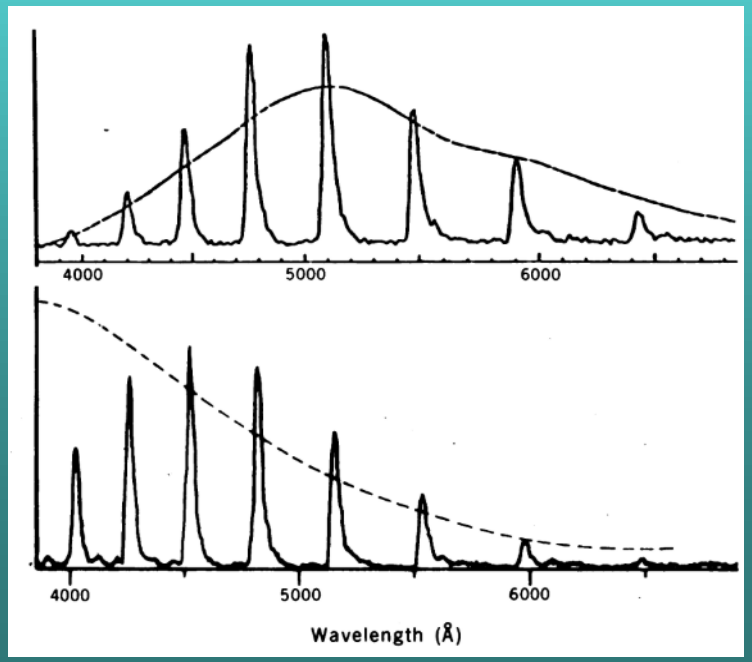
ИССЛЕДОВАНИЕ НОЧНОГО СВЕЧЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА O_2^* В РАЗЛИЧНЫХ ПОЛОСАХ ГЕРЦБЕРГА В АТМОСФЕРАХ ЗЕМЛИ, ВЕНЕРЫ И МАРСА

Цель данной работы **– показать особенности корреляции результатов теоретических расчетов интенсивностей свечения возбуждённого молекулярного кислорода с экспериментальными данными по ночному свечению O_2^*, полученными с различных космических летательных аппаратов.**

Антоненко О.В., Кириллов А.С.
Полярный геофизический институт
Апатиты

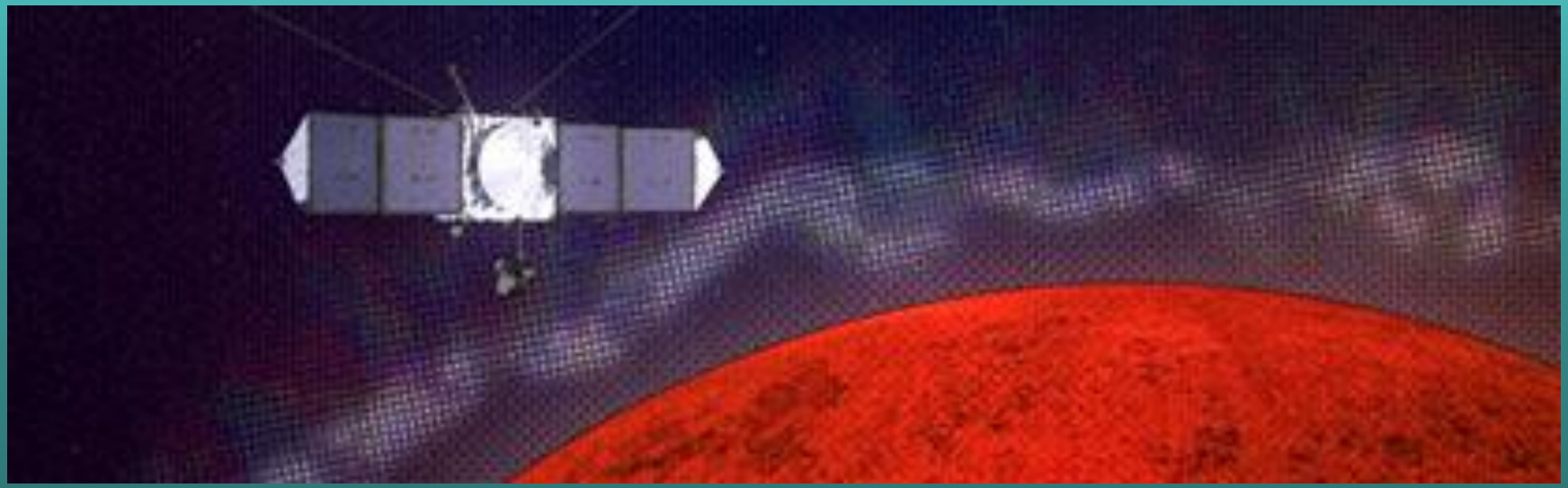
В настоящей работе показаны особенности корреляции результатов расчетов интенсивностей свечения O_2^* с экспериментальными данными, полученными с различных космических летательных аппаратов. Рассматривается свечение различных полос Герцберга в атмосферах планет с учетом концентраций доминирующих газов. Полосы излучения Герцберга II были идентифицированы в лабораторном спектре, опубликованном Дегеном в 1968 г., но в ночном свечении первая идентификация была не в земной атмосфере, а на Венере. В работе рассматриваются полосы системы Герцберга II (0–7), (0–8), (0–9), (0–10) и (0–11),по данным прибора VIRTIS (аппарат Venus Express). Остальные полосы, хотя и были однозначно выявлены на усредненном спектре, характеризуются низким соотношением сигнал/шум. Прямое измерение отдельных профилей на лимбе было затруднено из-за низкого отношения сигнал/шум прибора. В связи с этим к данным в спектральном диапазоне 300–400 нм следует относиться с осторожностью *[Migliorini A.,et al, 2013].*

