УДК 533.951

СВЕЧЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО АЗОТА И МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА В СРЕДНЕЙ АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ ВО ВРЕМЯ ВЫСЫПАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГИЧНЫХ ПРОТОНОВ

© 2021 г. А. С. Кириллов^{1,} *, В. Б. Белаховский^{1,} **, Е. А. Маурчев¹, Ю. В. Балабин¹, А. В. Германенко¹, Б. Б. Гвоздевский¹

¹Полярный геофизический институт, г. Апатиты (Мурманская область), Россия

*e-mail: kirillov@pgia.ru **e-mail: belakhov@mail.ru Поступила в редакцию 16.03.2021 г. После доработки 18.05.2021 г. Принята к публикации 27.05.2021 г.

На основании моделей электронной кинетики триплетных состояний молекулярного азота и синглетных состояний молекулярного кислорода для средней атмосферы Земли проведен расчет профилей интенсивностей полос первой и второй положительных систем N₂, Инфракрасной Атмосферной и Атмосферной систем O₂ в случае высыпания в атмосферу Земли высокоэнергичных протонов во время события GLE № 69 от 20 января 2005 г. Расчеты показали, что практически на всем рассматриваемом интервале высот 20–80 км имеется значительный вклад процессов гашения состояния В³П_g при молекулярных столкновениях. Кинетика синглетных состояний O₂ на высотах средней атмосферы во время высыпания протонов рассмотрены как с учетом прямого возбуждения высокоэнергичными частицами, так и с учетом межмолекулярных процессов переноса электронно-

го возбуждения. Показано, что процессы гашения состояния $b^l \Sigma_g^+$ во время неупругих молекулярных столкновений приводят к значительному понижению интенсивностей полос Атмосферной системы на высотах средней атмосферы.

DOI: 10.31857/S0016794021060092

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из индикаторов состояния атмосферы Земли является ее свечение. Поскольку молекулярный азот и молекулярный кислород доминируют в составе атмосферы Земли, спектры свечения атмосферы содержат множество полос азота и кислорода. В предыдущих работах [Кириллов и Белаховский, 2020a, 2020б; Kirillov and Belakhovsky, 2019, 2021] были проведены расчеты профилей интенсивностей полос первой (1PG) и второй положительных (2PG) систем, полос Лаймана-Бирджа-Хопфилда (LBH) молекулярного азота, а также полос Инфракрасной Атмосферной (IRAtm) и Атмосферной (Atm) систем молекулярного кислорода, обусловленных спонтанными излучательными переходами между электронно-возбужденными состояниями молекул N₂иO₂

$$N_2(B^3\Pi_g, v') \to N_2(A^3\Sigma_u^+, v'') + hv_{1PG},$$
 (1)

$$N_2(C^3\Pi_u, v') \to N_2(B^3\Pi_g, v'') + hv_{2PG},$$
 (2)

$$N_2(a^{l}\Pi_g, v') \to N_2(X^{l}\Sigma_g^+, v'') + hv_{LBH},$$
 (3)

$$O_2(a^1\Delta_g, v') \to O_2(X^3\Sigma_g^-, v'') + hv_{IRAtm}, \qquad (4)$$

$$O_2(b^{l}\Sigma_g^+, v') \to O_2(X^{3}\Sigma_g^-, v'') + hv_{Atm}$$
(5)

на разных высотах верхней и средней атмосферы во время высыпания высокоэнергичных электронов (ВВЭ) в атмосферу Земли. На основании моделей электронной кинетики триплетных ($A^{3}\Sigma_{u}^{+}$, $B^{3}\Pi_{g}$, $W^{3}\Delta_{u}$, $B^{'3}\Sigma_{u}^{-}$, $C^{3}\Pi_{u}$) и синглетных ($a^{'1}\Sigma_{u}^{-}$, $a^{1}\Pi_{g}$, $w^{1}\Delta_{u}$) состояний молекулярного азота, а также состояний Герцберга ($c^{1}\Sigma_{u}^{-}$, $A^{'3}\Delta_{u}$, $A^{3}\Sigma_{u}^{+}$) и синглетных состояний ($a^{1}\Delta_{g}$, $b^{1}\Sigma_{g}^{+}$) молекулярного кислорода были проведены расчеты профилей интенсивностей полос (1-5) с учетом излучательных и столкновительных процессов. Расчеты проводились в случае ВВЭ со средними энергиями от 10 кэВ (авроральные электроны) до 10 МэВ (релятивистские электроны). При расчетах были использованы профили скоростей ионообразования во время ВВЭ, рассчитанные в работах [Turunen et al., 2009; Artamonov et al., 2017] для моноэнергетических пучков электронов с изотропным питч-угловым распределением.

