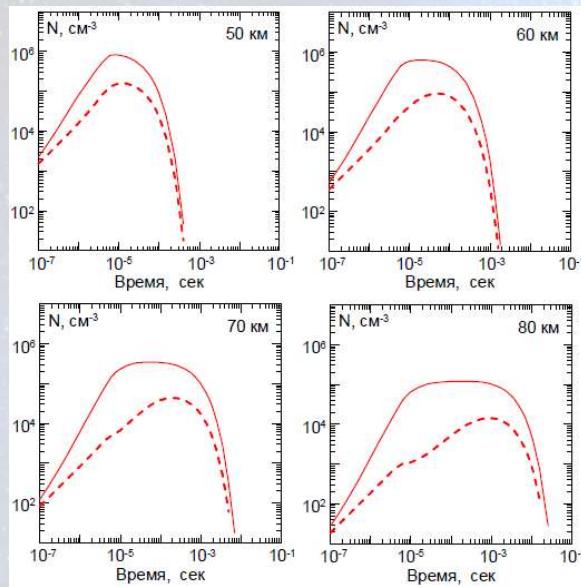
Поперечные сечения для 391 нм полосы

Рассчитанные концентрации $N_2(A^3\Sigma_u^+, v=0,1)$ и $N_2(B^3\Pi_g, v=5)$ на высотах 50-80 км

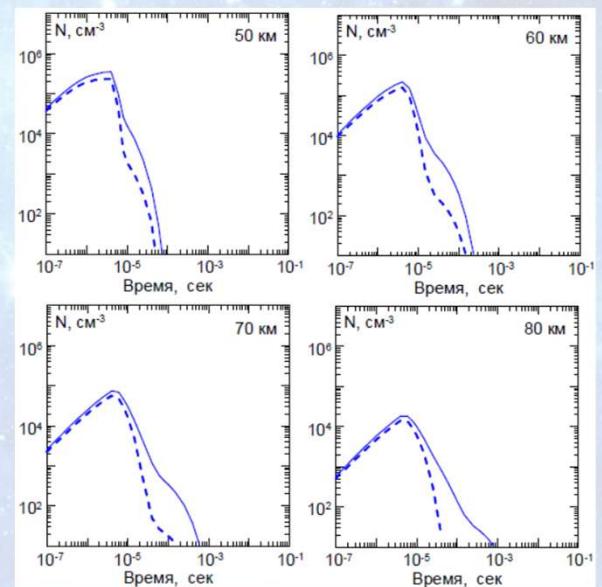
$N_2(A^3\Sigma_u^+, v=0)$



$N_2(A^3\Sigma_u^+, v=1)$



$N_2(B^3\Pi_g, v=5)$



Рассчитанные концентрации $N_2(A^3\Sigma_u^+, v=0,1)$ и $N_2(B^3\Pi_g, v=5)$ – сплошные линии.
Вклад прямого возбуждения $A^3\Sigma_u^+$ и $B^3\Pi_g$ состояний электронами разряда – штрихи.

Лабораторные измерения

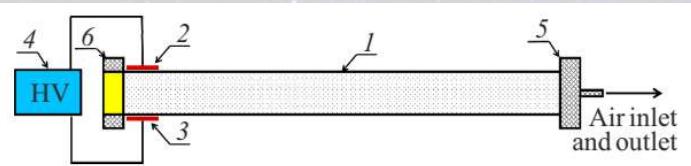
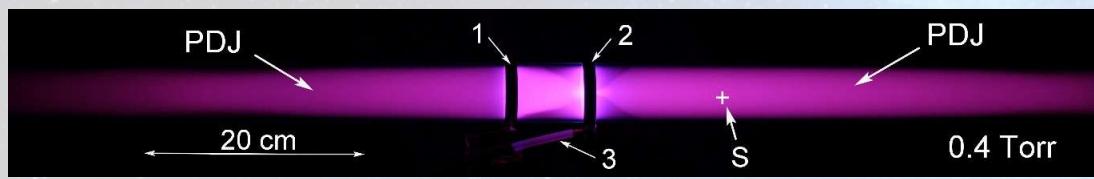
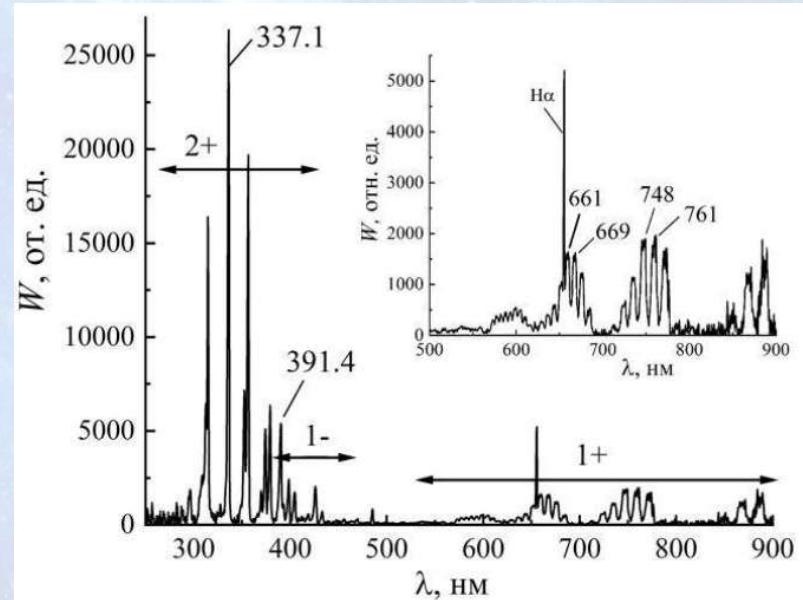


