Исследование кинетики электронно-возбужденных состояний молекул N_2, O_2 и иона N_2^+ в спрайтах и импульсных разрядах

Кириллов А.С.[1], Тарасенко В.Ф.[1,2]

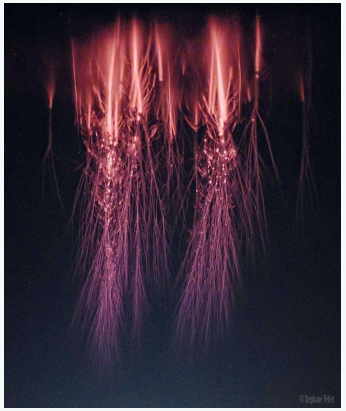
[1] Полярный геофизический институт, Апатиты

[2] Институт сильноточной электроники, Томск

Фотографии красных спрайтов

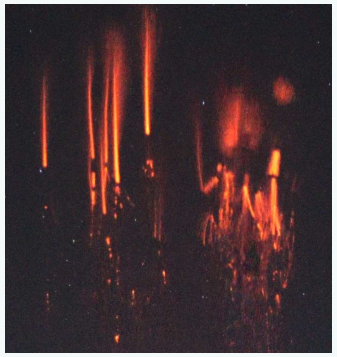
(Авторы благодарят профессионального фотографа Frankie Lucena за предоставленные фотографии и разрешение их использовать)



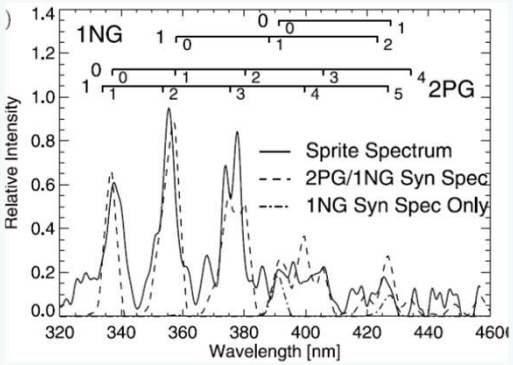


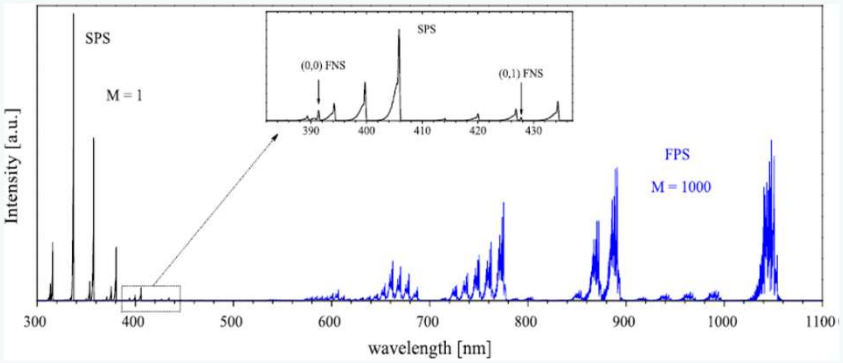


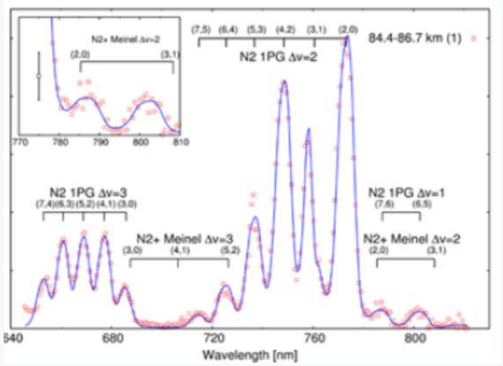




Спектры излучения N_2 в лабораторном разряде и спрайтах [Hoder et al., 2015, *J. Appl. Phys*., v.117, 073302] (1PG+2PG), [Kanmae et al., 2007, *GRL*, v.34, L07810] (1PG), [Heavner et al., 2010, *JGR-A*, v.115, A00E44] (2PG)



