

Моделирование свечения Атмосферных полос синглетного кислорода $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ в полярной ионосфере

Кириллов А.С., Куликов Ю.Н.

*Полярный геофизический институт,
Апатиты, Мурманск*

Введение

Излучение полос Атмосферной (Atm) системы молекулярного кислорода в спектре свечения полярной мезосфера и нижней термосфера происходит в результате спонтанных излучательных переходов с электронно-возбужденного состояния $b^1\Sigma_g^+$ молекулы O_2 на основное $X^3\Sigma_g^-$



Наиболее интенсивной из Атмосферной системы является полоса 762 нм, обусловленная переходом (*) с $v=0 \rightarrow v'=0$.

Исследованию высотных профилей свечения Атмосферных полос и механизмов образования электронно-возбужденного синглетного молекулярного кислорода $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ в авроральной ионосфере посвящено много экспериментальных и теоретических работ (Cartwright et al., 1972; Deans et al., 1976; Gattinger and Vallance Jones, 1976; Feldman, 1978; McDade et al., 1985; Gattinger et al., 1996; Llewellyn et al., 1999; Jones et al., 2006; Kirillov and Belakhovsky, 2021).

Целью настоящей работы является исследование физико-химических процессов формирования высотных распределений возбуждённого состояния $b^1\Sigma_g^+$ молекулярного кислорода (синглетного кислорода) в полярной ионосфере при высыпаниях авроральных электронов.

Особое внимание уделяется расчету констант скоростей взаимодействия возбужденной молекулы $O_2(b^1\Sigma_g^+, v)$ с атмосферными составляющими N_2 и O_2 .

Рассчитанные коэффициенты гашения молекул $O_2(b^1\Sigma_g^+, v)$ используются при моделировании колебательных населенностей электронно-возбужденных синглетных состояний молекулярного кислорода и интенсивностей свечения Атмосферных полос O_2 в полярной ионосфере.

Теоретический расчет констант взаимодействия для синглетного кислорода $O_2(b^1\Sigma_g^+, v)$ + O_2 , N_2 и сравнение с экспериментальными данными

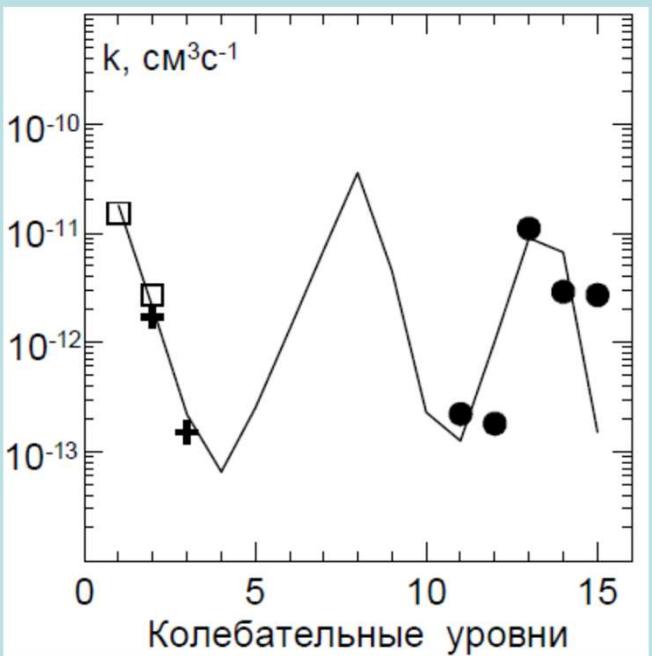
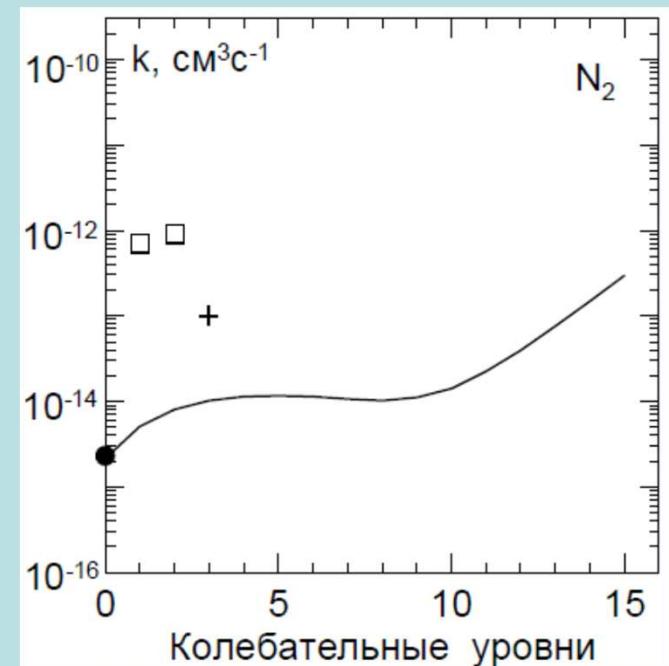
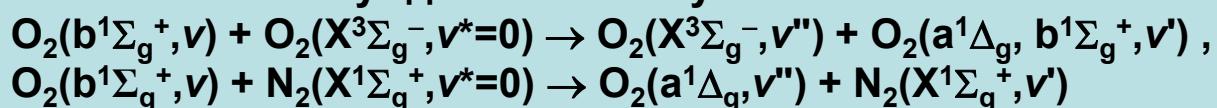


