Исследование влияния метастабильного азота $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ на образование электронно-возбужденного O_2 в атмосфере Земли во время высыпания высокоэнергичных электронов

Кириллов А.С., Куликов Ю.Н.

Полярный геофизический институт, Апатиты

Введение

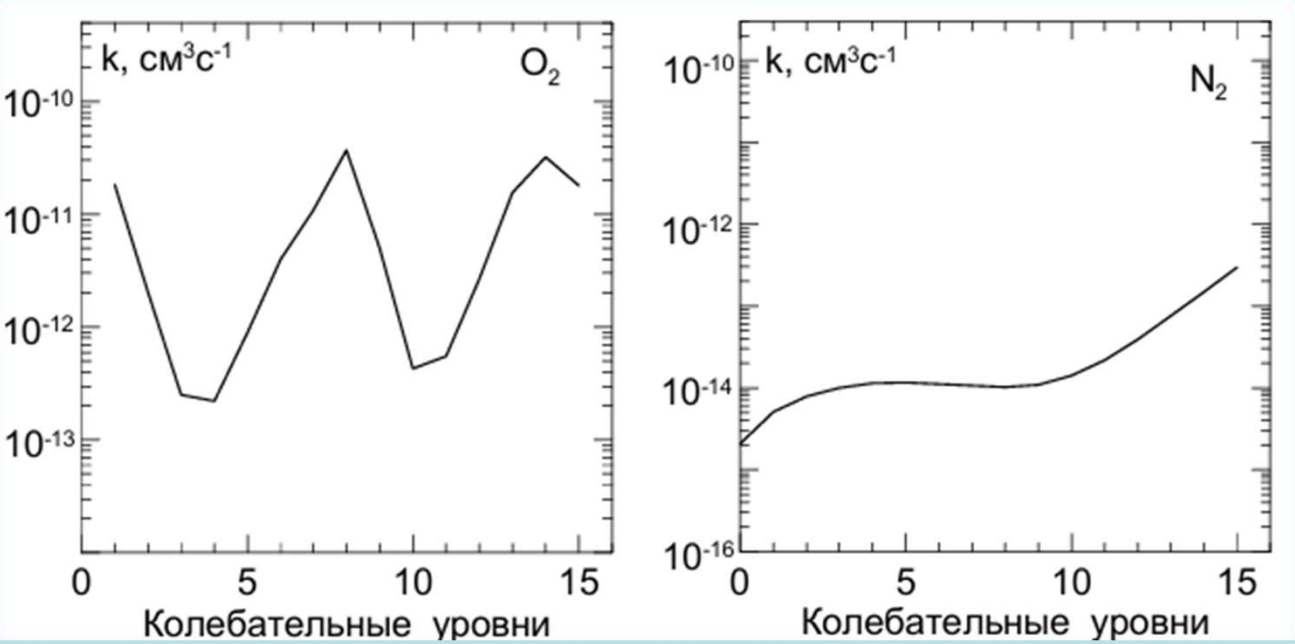
Излучение полос Атмосферной (Atm) системы молекулярного кислорода в спектре свечения полярной ионосферы происходит в результате спонтанных излучательных переходов с электронно-возбужденного состояния $b^1\Sigma_g^+$ молекулы O_2 на основное $X^3\Sigma_g^-$

$$O_2(b^1\Sigma_g^+, v) \rightarrow O_2(X^3\Sigma_g^-, v') + h\nu_{Atm} \quad , \qquad (1)$$

Наиболее интенсивной из Атмосферной системы является полоса 762 нм, обусловленная переходом (1) с $v=0 \rightarrow v'=0$.

Целью настоящей работы является исследование физико-химических процессов формирования возбуждённого состояния $b^1\Sigma_g^+$ молекулярного кислорода в полярной ионосфере Земли на высотах 80-120 км при высыпаниях авроральных электронов.
Особое внимание уделяется расчету констант скоростей взаимодействия синглетного кислорода с атмосферными составляющими с O_2 и N_2, поскольку их использование позволяет оценить квантовые выходы продуктов взаимодействия при неупругих столкновениях.