При вторжении в атмосферу Земли первичных космических лучей (КЛ) протоны составляют около 85% от их общего количества, остальные частицы — это ядра гелия и элементов с Z > 2, а также электроны с позитронами. При прохождении через верхние, разреженные, слои атмосферы превалирующим процессом является ионизация, причем наиболее активными здесь являются частицы с энергией до 1 ГэВ. При достижении высоты 10-30 км над уровнем моря все более вероятными становятся неупругие соударения с ялрами атомов возлуха (в основном, частицы с энергией более 1 ГэВ с азотом и кислородом) [Дорман, 1975; Широков и Юдин, 1980; Simpson, 1983]. В результате ядерных взаимодействий возникают каскады вторичных частиц различного сорта, условно эту реакцию можно выразить через формулу генерации частиц:

nucleon + air
$$\rightarrow$$
 p + n + π^{\pm} + π^{0} + k^{\pm} + k^{0} , (6)

где р — протоны; n — нейтроны; π^{\pm} , π^{0} — пионы; k^{\pm} , k^{0} — каоны.

Взаимодействие элементарных частиц, образованных в процессе (6), с молекулами составляюших средней атмосферы Земли приводит к образованию потоков вторичных электронов. Как показывают исследования взаимодействия высокоэнергичных протонов с молекулами азота и кислорода [Porter et al., 1976], при протонных высыпаниях эффективно протекают процессы диссоциации молекул с образованием атомов азота и кислорода. Образовавшиеся атомы вступают в химические реакции с различными молекулами, приводя к значительным изменениям концентраций малых атмосферных составляющих. Кроме того, неупругие столкновения высокоэнергичных вторичных электронов приводят к ионизации молекул азота и кислорода. Последствием данных процессов диссоциации и ионизации молекул N_2 и O_2 является также образование нечетного азота (NO_x) и водорода (HO_x) , которые способствуют уменьшению содержания озона в средней атмосфере [Turunen et al., 2009; Криволуцкий и Репнев, 2009, 2012].

В настоящей работе рассмотрена кинетика триплетных ($A^{3}\Sigma_{u}^{+}$, $B^{3}\Pi_{g}$, $W^{3}\Delta_{u}$, $B'^{3}\Sigma_{u}^{-}$, $C^{3}\Pi_{u}$) состояний молекулярного азота и синглетных ($a^{1}\Delta_{g}$,

 $b^{1}\Sigma_{g}^{+}$) состояний молекулярного кислорода на высотах средней атмосферы во время события GLE (Ground level enhancement) № 69 от 20 января 2005 г., при котором произошло возрастание скорости счета нейтронных мониторов, возникшее вследствие увеличения числа протонов (в основном с энергией до 10 ГэВ) в потоке первичных КЛ.

2. ПРОЦЕССЫ ГАШЕНИЯ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛЯРНОГО АЗОТА И МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА

Кинетическая модель электронно-возбужденного триплетного молекулярного азота для высот средней атмосферы Земли во время ВВЭ представлена в работах [Kirillov and Belakhovsky, 2019; Кириллов и Белаховский, 2020а]. В настоящих расчетах при вторжении КЛ аналогично рассмотрены процессы возбуждения пяти триплетных состояний N_2 вторичными электронами, образованных в процессах ионизации элементарными частицами, образованными в процессах (6):

$$e + N_2(X^{1}\Sigma_g^{+}, v = 0) \rightarrow$$

$$\rightarrow N_2(A^{3}\Sigma_u^{+}, B^{3}\Pi_g, W^{3}\Delta_u, B^{\prime 3}\Sigma_u^{-}, C^{3}\Pi_u; v^{\prime}) + e.$$
(7)