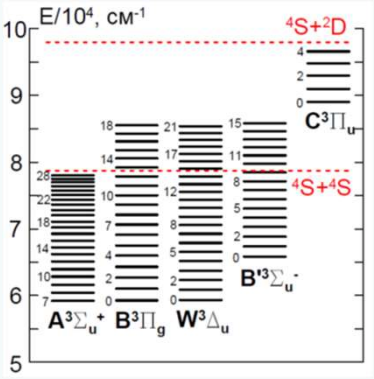


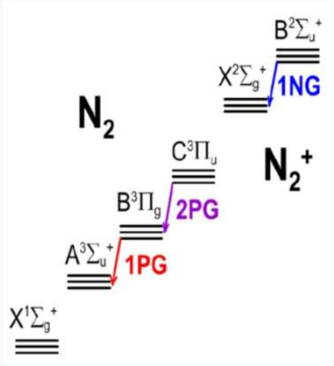


2PG – $C^3\Pi_u \rightarrow B^3\Pi_g$

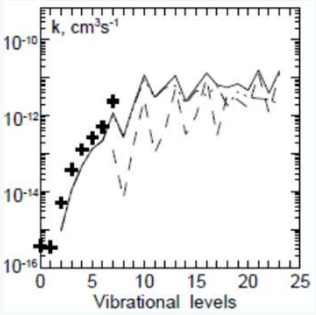
1PG – $B^3\Pi_g \rightarrow A^3\Sigma_u^+$

1NG – $B^2\Sigma_u^+ \rightarrow X^2\Sigma_g^+$

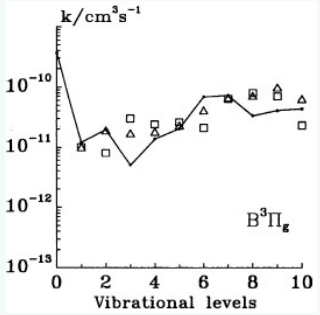




Рассчитанные константы скоростей гашения для $N_2(A,B,W,B',C) + N_2$ столкновений, использованные в модельных расчетах

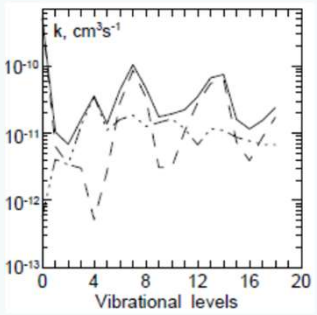


$A^3\Sigma_u^+$

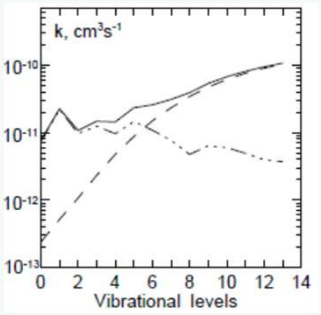


$B^3\Pi_g$

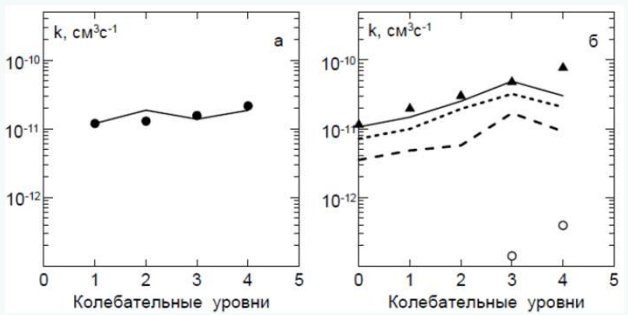
Kirillov, 2004, Adv. Space Res, v.33, p.998
Kirillov, 2010, Ann. Geophys., v.28, p.181
Kirillov, 2011, J. Quan. Spec. Rad. Tran., v.112, p.2164
Kirillov, 2016, Chem. Phys. Lett., v.643, p.131
Kirillov, 2019, Chem. Phys. Lett., v.715, p.263