Рис. 1. Установка для формирования стримерного разряда:
1 — кварцевая трубка; 2, 3 — электроды из алюминиевой фольги;
4 — импульсный высоковольтный генератор с изменяемой полярностью и регулируемой амплитудой напряжения;
5 — фланец из капролона со штуцером для откачки и напуска воздуха; 6 — фланец из капролона с вмонтированным кварцевым окном.

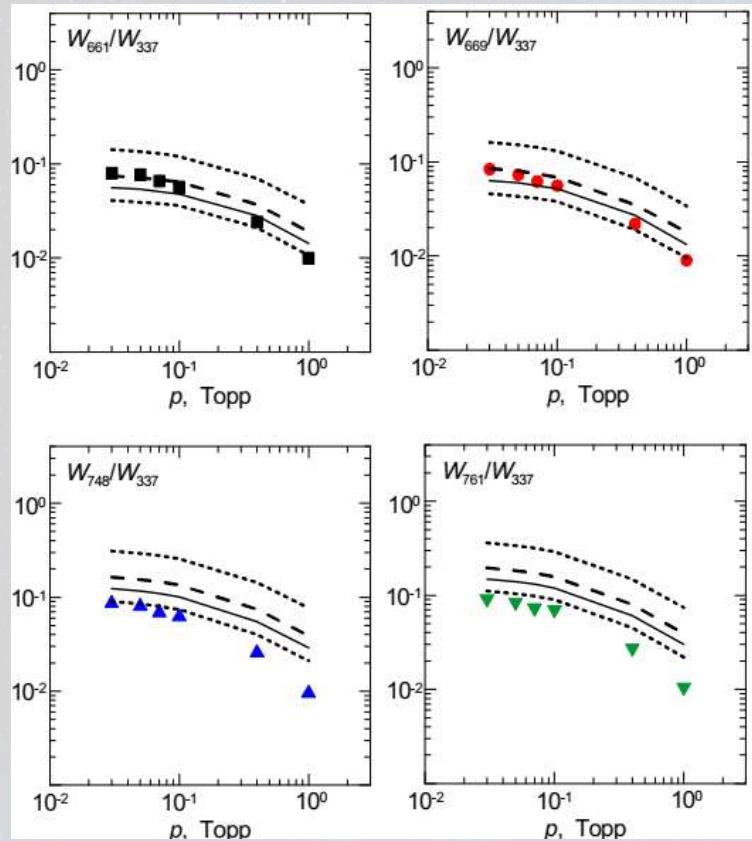


Фотографии разряда для давления воздуха 0.4 Торр.
1 — заземлённый электрод, 2 — высоковольтный электрод,
3 — высоковольтный кабель.
PDJ — плазменные диффузные струи. S — область, из которой
регистрировались спектры излучения, точка (+).

Спектральное распределение энергии
излучения плазмы в диапазоне
 $\Delta\lambda = 250\text{--}900$ нм при $P=0.2$ Торр.

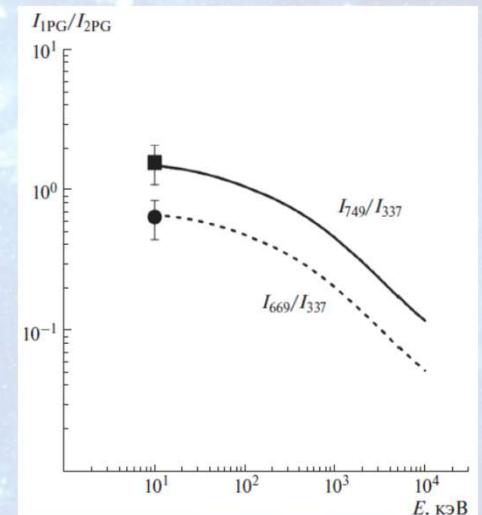


Сравнение рассчитанных W_{1PG}/W_{337} и I_{1PG}/I_{337} в разряде и полярных сияниях с экспериментальными данными