При этом учтены следующие колебательные уровни указанных пяти состояний: $A^{3}\Sigma_{u}^{+}$ (v' = 0-29), $B^{3}\Pi_{g}(v' = 0-18)$, $W^{3}\Delta_{u}(v' = 0-21)$, $B^{'3}\Sigma_{u}^{-}(v' = 0-15)$, $C^{3}\Pi_{u}(v' = 0-4)$. Таким образом, для состояний $A^{3}\Sigma_{u}^{+}$, $B^{3}\Pi_{g}$, $W^{3}\Delta_{u}$, $C^{3}\Pi_{u}$ учтено более 99% возбуждения в результате процессов (7), а для состояния $B^{'3}\Sigma_{u}^{-}$ – более 93% [Gilmore et al., 1992]. Кроме спонтанных переходов (1) и (2) с излучением 1PG и 2PG полос, также было учтено излучение в полосах Ву-Бенеша (WB) (переход $W^{3}\Delta_{u}$, $v' \leftrightarrow B^{3}\Pi_{g}$,v'') и в полосах инфракрасного послесвечения (IRAG) (переход $B^{'3}\Sigma_{u}^{-}$, $v' \leftrightarrow B^{3}\Pi_{g}$, v''), а также спонтанные переходы $A^{3}\Sigma_{u}^{+}$, $v' \to X^{1}\Sigma_{g}^{+}$, v'' (полосы Вегарда–Каплана) (VK) [Gilmore et al., 1992].

Кинетическая модель электронно-возбужденного синглетного молекулярного кислорода для высот средней атмосферы Земли во время ВВЭ представлена в работе [Kirillov and Belakhovsky, 2021]. В настоящих расчетах интенсивностей полос молекулярного кислорода при высыпании КЛ аналогично [Kirillov and Belakhovsky, 2021] рассмотрены процессы возбуждения двух синглетных состояний О₂ вторичными электронами:

$$e + \mathcal{O}_2(\mathcal{X}^3\Sigma_g^-, v = 0) \rightarrow e + \mathcal{O}_2(\mathfrak{a}^1\Delta_g, \mathfrak{b}^1\Sigma_g^+, v'), \quad (8)$$

а также процесс переноса энергии электронного возбуждения метастабильного молекулярного азота при столкновении с молекулами O_2 и возбуждение состояний Герцберга с¹ Σ_u^- , A'³ Δ_u , A³ Σ_u^+ у молекулярного кислорода

$$N_{2}(A^{3}\Sigma_{u}^{+},v') + O_{2}(X^{3}\Sigma_{g}^{-},v=0) \rightarrow \rightarrow N_{2}(X^{1}\Sigma_{g}^{+},v^{*} \ge 0) + O_{2}(c^{1}\Sigma_{u}^{-},A^{'3}\Delta_{u},A^{3}\Sigma_{u}^{+},v'').$$
(9a)

В дальнейшем в результате излучательных процессов и внутримолекулярных и межмолекулярных переносов энергии при неупругих молекулярных столкновениях энергия электронного возбуждения состояний Герцберга $c^{1}\Sigma_{u}^{-}$, $A'^{3}\Delta_{u}$, $A^{3}\Sigma_{u}^{+}$ трансформируется в энергию возбуждения синглетных состояний $a^{1}\Delta_{g}$ и $b^{1}\Sigma_{g}^{+}$ молекулярного кислорода. Расчет констант скоростей процесса (9а) был проведен в [Kirillov, 2008], а сравнение со всеми имеющимися в мировой научной литературе экспериментальными данными приведено в [Kirillov and Belakhovsky, 2021]. Как показали теоретические расчеты, при исследовании роли межмолекулярных процессов переноса энергии электронного возбуждения (9а) в возбуждении молекул кислорода необходимо учитывать только нулевой колебательный уровень $N_2(A^3\Sigma_u^+, v'=0)$. Для неупругих столкновений молекул $N_2(A^3\Sigma_u^+, v' > 0)$ с О2 доминирующим каналом взаимодействий является процесс диссоциации молекулы О2 и образование двух атомов кислорода [Kirillov, 2008; Kirillov and Belakhovsky, 2021]

$$N_{2}(A^{3}\Sigma_{u}^{+},v') + O_{2}(X^{3}\Sigma_{g}^{-},v=0) \rightarrow$$

$$\rightarrow N_{2}(X^{1}\Sigma_{e}^{+},v^{*} \ge 0) + O + O.$$
(96)