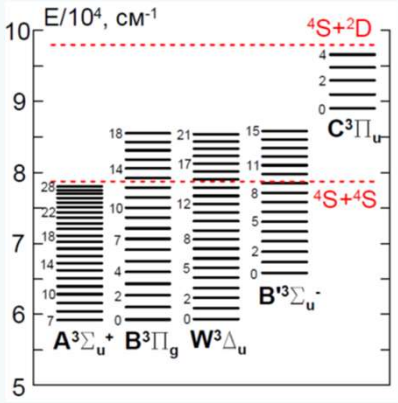
$W^3\Delta_u$



$B'^3\Sigma_u^-$

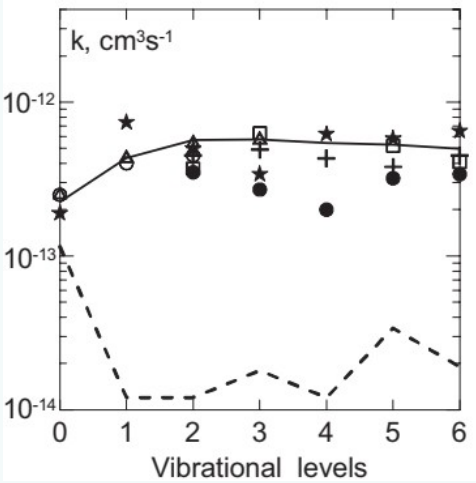


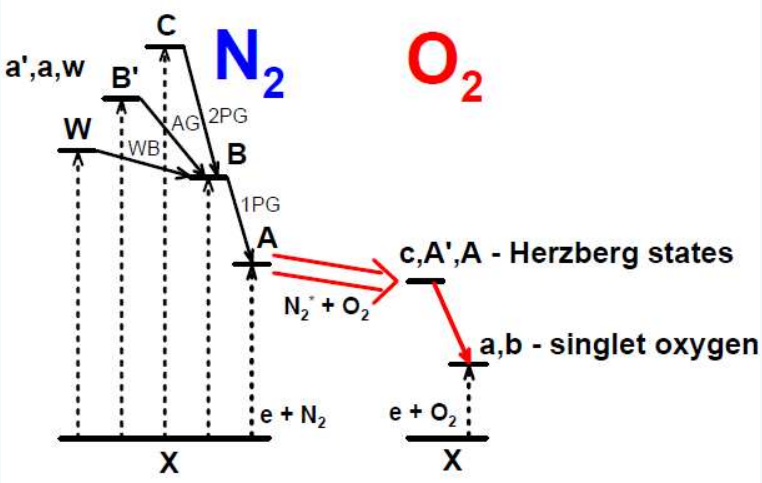
$C^3\Pi_u$



Константы скоростей гашения для $N_2(A) + O_2$ столкновений, использованные в модельных расчетах

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





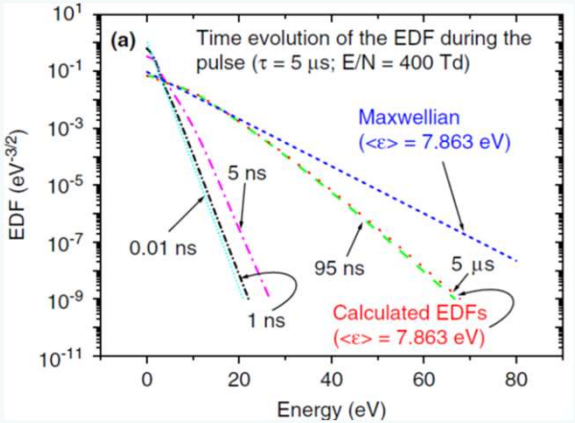
$N_2(A^3\Sigma_u^+,v=0\text{-}6) + O_2 \rightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+,v^*) + O_2(c,A',A)$ или O+O

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

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 τ≈5 мкс.

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

$e + N_2(X^1\Sigma_g^+, v=0) \rightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+, B^3\Pi_g, W^3\Delta_u, B'^3\Sigma_u^-, C^3\Pi_u, v\geq 0) + e$ (1)
$e + N_2(X^1\Sigma_g^+, v=0) \rightarrow N_2^+(B^2\Sigma_u^+, v\geq 0) + 2\,e$ (2)
берутся согласно [Itikawa, 2006, J. Phys. Chem. Ref. Data].