Рис.1. Сравнение результатов расчета констант взаимодействия $O_2(b^1\Sigma_g^+, v=1-15) + O_2$ с экспериментальными данными Bloemick et al., 1998 (□), Kalogerakis et al., 2002 (+), Slanger & Copeland, 2003 (●)

Рис.2. Сравнение результатов расчета констант взаимодействия $O_2(b^1\Sigma_g^+, v=1-15) + N_2$ с экспериментальными данными Bloemick et al., 1998 (□), Kalogerakis et al., 2002 (+), Dunlea et al., 2005 (●)



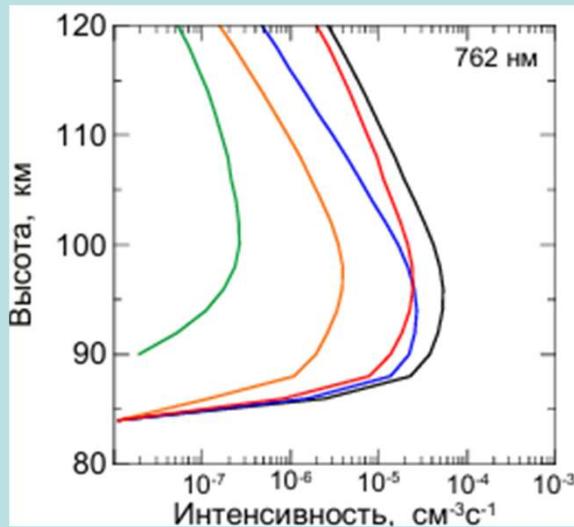
Расчеты констант взаимодействия синглетного кислорода $O_2(b^1\Sigma_g^+, v)$ молекулами O_2 и N_2 (рис.1 и 2) были проведены согласно [Kirillov, 2012, 2013]. В расчетах получено, что доминирующим каналом гашения при столкновении с молекулой O_2 является перенос энергии электронного возбуждения на молекулу-мишень с сохранением энергии колебаний у изначально возбужденной молекулы:



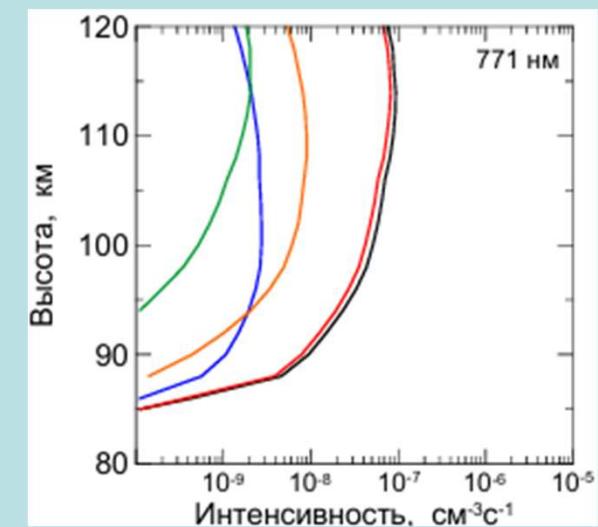
Процессы образования $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ на высотах нижней полярной ионосферы