В работах [Kirillov and Belakhovsky, 2019; Кириллов и Белаховский, 2020а] было показано влияние роста плотности в средней атмосфере на рассчитанные колебательные населенности состояния В³П_g. Поэтому В³П_g состояние (аналогично $W^{3}\Delta_{u}$ и $B^{'^{3}}\Sigma_{u}^{-}$) может вносить вклад в возбуждение синглетных состояний $a^{l}\Delta_{g}$ и $b^{l}\Sigma_{g}^{+}$ молекулярного кислорода аналогично $A^{3}\Sigma_{u}^{+}$ состоянию при неупругих молекулярных столкновениях в средней атмосфере. Расчет констант гашения для столкновений $N_2(B^3\Pi_9) + O_2$, $N_2(W^3\Delta_1) + O_2$ и $N_2(B^{'3}\Sigma_{u}) + O_2$ был проведен в [Kirillov, 2011]. В тех расчетах не было получено хорошего согласия с имеющимися экспериментальными данными [Piper, 1992; Umemoto, 2003] для столкновений $N_2(B^3\Pi_g, v=0-12) + O_2$. Однако, как было показано в [Kirillov, 2011], основными продуктами данного взаимодействия является процесс диссоциации молекулы кислорода и образование электронно-возбужденных молекул $N_2(A^3\Sigma_{11}^+)$ и $O_2(a^{l}\Delta_{g}, b^{l}\Sigma_{g}^{+}).$ Кроме того, экспериментальные данные по константам гашения для состояний $W^{3}\Delta_{u}$ и $B'^{3}\Sigma_{u}^{-}$ отсутствуют. Поэтому новые экспериментальные и теоретические исследования особенностей переноса электронного возбуждения при неупругих молекулярных столкновениях необходимы для дальнейших расчетов колебательных населенностей электронно-возбужденных состояний N₂ и O₂ в средней атмосфере Земли.

771

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ СВЕЧЕНИЯ ПОЛОС МОЛЕКУЛЯРНОГО АЗОТА И МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА

В настоящей работе рассмотрено событие GLE, которому сопутствовало увеличение скорости образования пар ионов на высотах от 0 до 80 км. Для расчетов прохождения частиц КЛ через атмосферу Земли используется пакет для разработки программ GEANT4 [Agostinelli et al., 2003], при помощи которого создаются соответствующие модели. В Полярном геофизическом институте был разработан программный пакет RUSCOSMICS, который как более современный инструмент для замены PLANETOCOSMICS [Маурчев и др., 2015, 2019; Маурчев и Балабин, 2016]. Описание методики получения данных спектров первичных КЛ, используемых в моделировании, приводится в работе [Vashenyuk et al., 2011].

Воспользуемся в настоящей работе высотным профилем скоростей ионизации и потоков вторичных электронов для высот 20-80 км для медленной компоненты солнечных КЛ. Для быстрой компоненты солнечных КЛ характерно почти пропорциональное увеличение числа образования пар ионов относительно галактических КЛ. с лишь небольшим смещением максимума профиля по высоте (максимальное увеличение потока на высоте 10–15 км на два порядка). Для медленной компоненты ситуация другая, поскольку большое количество не испытывающих ядерные взаимодействия первичных частиц с низкой энергией вызывает пропорциональный рост ионизации со смещением максимума вверх (увеличение потока на четыре порядка со смещением максимума на высоту 20-25 км).