Спектр электронов разряда, рассчитанный в [Gordillo-Vazquez, 2008, J. Phys. D, v.41, 234016] для τ≈5 мкс

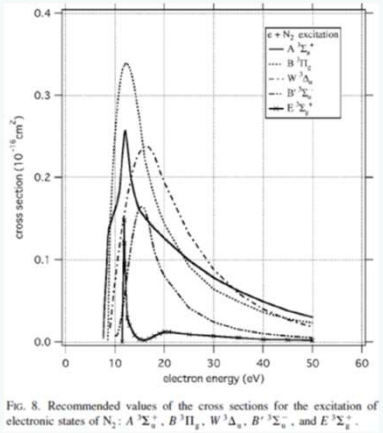
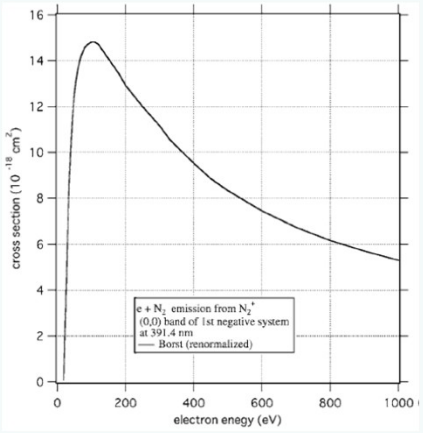


FIG. 8. Recommended values of the cross sections for the excitation of electronic states of N_2: $A\,^3\Sigma_u^+$, $B\,^3\Pi_g$, $W\,^3\Delta_u$, $B'\,^3\Sigma_u^-$, and $E\,^3\Sigma_g^+$.

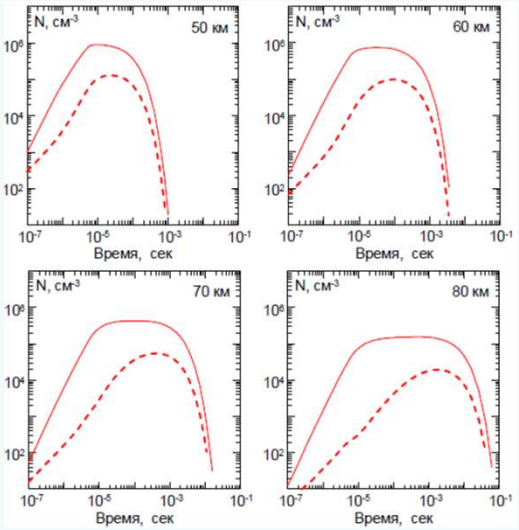
Поперечные сечения для триплетных состояний