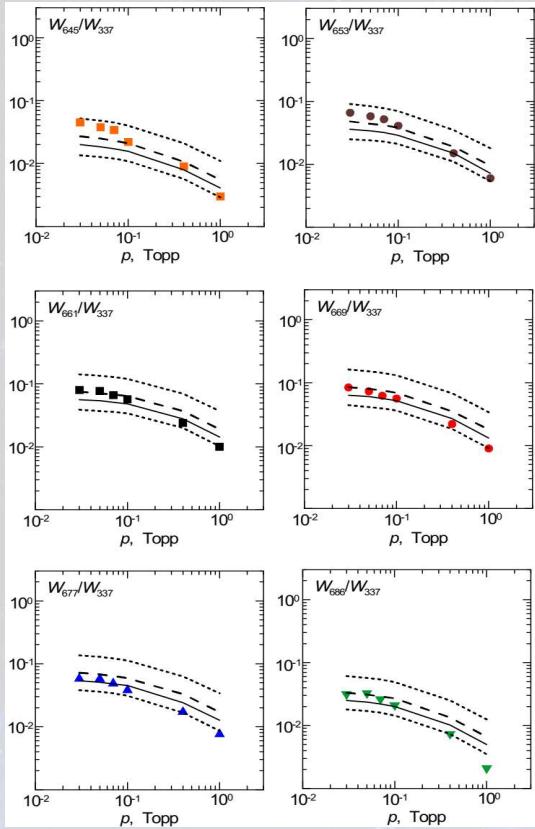
Верхние точки – 2 эВ
Штрихи – 3 эВ
Сплошные линии – 5 эВ
Нижние точки – 8 эВ

Кириллов и др., Геом. Аэрон.,
2025, т.65, №6.
Тарасенко и др., Оптика Атмос.
Океана, 2025, т.38, №9.

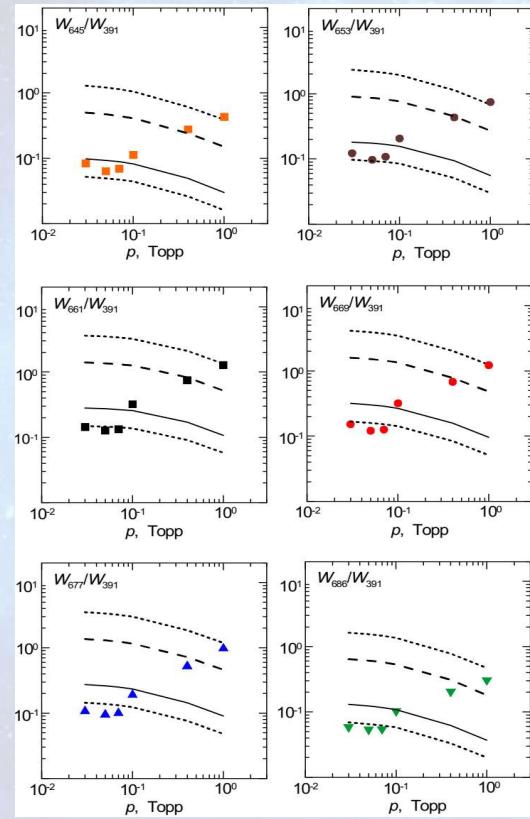


Расчеты для спектров авроральных электронов
 $f(E)=A \exp(-E/E_0)$
[Кириллов и Белаховский, Геом. Аэрон., 2020, т.60]
Ракетные измерения на острове Хейса (13.12.1972)
[Кириллов и др., Геом. Аэрон., 1987] (■, ●)

Экспериментальные и рассчитанные отношения W_{1PG}/W_{337} , W_{1PG}/W_{391} при $T_e = 2-10$ эВ



Верхние точки – 2 эВ
 Штрихи – 3 эВ
 Сплошные линии – 5 эВ
 Нижние точки – 8 эВ



Верхние точки – 4 эВ
 Штрихи – 5 эВ
 Сплошные линии – 8 эВ
 Нижние точки – 10 эВ

ВЫВОДЫ

Молекулярный азот является основным газом в атмосферах Земли, Титана, Тритона и Плутона. Взаимодействие заряженных частиц с молекулами N_2 приводит к образованию электронно- и колебательно-возбужденных N_2 и N_2^+ . Эти молекулы и ионы играют важную роль в химическом, радиационном и тепловом балансах атмосфер.

1. Модель включает кинетику триплетных ($A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_g$, $W^3\Delta_u$, $B'^3\Sigma_u^-$, $C^3\Pi_u$) состояний N_2 и дублетного $B^2\Sigma_u^+$ состояния N_2^+ учетом переноса энергии возбуждения при неупругих молекулярных столкновениях и спонтанных излучательных переходах.
2. Результаты моделирования спектров излучения азота в полосах первой, второй положительных и первой отрицательных систем и отношения спектральных плотностей излучения W_{1PG}/W_{2PG} and W_{1PG}/W_{1NG} сравниваются с результатами экспериментальных измерений при давлениях, соответствующим высотам средней атмосферы. Теоретически и экспериментально показано, что неупругие молекулярные столкновения с ростом плотности среды приводят к значительному уменьшению населенности колебательных уровней состояния $B^3\Pi_g$ и уменьшению интенсивностей свечения полос первой положительной системы N_2 . Также показано, что данные отношения зависят от температуры и могут быть использованы для оценки температуры электронов разряда.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда за счет гранта № 25-22-00158.

**СПАСИБО
ЗА ВНИМАНИЕ!**