При расчете объемных интенсивностей свечения полос первой и второй положительных систем молекулярного азота воспользуемся решением систем уравнений [Kirillov and Belakhovsky, 2019; Кириллов и Белаховский, 2020а] для получения концентраций электронно-возбужденных молекул $N_2(B^3\Pi_g, v')$ и $N_2(C^3\Pi_u, v')$:

 γr^a

$$Q^{B}q_{0v'}^{XB} + \sum_{Y,v''} A_{v'v''}^{YB} N_{v''}^{Y} + \sum_{v''} A_{v'v''}^{CB} N_{v''}^{C} +$$

$$+ \sum_{Y,v''} k_{v'v'}^{*YB} N_{v''}^{Y} ([\mathbf{N}_{2}] + [\mathbf{O}_{2}]) + \sum_{Y,v''} k_{v'v''}^{*YB} N_{v''}^{Y} [\mathbf{N}_{2}] +$$

$$+ \sum_{v''} k_{v'v''}^{**BB} N_{v''}^{B} [\mathbf{N}_{2}] + \sum_{v''} k_{v'v''}^{**CB} N_{v''}^{C} [\mathbf{N}_{2}] =$$
(10)
$$= \left\{ \sum_{Y,v''} A_{v'v''}^{BY} + \sum_{Y,v''} k_{v'v''}^{*BB} ([\mathbf{N}_{2}] + [\mathbf{O}_{2}]) +$$

$$+ \sum_{Y,v''} k_{v'v''}^{**BY} [\mathbf{N}_{2}] + \sum_{v''} k_{v'v''}^{**BB} [\mathbf{N}_{2}] + k_{v'v'}^{*BB} [\mathbf{N}_{2}] + k_{v'v''}^{*BB} [\mathbf{N}_{2}] \right\} N_{v''}^{B},$$

$$Q^{C}q_{0v'}^{XC} + \sum_{v''>v'} k^{**CC}_{v''v} N_{v''}^{C}[N_{2}] = \\ = \left\{ \sum_{v''} A_{v'v''}^{CB} + \sum_{Y,v''} k^{**CY}_{v'v''}[N_{2}] + \\ + \sum_{v''} k^{**CB}_{v'v''}[N_{2}] + \sum_{v''
(11)$$

где *Y*обозначают состояния $A^3 \Sigma_u^+$, $W^3 \Delta_u$, $B'^3 \Sigma_u^-$; Q^B , Q^{C} – скорости возбуждения В³П₂, С³П₁ состояний, соответственно; $q_{0v'}^{XB}$ и $q_{0v'}^{XC}$ – факторы Франка—Кондона для переходов $X^{1}\Sigma_{g}^{+}$, $v = 0 \rightarrow B^{3}\Pi_{g}$, v'и $X^{1}\Sigma_{g}^{+}$, $v = 0 \rightarrow C^{3}\Pi_{u}, v'$ [Gilmore et al., 1992]; A = 0коэффициенты Эйнштейна для всех упомянутых ранее спонтанных переходов: k^* и k^{**} подразумевают константы скоростей внутримолекулярных и межмолекулярных процессов переноса энергии, соответственно. Для расчета скоростей возбуждения электронно-возбужденных состояний молекулярного азота вторичными электронами воспользуемся спектром вторичных электронов и набором данных поперечных сечений для молекул N₂ и O₂ [Itikawa, 2006, 2009]. Кроме того, при расчете концентраций N₂(C³П_и, v') учтем гашение данного состояния [Kirillov, 2019], поскольку на нижних высотах рассматриваемого диапазона столкновительные времена жизни состояния С³П_и становятся порядка излучательных времен или меньше.

При расчете объемных интенсивностей полос Инфракрасной Атмосферной и Атмосферной систем молекулярного кислорода воспользуемся решением систем уравнений [Kirillov and Belakhovsky, 2021] для получения концентраций электронновозбужденных молекул $O_2(a^{1}\Delta_g, v')$ и $O_2(b^{1}\Sigma_g^+, v')$:

$$\frac{\partial N_{v'}}{\partial t} = Q^{a}q_{0v'}^{Xa} + \sum_{Y=b,A';v''} A_{v'v'}^{Ya} N_{v''}^{A'} + \\
+ \sum_{Y=b,c,A',A;v''} k_{v'v''}^{*Ya} N_{v''}^{Y} ([N_{2}] + [O_{2}]) + \\
+ \sum_{Y=a,b,c,A',A;v''} k_{v'v''}^{**Ya} N_{v''}^{Y} [O_{2}] - \left\{ \sum_{v''} A_{v'v''}^{aX} + \right. \\
\left. + \sum_{Y''} k_{v'v''}^{*aX} ([N_{2}] + [O_{2}]) + \sum_{v''} k_{v'v''}^{**aa} [O_{2}] \right\} N_{v'}^{a}, \\
Q^{b}q_{0v'}^{Xb} + \sum_{Y=c,A',A;v''} k_{v'v''}^{*Yb} N_{v''}^{Y} ([N_{2}] + [O_{2}]) + \\
+ \left. + \sum_{Y''} k_{v'v''}^{*aX} ([N_{2}] + [O_{2}]) + \sum_{V'''} k_{v'v''}^{**aa} [O_{2}] \right\} N_{v'}^{a}, \\
Q^{b}q_{0v'}^{Xb} + \sum_{Y=c,A',A;v''} k_{v'v''}^{*Yb} N_{v''}^{Y} ([N_{2}] + [O_{2}]) + \\
+ \left. + \sum_{Y=b,c,A',A;v''} k_{v'v''}^{*Yb} N_{v''}^{Y} [O_{2}] \right] = \\
= \left\{ \sum_{Y''} A_{v'v''}^{bX} + \sum_{V''} A_{v'v''}^{ba} + \\
+ \sum_{Y=X,a;v''} k_{v'v''}^{*bY} ([N_{2}] + [O_{2}]) + \sum_{Y=a,b;v''} k_{v'v''}^{**bY} [O_{2}] \right\} N_{v'}^{b}, \\$$
(12)

где Q^a и Q^b скорости возбуждения $a^1\Delta_g$ и $b^1\Sigma_g^+$ состояний, соответственно; $q_{0v'}^{Xa}$ и $q_{0v'}^{Xb}$ – факторы Франка–Кондона для переходов $X^3\Sigma_g^-$, $v = 0 \rightarrow$ $\rightarrow a^1\Delta_g$, v' и $X^3\Sigma_g^-$, $v = 0 \rightarrow b^1\Sigma_g^+$, v' [Krupenie, 1972]; A – коэффициенты Эйнштейна для Инфракрасной Атмосферной, Ноксона ($b^1\Sigma_g^+ \rightarrow a^1\Delta_g$) и Атмосферной систем полос [Шефов и др., 2006], для полос Чемберлена ($A'^3\Delta_u \rightarrow a^1\Delta_g$) [Bates, 1989]; k^* и k^{**} подразумевают константы скоростей внутримолекулярных и межмолекулярных процессов переноса энергии с участием электронно-возбужденной молекулы кислорода, соответственно. При этом основной вклад в гашение $O_2(a^1\Delta_g, v' > 0)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+, v' > 0)$ вносят межмолекулярные процессы переноса энергии [Кириллов, 2012]

$$O_{2}(a^{1}\Delta_{g}, v') + O_{2}(X^{3}\Sigma_{g}^{-}, v = 0) \rightarrow$$

$$\rightarrow O_{2}(X^{3}\Sigma_{g}^{-}, v^{*} \ge 0) + O_{2}(a^{1}\Delta_{g}, v'' = 0, 1),$$
(14)

$$O_{2}(b^{1}\Sigma_{g}^{+},v') + O_{2}(X^{3}\Sigma_{g}^{-},v=0) \rightarrow$$

$$\rightarrow O_{2}(X^{3}\Sigma_{g}^{-},v^{*} \geq 0) + O_{2}(a^{1}\Delta_{g},b^{1}\Sigma_{g}^{+};v''=0,1),$$
(15)

а для $O_2(a^1\Delta_g, v'=0)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+, v'=0)$ основными механизмами гашения являются

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

→ продукты взаимодействия (16)

с $k_{16} = 1.7 \times 10^{-18} \text{ см}^3 \text{ c}^{-1}$ согласно [Burkholder et al., 2015],

$$O_{2}(b^{1}\Sigma_{g}^{+}, v' = 0) + N_{2}(X^{1}\Sigma_{g}^{+}, v = 0) \rightarrow$$

$$\rightarrow O_{2}(a^{1}\Delta_{g}, v'' = 2) + N_{2}(X^{1}\Sigma_{g}^{+}, v = 1),$$
(17)

ГЕОМАГНЕТИЗМ И АЭРОНОМИЯ том 61 № 6 2021



Рис. 1. Профили рассчитанных скоростей ионообразования и скоростей объемной интенсивности полосы 337 нм молекулярного азота.