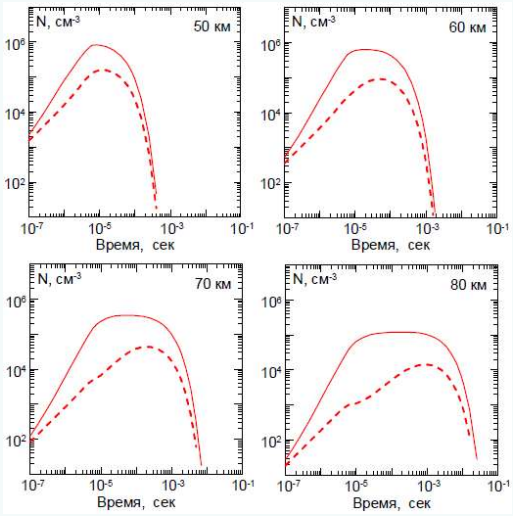
Поперечные сечения для 391 нм полосы

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

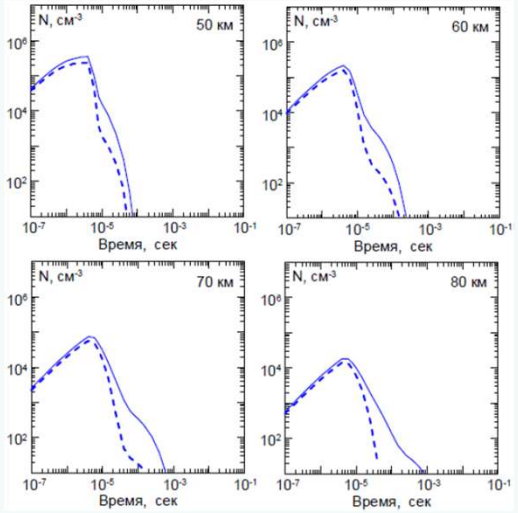
$N_2(A^3\Sigma_u^+, v=0)$



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

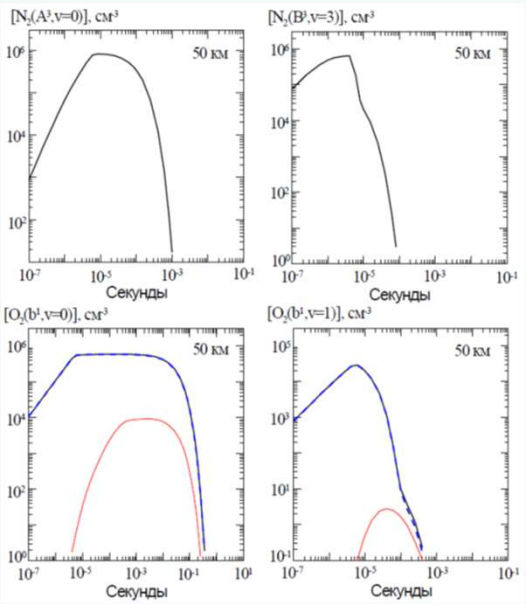


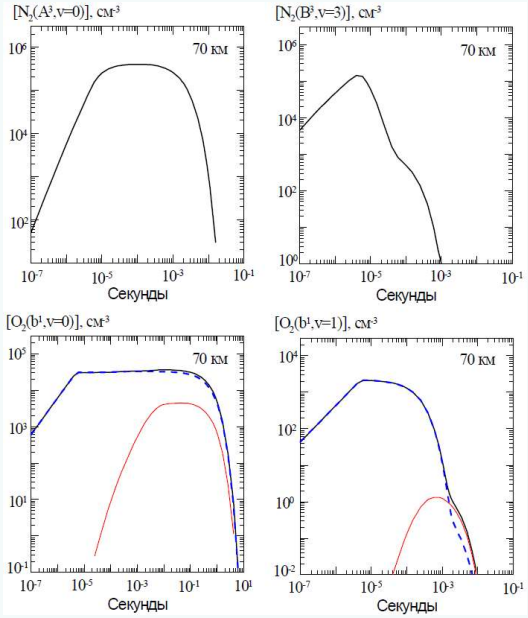
$N_2(B^3\Pi_g, v=5)$



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.

Рассчитанные концентрации $N_2(A^3\Sigma_u^+, v=0)$, $N_2(B^3\Pi_g, v=3)$, $O_2(b^1\Sigma_g^+, v=0)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+, v=1)$ во время спрайтов на высотах 50 и 70 км





Сплошные линии – вклад всех процессов,
синие штрихи – вклад прямого возбуждения e + O2 → $O_2(b^1\Sigma_g^+, v=0,1)$
красные линии – вклад процессов переноса энергии

$$N_2(A^3\Sigma_u^+) + O_2 \rightarrow O_2(c^1\Sigma_u^+, A'^3\Delta_u, A^3\Sigma_u^+) + O_2$$

$$O_2(c^1\Sigma_u^+, A'^3\Delta_u, A^3\Sigma_u^+) + O_2, N_2 \rightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+, v=0,1) + O_2, N_2$$