1. Процесс прямого возбуждения синглетного состояния авроральными электронами
 $e + O_2(X^3\Sigma_g^-, v=0) \rightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+; v') + e$
2. Процесс возбуждения метастабильного атомарного кислорода $O(^1D)$ авроральными электронами $e + O(^3P) \rightarrow O(^1D) + e$
и реакция переноса энергии электронного возбуждения с метастабильного атомарного кислорода $O(^1D)$ при столкновении с молекулами $O_2(X^3\Sigma_g^-)$
 $O(^1D) + O_2(X^3\Sigma_g^-, v=0) \rightarrow O(^3P) + O_2(b^1\Sigma_g^+, v'=0,1)$, $f(v'=0)=0.2$ и $f(v'=1)=0.8$. (**)
3. Процесс переноса энергии электронного возбуждения с метастабильного молекулярного азота $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ при столкновении с молекулами кислорода $O_2(X^3\Sigma_g^-)$ на состояния Герцберга $c^1\Sigma_u^-$, $A'^3\Delta_u$, $A^3\Sigma_u^+$ с последующими переходами в состояние $b^1\Sigma_g^+$ при неупругих молекулярных столкновениях
 $N_2(A^3\Sigma_u^+, v') + O_2(X^3\Sigma_g^-, v=0) \rightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+, v^* \geq 0) + O_2(c^1\Sigma_u^-, A'^3\Delta_u, A^3\Sigma_u^+, v'')$,
 $O_2(c^1\Sigma_u^-, A'^3\Delta_u, A^3\Sigma_u^+, v') + N_2, O_2 \rightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+, v'' = v' + \Delta v_b) + N_2, O_2$,
 $O_2(c^1\Sigma_u^-, A'^3\Delta_u, A^3\Sigma_u^+, v') + O_2(X^3\Sigma_g^-, v=0) \rightarrow O_2(X^3\Sigma_g^-, v^* \geq 0) + O_2(b^1\Sigma_g^+, v'' = 0,1)$
и при столкновении с атомами кислорода $O(^3P)$
 $N_2(A^3\Sigma_u^+, v') + O(^3P) \rightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+, v^* \geq 0) + O(^1S)$,
 $O(^1S) \rightarrow O(^1D) + h\nu_{557.7}$,
когда происходит возбуждение синглетного состояния 1S с последующим переходом в 1D с излучением линии 557.7 нм и возбуждением $O_2(b^1\Sigma_g^+, v'=0,1)$ при столкновениях (**).
4. Процесс возбуждения метастабильного атомарного кислорода $O(^1S)$ авроральными электронами $e + O(^3P) \rightarrow O(^1S) + e$
с последующим излучением линии 557.7 нм (процесс (7б)) и возбуждением $O_2(b^1\Sigma_g^+, v'=0,1)$ при столкновениях (**).

Результаты расчётов для высот нижней полярной ионосферы Земли



Рассчитанные объемные интенсивности полос 762 и 771 нм (черные линии). Вклады процессов 1, 2, 3, 4: синие, красные, оранжевые и зеленые линии, соответственно.



На рисунках показаны вклады всех четырех процессов в свечение полос 762 нм (переход (*) с $v'=v''=0$) и 771 нм (переход (*) с $v'=v''=1$) при высыпании авроральных электронов с энергиями 40 кэВ.

Как видно из представленных рисунков, для обоих колебательных уровней $v'=0,1$ состояния $b^1\Sigma_g^+$ значительный вклад в возбуждение вносит процесс (2) с участием метастабильного атомарного кислорода $O(^1D)$.

Кроме того, для $v'=0$ существенный вклад вносит прямое возбуждение авроральными частицами (1).

Что касается процессов переноса энергии электронного возбуждения с метастабильного молекулярного азота $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ (3), то результаты расчетов не показали значительного вклада в возбуждение $O_2(b^1\Sigma_g^+)$.