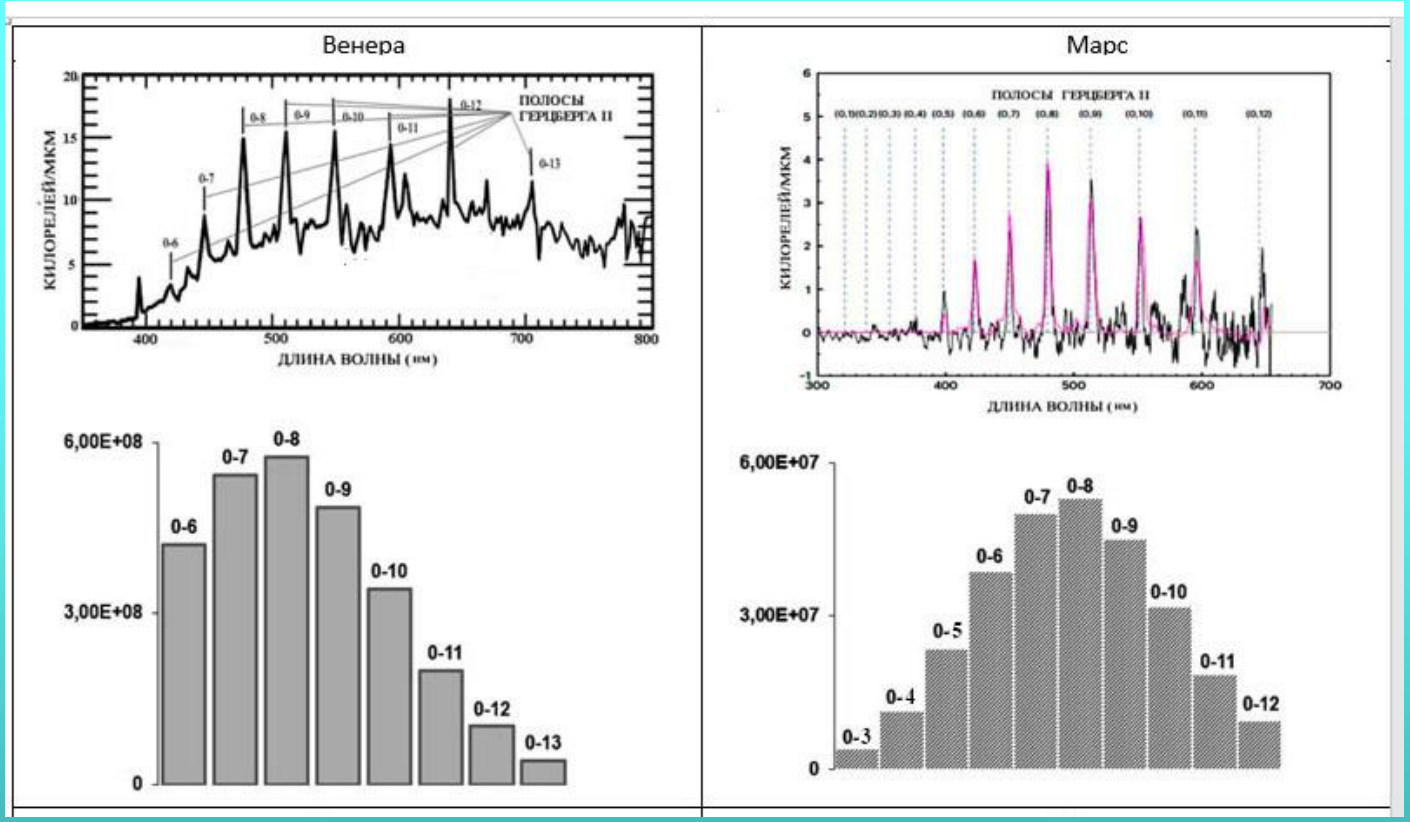


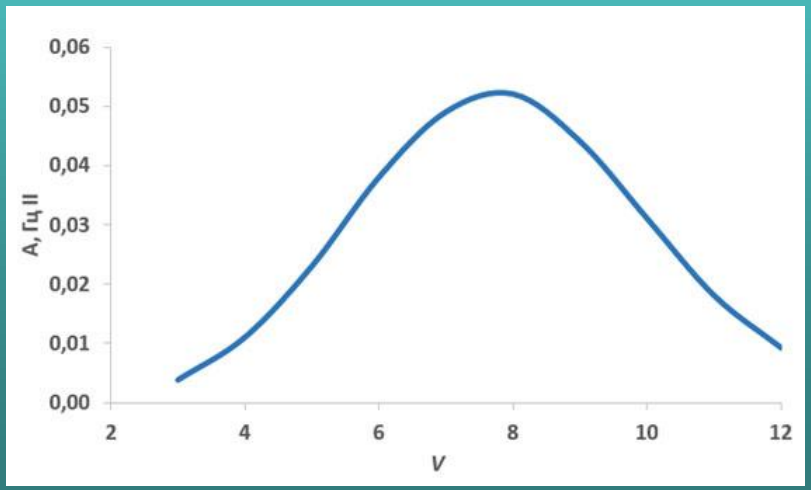
**На рисунке полосы Герцберга II ночного свечения молекулярного кислорода.
(Вверху) Ночное
свечение атмосферы Венеры,
зарегистрированное аппаратом «Венера-9» (1).
(Внизу) Ночное
свечение атмосферы Венеры,
воспроизведенное в лабораторных условиях
(послесвечение). Штриховые линии
на каждом из
спектров показывают относительную чувствительность
двух спектрометров *[Lawrence G.M. et al., 1977]*.**

Поскольку общее давление в атмосфере Марса значительно ниже, чем на Венере, область высот, наиболее благоприятная для возникновения такого свечения, находится ближе к поверхности планеты, чем на Венере. Однако в этом слое протекают реакции с участием продуктов фотодиссоциации водяного пара, которые приводят к каталитическому расходованию атомарного кислорода. Предположительно, наиболее подходящим местом для поиска ночного свечения в атмосфере Марса является область над зимним полюсом: из-за очень низких температур атмосфера там крайне сухая, а плотность атомарного кислорода максимальна, о чем свидетельствует присутствие озона *[Lawrence G.M. et al., 1977]*.

На ночной стороне Марса ультрафиолетовое и инфракрасное излучение исследовалось спектральными приборами на борту миссий Mars Express (MEx) и MAVEN. В статье *[Gérard J.-C. et al., 2024]* описываются новые наблюдения, выполненные с помощью ультрафиолетового и видимого (UVIS) канала спектрометра прибора NOMAD, установленного на аппарате ExoMars TGO. Прибор UVIS охватывает спектральный диапазон 200–650 нм и может вести наблюдения как в надире, так и в режиме солнечного затмения. В ярких спектрах между 400 и 600 нм отчетливо проявлялась полосчатая структура. Длины волн и относительные интенсивности указывают на совпадение с наиболее интенсивными полосами $v' = 0$ перехода O_2 Герцберга II.