Лабораторные измерения

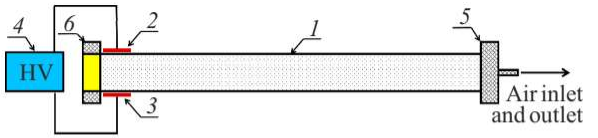
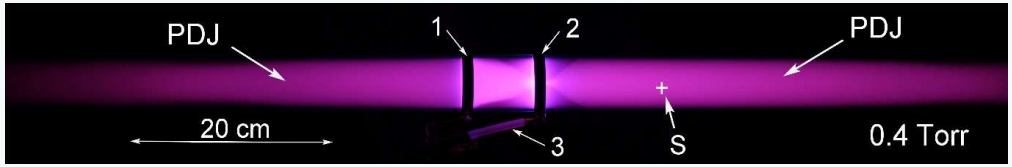
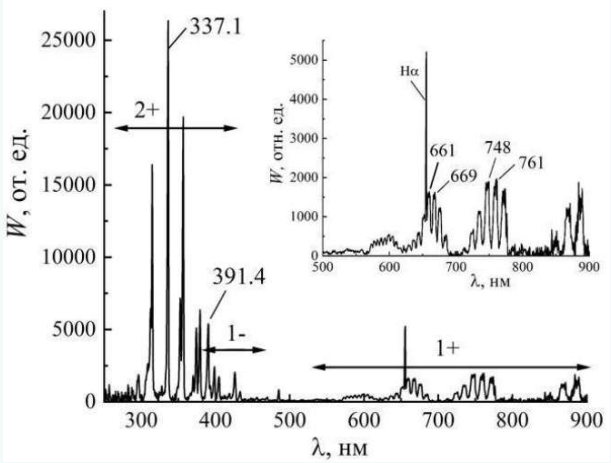


Рис. 1. Установка для формирования стримерного разряда: *1* — кварцевая трубка; *2, 3* — электроды из алюминиевой фольги; *4* — импульсный высоковольтный генератор с изменяемой полярностью и регулируемой амплитудой напряжения; *5* — фланец из капролона со штуцером для откачки и напуска воздуха; *6* —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

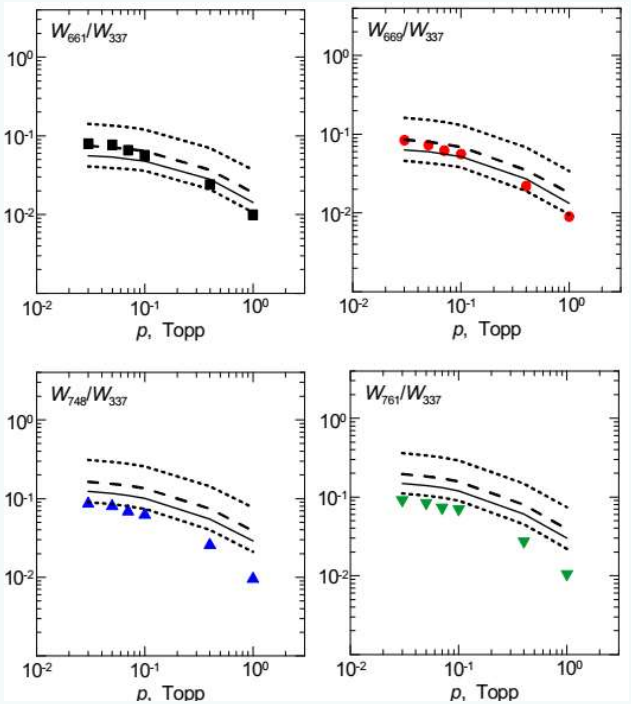


Фотографии разряда для давления воздуха 0.4 Торр.
1 – заземлённый электрод, 2 – высоковольтный электрод,
3 – высоковольтный кабель.
PDJ – плазменные диффузные струи. S– область, из которой регистрировались спектры излучения, точка (+).

Спектральное распределение энергии излучения плазмы в диапазоне
Δλ = 250-900 нм при P=0.2 Торр.