Заключение

Рассчитанные константы гашения синглетного кислорода $O_2(b^1\Sigma_g^+, v)$ при неупругих столкновениях с O_2 и N_2 были использованы для определения колебательных населенностей молекулярного кислорода на высотах полярной ионосферы Земли.

Выполнены расчёты относительных населенностей синглетного кислорода $O_2(b^1\Sigma_g^+, v)$ на высотах 80-120 км. Исследованы вклады различных процессов в образование синглетного кислорода $O_2(b^1\Sigma_g^+, v)$ и свечение Атмосферных полос 762 и 771 нм.

Показано, что доминирующий вклад в образование синглетного кислорода $O_2(b^1\Sigma_g^+, v=0, 1)$ и свечение полос 762 и 771 нм вносят неупругие столкновения молекул O_2 с авроральными электронами и с метастабильным атомарным кислородом $O(^1D)$.

Список литературы

- **Bloemink H.I.**, Copeland R.A., Slanger T.G. Collisional removal of $O_2(b^1\Sigma_g^+, v=1,2)$ by O_2 , N_2 , and CO_2 . // J. Chem. Phys., v.109, №11, p.4237-4245, **1998**.
- **Cartwright D.C.**, Trajmar S., Williams W. The excitation of O_2 in auroras. // Ann. Geophys., v.28, p.397-401, **1972**.
- **Deans A.J.**, Shepherd G.G., Evans W.F.J. A rocket measurement of the $O_2(b^1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-)$ (0-0) atmospheric band in aurora. // J. Geophys. Res., v.81, p.6227-6232, **1976**.
- **Dunlea E.J.**, Talukdar R.K., Ravishankara A.R. Kinetic studies of the reactions of $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ with several atmospheric molecules // J. Phys. Chem., v.109, №17, p.3912-3920, **2005**.
- **Feldman P.D.** Auroral excitation of optical emissions of atomic and molecular oxygen. // J. Geophys. Res., v.83, p.2511-2516, **1978**.
- **Gattinger R.L.**, Vallance Jones A. The vibrational development of the $O_2(b^1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-)$ system in auroras // J. Geophys. Res., v.81, №25, p.4789-4792, **1976**.
- **Gattinger R.L.**, Llewellyn E.J., Vallance Jones A. On $I(5577 \text{ \AA})$ and $I(7620 \text{ \AA})$ auroral emissions and atomic oxygen densities. // Ann. Geophys., v.14, p.687-698, **1996**.
- **Jones D.B.**, Campbell L., Bottema M.J. et al. Electron-driven excitation of O_2 under night-time auroral conditions: Excited state densities and band emissions. // Planet. Space Sci., v.54, p.45-59, **2006**.
- **Kalogerakis K.S.**, Copeland R.A., Slanger T.G. Collisional removal of $O_2(b^1\Sigma_g^+, v=2,3)$. // J. Chem. Phys., v.116, №12, p.4877-4885, **2002**
- **Kirillov A.S.** Calculation of rate coefficients for the interaction of singlet and triplet vibrationally excited oxygen. // Quantum Electronics, v.42, №7, p.653-658, **2012**.
- **Kirillov A.S.** The calculations of quenching rate coefficients of $O_2(b^1\Sigma_g^+, v)$ in collisions with O_2 , N_2 , CO , CO_2 molecules. // Chem. Phys., v.410, p.103-108, **2013**.
- **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, v.105, e2020JD033177, **2021**.
- **Llewellyn E.J.**, Gattinger R.L., Vallance Jones A. On the variability of $I(7620 \text{ \AA})/I(5577 \text{ \AA})$ in low altitude aurora. // Ann. Geophys., v.17, p.913-918, **1999**.
- **McDade I.C.**, Llewellyn E.J., Harris F.R. A rocket measurement of the $O_2(b^1\Sigma_g^+ - X^3\Sigma_g^-)$ (0-0) atmospheric band in a pulsating aurora. // Can. J. Phys., v.63, p.1322-1329, **1985**.
- **Slanger T.G.**, Copeland R.A. Energetic oxygen in the upper atmosphere and the laboratory. // Chem. Rev., v.103, №12, p.4731-4765, **2003**.