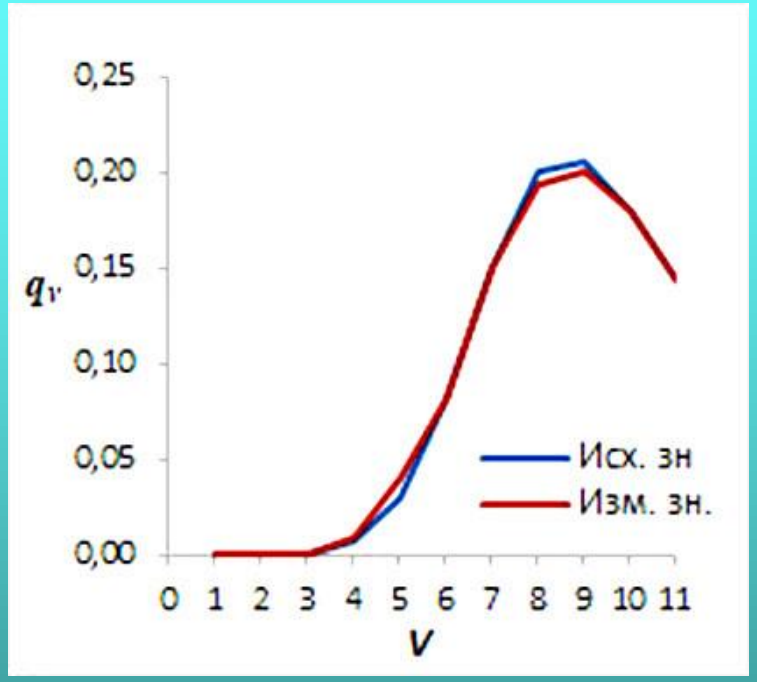


Колебательные уровни	Коэффициенты Эйнштейна $A_{v'}$ (c^{-1})
v=3	0.0038
v=4	0.011
v=5	0.023
v=6	0.038
v=7	0.049
v=8	0.052
v=9	0.044
v=10	0.031
v=11	0.018
v=12	0.0092

Наблюдаемые длины волн идеально совпадают с лабораторными спектрами и спектрами Венеры Герцберга II. Небольшие различия в относительной яркости полос на рисунке справа обусловлены наличием фонового шума в данных UVIS. Фиолетовая кривая — это эталонный спектр ночного свечения Венеры *[Gérard J.-C. et al., 2024]*. Общая интенсивность гистограмм, рассчитаных для 67° с.ш. при Ls ≈ 180 полос (v'=0→v"=3–12) - 280 Р ($2{,}8*10^8$ фотон $см^{-2}$ $с^{-1}$). Коэф $A_{v'}$ ($с^{-1}$) – в *[Bates D.R., 1989]* Значение нормирующего коэффициента $q(_{v=0})$ по Герцбергу II равным 1

Показана нормировка каждого значения квантовых выходов делением на коэффициент приведения к единице просуммированных квантовых выходов для состояния $A^3\Sigma u^+$.

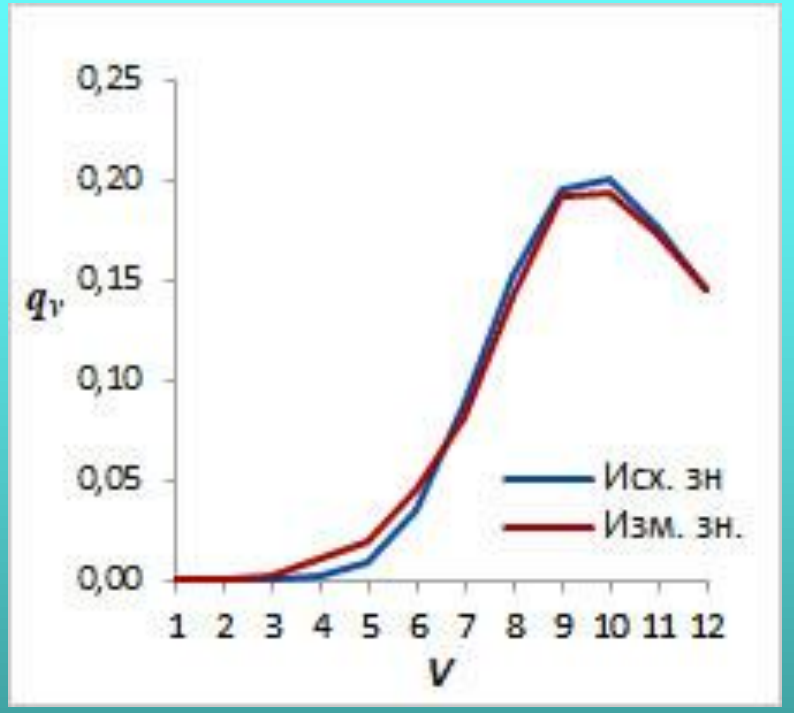
Колебательные уровни	Нормирующие коэффициенты	Изменённые нормирующие коэффициенты
v=0	0.00000	0,00000
v=1	0.00008	0,00008
v=2	0.00099	0,00099
v=3	**0.00707**	**0,00943**
v=4	**0.03028**	**0,04037**
v=5	0.08223	0,08223
v=6	0.15088	0,15088
v=7	**0.20011**	**0,19344**
v=8	**0.20636**	**0,20059**
v=9	0.17915	0,17915
v=10	0.14285	0,14285
	Сумма =1	**Сумма =1**