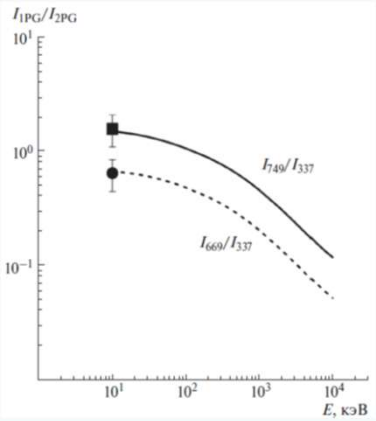


Сравнение рассчитанных W_{1PG}/W_{337} и I_{1PG}/I_{337} в разряде и полярных сияниях с экспериментальными данными



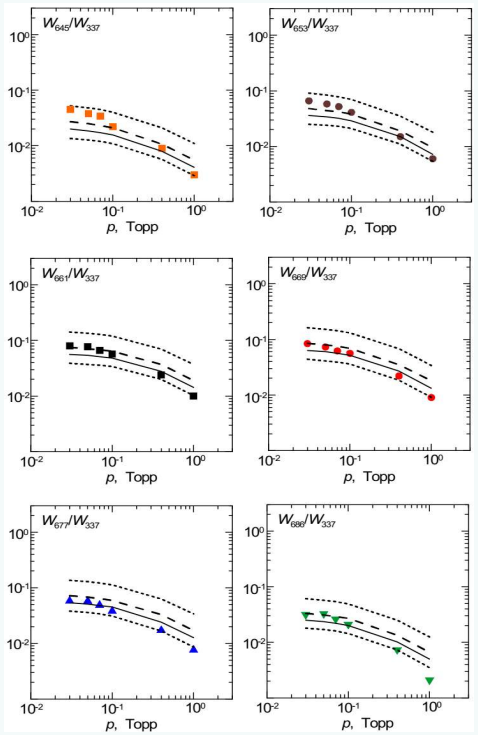
Верхние точки – 2 эВ
Штрихи – 3 эВ
Сплошные линии – 5 эВ
Нижние точки – 8 эВ

Кириллов и др., Известия РАН, сер.физ., 2026, т.90, No3, с.617.
Тарасенко и др., Оптика Атмос. Океана, 2026, т.39, No4, с.320.

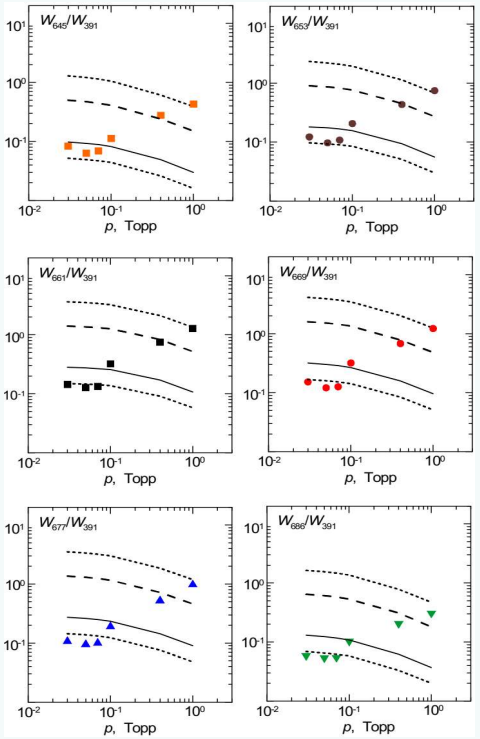


Расчеты для спектров авроральных электронов $f(E)=A\ \exp(-E/E_0)$
[Кириллов и Белаховский, Геом. Аэрон., 2020, т.60]
Ракетные измерения на острове Хейса (13.12.1972)
[Кириллов и др., Геом. Аэрон., 1987] (■,●)

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

Взаимодействие заряженных частиц с молекулами N_2 и O_2 приводит к образованию электронно- и колебательно-возбужденных N_2, O_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, синглетных и триплетных $b^1\Sigma_g^+$, $c^1\Sigma_u^-$, $A'^3\Delta_u$, $A^3\Sigma_u^+$ состояний O_2 и дублетного $B^2\Sigma_u^+$ состояния N_2^+ с учетом переноса энергии возбуждения при неупругих молекулярных столкновениях и спонтанных излучательных переходах.
2. Проведены расчеты концентраций электронно-возбужденных состояний N_2 и O_2 для высот 50-80 км свечения спрайтов. Показаны вклады основных механизмов образования этих состояний.
3. 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 населенностей 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.