Расчет констант неупругого взаимодействия $O_2(b^1\Sigma_g^+,v)$ с молекулами O_2 и N_2



Расчеты констант взаимодействия синглетного кислорода $O_2(b^1\Sigma_g^+,v>0)$ с молекулами O_2 и N_2 был проведен согласно квантово-механическим приближениям. При расчетах было показано, что доминирующим каналом гашения является перенос энергии электронного возбуждения на молекулу-мишень с сохранением энергии колебаний у изначально возбужденной молекулы:

$$O_2(b^1\Sigma_g^+,v) + O_2(X^3\Sigma_g^-,v^*=0) \rightarrow O_2(X^3\Sigma_g^-,v'') + O_2(a^1\Delta_g,b^1\Sigma_g^+,v') , \quad (2)$$

$$O_2(b^1\Sigma_g^+,v) + N_2(X^1\Sigma_g^+,v^*=0) \rightarrow O_2(a^1\Delta_g,v'') + N_2(X^1\Sigma_g^+,v') , \quad (3)$$

На рисунке приведены результаты квантово-химических расчетов для уровней v=0-15 состояния $b^1\Sigma_g^+$. Рассчитанные константы используются при моделировании кинетики $O_2(b^1\Sigma_g^+,v\geq0)$, поскольку позволяют оценить квантовые выходы продуктов взаимодействия при неупругих столкновениях (2) и (3). Это позволяет учесть особенности релаксации энергии возбуждения синглетного кислорода $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ при столкновительных процессах.

Результаты расчётов для высот нижней полярной ионосферы Земли

Наиболее интенсивной из Атмосферной системы является полоса 762 нм, обусловленная переходом (1) с $v=0 \rightarrow v'=0$.

Кроме того, в настоящих расчетах рассматриваются полосы 771 и 780 нм, обусловленные переходами (1) с $v=1 \rightarrow v'=1$ и $v=2 \rightarrow v'=2$.

При расчетах мы выделяем три основных процесса возбуждения $O_2(b^1\Sigma_g^+, v=0\text{-}2)$ и свечения Атмосферных полос (1) молекулярного кислорода в нижней полярной ионосфере (80-120 км):

1. Процесс прямого возбуждения синглетного состояния авроральными электронами

$$e + O_2(X^3\Sigma_g^-, v=0) \rightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+; v') + e \,. \qquad (4)$$

2. Процесс возбуждения метастабильного атомарного кислорода $O(^1D)$ авроральными электронами

$$e + O(^3P) \rightarrow O(^1D) + e \qquad (5)$$

и реакция переноса энергии электронного возбуждения с метастабильного атомарного кислорода $O(^1D)$ при столкновении с молекулами $O_2(X^3\Sigma_g^-)$

$$O(^1D) + O_2(X^3\Sigma_g^-, v=0) \rightarrow O(^3P) + O_2(b^1\Sigma_g^+, v'=0\text{-}2), \qquad (6)$$

где квантовые выходы $f(v'=0)=0.19$, $f(v'=1)=0.78$, $f(v'=2)=0.03$.

3. Процесс переноса энергии возбуждения с метастабильного молекулярного азота $N_2(A^3\Sigma_u^+, v'=0)$ на молекулы кислорода O_2