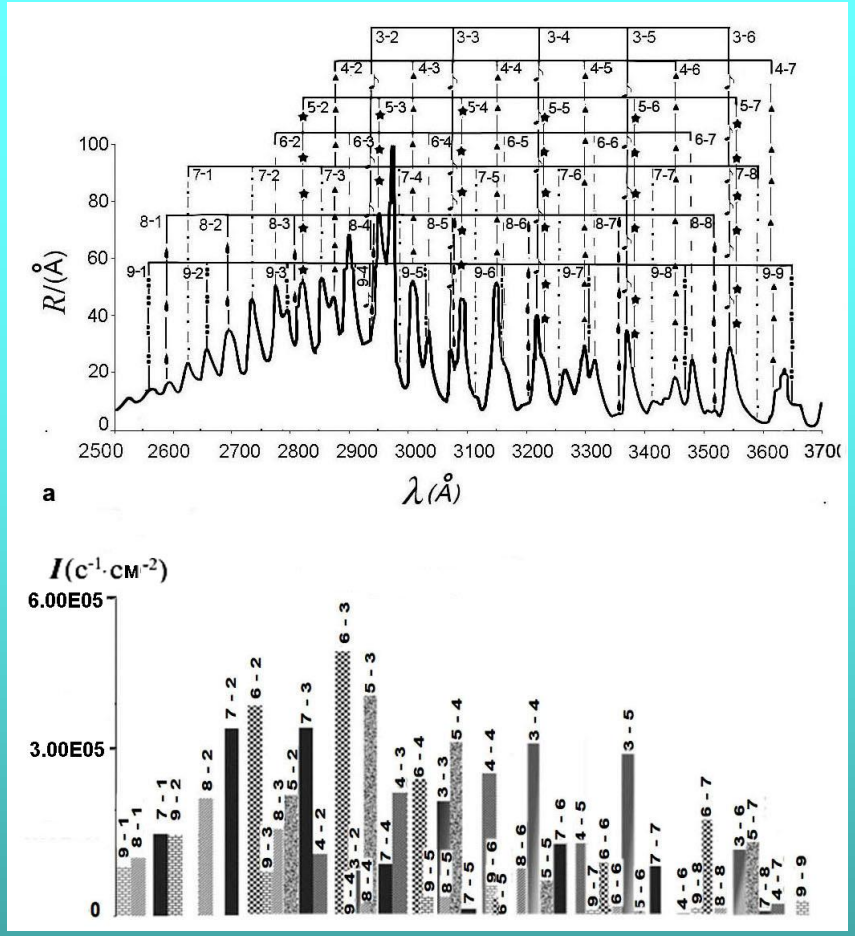
В данном случае лучшее согласие результатов расчетов с экспериментальными данными удалось получить благодаря коррекции квантовых выходов $q_{v'}$, которые в *[Кириллов А.С., 2012]* аппроксимировались аналитической формулой.

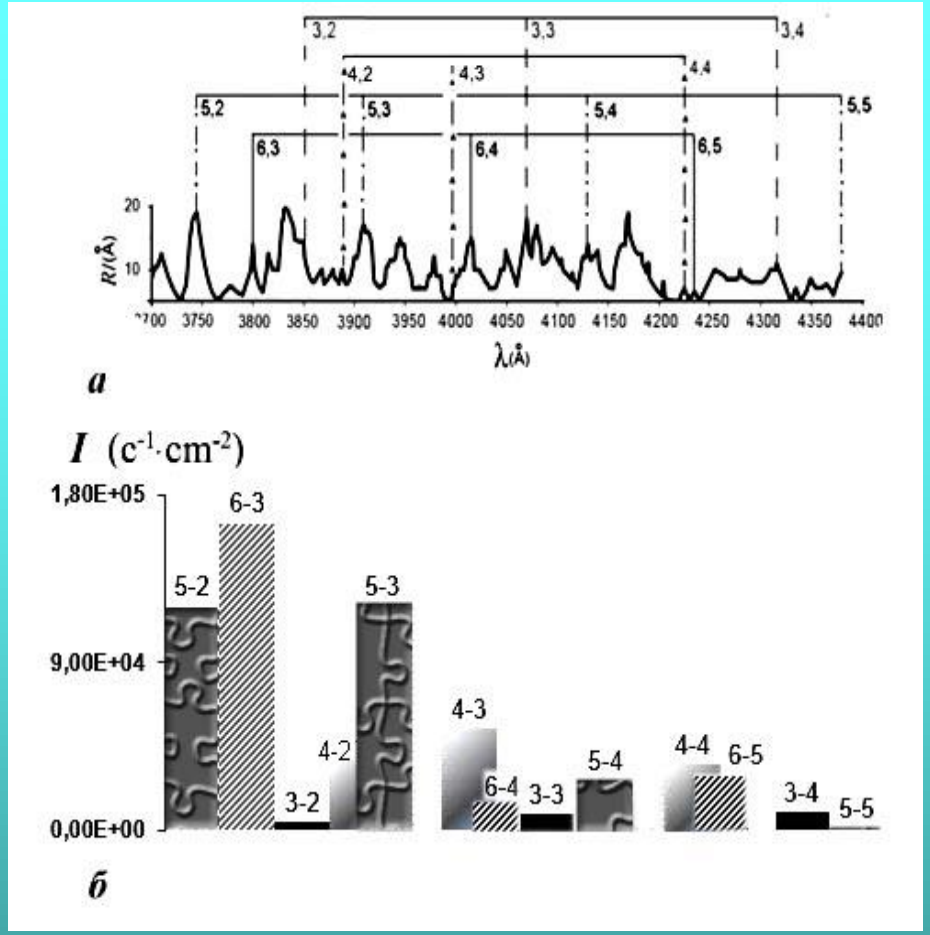
Произведена нормировка каждого значения квантовых выходов делением на коэффициент приведения к единице просуммированных квантовых выходов для состояния $A'^{3}\Delta u$.

Колебательные уровни	Нормирующие коэффициенты	Изменённые нормирующие коэффициенты
v=0	0,00000	0,00000
v=1	0,00001	0,00001
v=2	**0,00013**	**0,00113**
v=3	**0,00143**	**0,01026**
v=4	**0,00903**	**0,02003**
v=5	**0,03489**	**0,04489**
v=6	**0,08749**	**0,08049**
v=7	**0,15172**	**0,14172**
v=8	**0,19516**	**0,19213**
v=9	**0,19983**	**0,19302**
v=10	**0,17600**	**0,17200**
v=11	0,14431	0,14431
	Сумма=1	**Сумма =1**



В данном случае лучшее согласие результатов расчетов с экспериментальными данными удалось получить благодаря и изменению коэффициентов Эйнштейна, полученных в *[Bates D.R., 1989]*, и коррекции квантовых выходов $q_{v'}$, которые в *[Кириллов А.С., 2012]* аппроксимировались аналитической формулой.





Свеху: фрагменты усредненного спектра свечения ночного неба, измеренного спектрографом с космического шаттла [*Broadfoot and Bellaire, 1999*] (а) - в диапазоне 370-440 нм (3700-4400 Å), (б) - в диапазоне 250-360 нм (2500-3600 Å) (Y – интенсивности (R/Å), X – длины волн λ (Å).

Снизу: рассчитанные значения интегральной светимости (гистограммы) для различных полос Чемберлена и полос Герцберга I для атмосферы Земли для средних широт.

Квантовые выходы рассчитаны по формуле:

$$q_v \sim \exp[-(E_v - E_0)^2/\alpha^2],$$

где E_0 = 40000 см$^{-1}$, α = 1500 см$^{-1}$ – параметры, полученные определённые методом наименьших квадратов,

E_v –энергия колебательного уровня v.