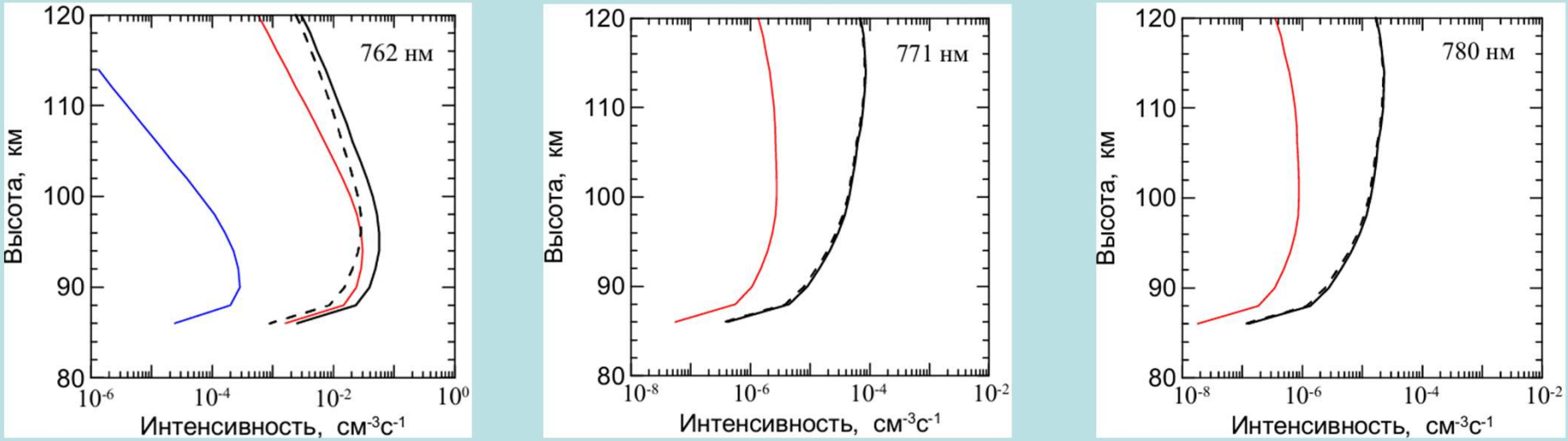
$$N_2(A^3\Sigma_u^+) + O_2 \rightarrow O_2(c^1\Sigma_u^+, A'^3\Delta_u, A^3\Sigma_u^+) + N_2 \qquad (7а)$$

$$O_2(c^1\Sigma_u^+, A'^3\Delta_u, A^3\Sigma_u^+) + O_2, N_2 \rightarrow O_2(b^1\Sigma_g^+, v=0\text{-}2) + O_2, N_2 \qquad (7б)$$

Результаты расчётов для высот нижней полярной ионосферы Земли

На рисунках показаны вклады процессов (4), (6) и (7а,б) в свечение полос 762 нм (переход (1) с *v*'=*v*''=0), 771 нм (переход (1) с *v*'=*v*''=1), 780 нм (переход (1) с *v*'=*v*''=2) при высыпании авроральных электронов с энергиями 40 кэВ и потоком 1000 эл/см^{2}сек.

Как видно из представленных рисунков, для всех колебательных уровней *v*'=0-2 состояния $b^1\Sigma_g^+$ значительный вклад в возбуждение вносит процесс (6) с участием метастабильного атомарного кислорода O(^{1}D). Кроме того, для *v*'=0 существенный вклад вносит прямое возбуждение авроральными частицами (4). Вклад процесса (7а,б) для *v*'=0 на два порядка меньше двух других. Для *v*'=1,2 он на пять порядков меньше. Поэтому им можно пренебречь при расчетах скоростей возбуждения состояния $b^1\Sigma_g^+$ в полярной ионосфере.



Вклады процессов (4) (красные линии), (6) (штрихи) и (7а,б) (синяя линия) в свечение полос 762 нм, 771 нм, 780 нм.
Сплошные линии – сумма вкладов всех процессов (4), (6) и (7а,б).

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 $O_2(b^1\Sigma_g^+,v=0\text{-}2)$ на высотах 80-120 км, образованного в случае высыпания авроральных электронов с энергией 40 кэВ.

Исследованы вклады различных процессов в образование синглетного кислорода $O_2(b^1\Sigma_g^+,v)$ на рассмотренных высотах и в свечение Атмосферных полос 762, 771 и 780 нм.

Показано, для всех колебательных уровней v'=0-2 состояния $b^1\Sigma_g^+$ значительный вклад в возбуждение вносят неупругие взаимодействия (6) с участием метастабильного синглетного атомарного кислорода $O(^1D)$.

Кроме того, для v'=0 существенный вклад вносит прямое возбуждение авроральными частицами (4).

Как показали расчеты, вкладом процессов (7а,б) переноса энергии возбуждения метастабильного азота $N_2(A^3\Sigma_u^+,v=0)$ при молекулярных столкновениях можно пренебречь.