Рассчитаны значения интегральной светимости (свечения в столбе) I (см$^{-2}$ с$^{-1}$) для состояния $A^3\Sigma u^+$ и для состояния $A'^3\Delta u$ по формуле:

$$I_{(v'\to v'')} = \int_{h_0}^{h_i} [O_2^*]\, A_{(v'\to v'')}\, dh,$$

где Av - коэффициенты Эйнштейна [4],

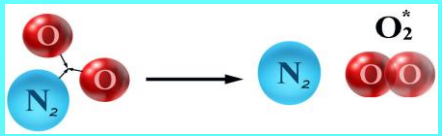
dh - приращение высоты.

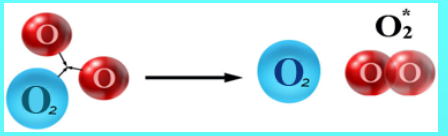
Таблица сопоставления коэффициентов Эйнштейна для для состояния $A^3\Sigma u^+$ и для состояния $A'^3\Delta u$.

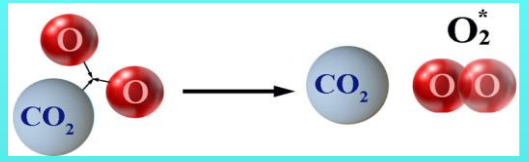
Колебательные уровни	$A^3\Sigma u^+$	$A'^3\Delta u$	
5-2	1,7	0,24	
5-3	2,9	0,25	
5-4	2,3	**0,081**	**0,18**
5-5		**0,0015**	**0,1**
6-2	2,3		
6-3	2,9	**0,19**	**0,08**
6-4	2,5	0,019	
6-5		0,035	
3-2	0,65	0,1	
3-3	1,7	0,2	
3-4	2,6	0,21	

$$[O_2^\star] = \frac{q_{v'}\alpha\, k_1[O]^2([N_2]+[O_2])}{A_{(v')} + k_{N_2}[N_2] + k_{O_2}[O_2]}$$

$$[O_2^\star] = \frac{q_{v'}\alpha\, k_1[O]^2[CO_2]}{A_{(v')} + k_{CO_2}[CO_2]}$$



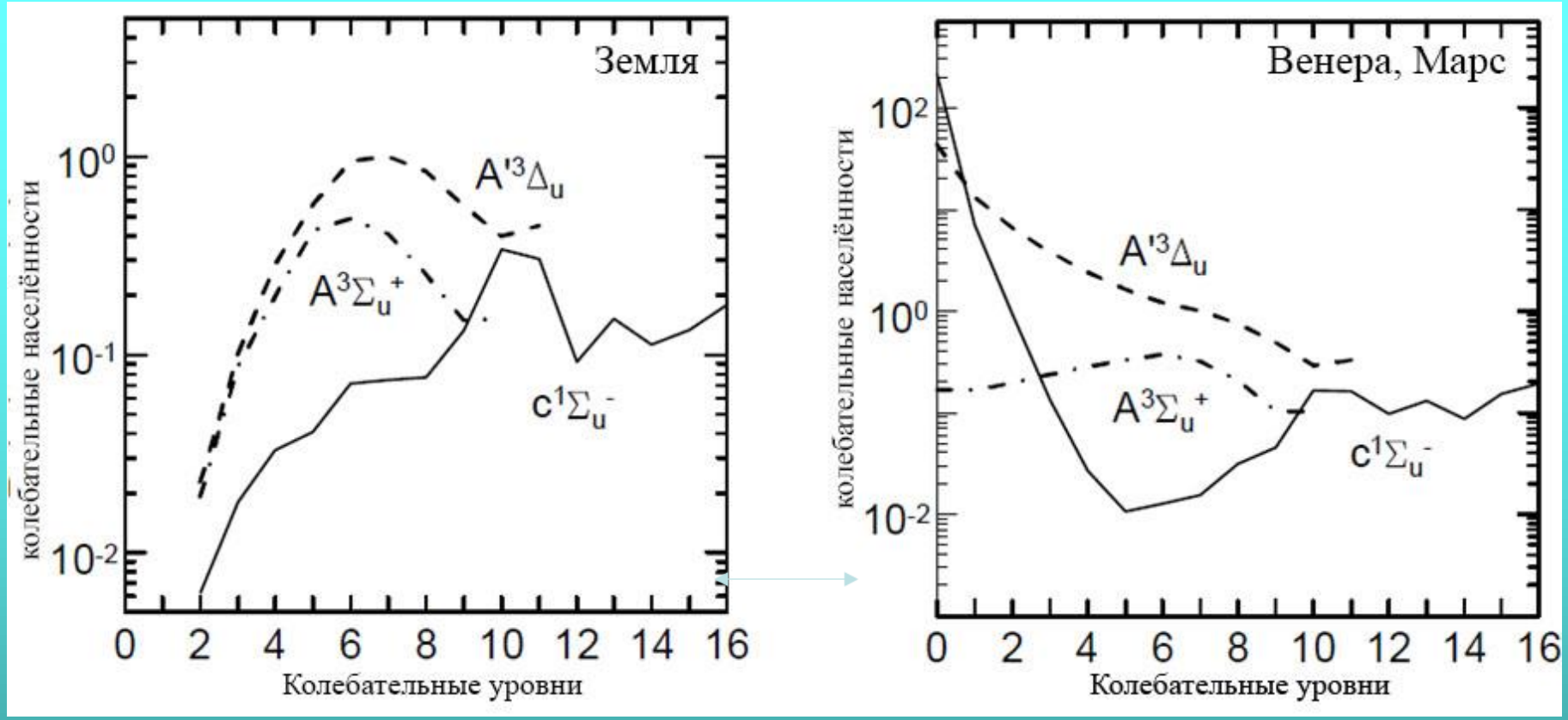




	Земля	Марс, Венера
k_1(см^{6}с$^{-1}$)	$k_1 = 6*10^{-34}*(300/T)^{2,3}$	$k_1 = 2*2,7^{-34}*(300/T)^2$

k_1(см^{6}с$^{-1}$) **константа скорости реакции рекомбинации, применялась как рассчитанная величина в зависимости от средней температуры планеты, согласно Н.Н. Шефову** *[Шефов и др. 2006]* **для Земли, Гагне** *[Marie-Ève Gagné, 2011]* **для условий Марса.**

k_{N_2}(см^{3}с$^{-1}$) , k_{O_2}(см^{3}с$^{-1}$), k_{CO_2}(см^{3}с$^{-1}$) **константа гашения возбуждённого кислорода при двойных столкновениях О с частицами атмосферных составляющих.**



Рассчитанные колебательные населенности состояний Герцберга ($c^1\Sigma_u^-$, $A'^3\Delta_u$, $A^3\Sigma_u^-$) на высоте 95 км в атмосфере Земли (слева) и 100 км в атмосфере Венеры (справа) с учетом процесса

$O_2(A'^3\Delta_u,v) + CO_2(0,0,0) \rightarrow O_2(c^1\Sigma_u^-,v'=v) + CO_2(1,0,0)$.

Возбуждение образуется по первой симметричной моде (движении атомов О вокруг С)



Выводы

- Проведено сравнение рассчитанных значений интегральной светимости полос Герцберга II в атмосфере Марса в условиях низкой солнечной активности с экспериментальными данными, полученными в диапазоне длин волн 400-600 нм с помощью UVIS канала прибора NOMAD, установленного на аппарате ExoMars TGO и с лабораторными спектрами Венеры *[Gérard J.-C, 2024 г.]*.
- Сравнение показало согласие экспериментальных данных UVIS и лабораторных Венеры с рассчитанными значениями светимости полос Герцберга II.

- Проведено сравнение рассчитанных значений интегральной светимости полос Герцберга I в условиях низкой солнечной активности с экспериментальными данными, полученными в диапазоне длин волн 250-360 нм спектрографом с космического шаттла “Индевор” в условиях низкой солнечной активности *[Broadfoot A.L., 1999]*.
- Сравнение экспериментальных данных с рассчитанными значениями интенсивностей полос показало, что лучшее согласие наблюдается после коррекции квантовых выходов колебательных уровней $q_{v'}$ состояния $A_3\Sigma_u^+$ в результате тройных столкновений.

- Проведено сравнение рассчитанных значений интегральной светимости полос Чемберлена в условиях низкой солнечной активности с экспериментальными данными, полученными в диапазоне длин волн 370-440 нм спектрографом с космического шаттла“Индевор” в условиях низкой солнечной *[Broadfoot A.L., 1999]*
- Сравнение экспериментальных данных с рассчитанными значениями интенсивностей полос показало, что лучшее согласие наблюдается после коррекции квантовых выходов колебательных уровней $q_{v'}$ состояния $A'_3\Delta_u$ в результате тройных столкновений, а также изменению коэффициентов Эйнштейна, полученных в *[Bates D.R., 1989].*