с $k_{17} = 2 \times 10^{-15}$ см³ с⁻¹ согласно [Dunlea et al., 2005; Kirillov, 2013; Burkholder et al., 2015].

На рисунке 1 показаны профили рассчитанных скоростей ионообразования и скоростей объемной интенсивности полосы 337 нм второй положительной системы N₂, связанной со спонтанными излучательными переходами (2) с $v' = 0 \rightarrow$ $\rightarrow v'' = 0$. Как видно из рис. 1, профиль объемной интенсивности полосы 337 нм во многом повторяет профиль скорости ионообразования. Лишь на нижних высотах рассмотренного интервала высот начинается сказываться гашение состояния C³П_и [Kirillov, 2019]. Интегральная интенсивность полосы 337 нм согласно расчетам $I_{337} \sim 9$ кР (1 Рэлей = 10⁶ фотон/см² с).

На рисунке 2 показаны профили рассчитанных скоростей объемных интенсивностей полос 749 и 669 нм первой положительной системы, обусловленных спонтанными излучательными переходами (1) с $v' = 4 \rightarrow v'' = 2$ и $v' = 5 \rightarrow v'' = 2$, соответственно. Как видно из рис. 2, процессы гашения состояния В³П_g достаточно эффективны на высотах средней атмосферы Земли. Поэтому рассчитанные интегральные интенсивности полос 749 и 669 нм составляют $I_{749} \sim 290$ Р и $I_{669} \sim 130$ Р, а отношения к интенсивности полосы 337 нм второй положительной системы $I_{749}/I_{337} \sim 3.2 \times 10^{-2}$ и $I_{669}/I_{337} \sim 1.4 \times 10^{-2}$. Эти значения намного меньше соответствующих величин 1.6 и 0.7, рассчитанных в [Кириллов и Белаховский, 2020а] для высыпаний авроральных электронов и полученных с помощью результатов измерений оптических спектров полярных сияний во время запусков ракет на острове Хейса в 1972—1973 гг. [Кириллов и др., 1987].

На рисунке 3 приведены профили рассчитанных скоростей объемных интенсивностей полос 762 и 1270 нм молекулярного кислорода, связанных со спонтанными излучательными переходами (5) и (4) с $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$, соответственно. При этом для полосы 1270 нм расчеты приведены для времен t = 1, 3, 10 и 30 минут после начала высыпания высокоэнергичных протонов. Поскольку излучательное время жизни состояния a¹A_o больше часа, а константа скорости гашения процесса (16) принимает очень маленькие значения, для высот выше ~40 км наблюдается рост $O_2(a^1\Delta_{\alpha}, v=0)$ на протяжении десятков минут высыпания КЛ. Рассчитанная интегральная интенсивность полосы Инфракрасной Атмосферной системы І₁₂₇₀ варьируется от ~1 кР при t = 1 минута до ~2 кР при t = 30 минут. Что касается полосы 762 нм, то из профиля ее светимости видно, что на всем рассмотренном интервале высот эффективно гашение $O_2(b^1\Sigma_{\sigma}^+, v=0)$. Поэтому рассчитанная интегральная интенсивность данной полосы составляет *I*₇₆₂ ~ 60 Р.



Рис. 2. Профили рассчитанных скоростей объемной интенсивности полос 749 и 669 нм молекулярного азота.



Рис. 3. Профили рассчитанных скоростей объемной интенсивности полос 762 и 1270 нм молекулярного кислорода.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании моделей электронной кинетики триплетных состояний молекулярного азота и синглетных состояний молекулярного кислорода для средней атмосферы Земли, представленных в работах [Кириллов и Белаховский, 2020a; Kirillov and Belakhovsky, 2019, 2021], проведен расчет профилей интенсивностей полос первой и второй положительных систем N_2 , Инфракрасной Атмосферной и Атмосферной систем O_2 в случае высыпания в атмосферу Земли высокоэнергичных протонов во время события GLE (Ground level enhancement) № 69 от 20 января 2005 г.

Расчеты показали, что практически на всем рассматриваемом интервале высот 20-80 км имеется значительный вклад процессов гашения состояния $B^{3}\Pi_{g}$ при молекулярных столкновениях. Это приводит к существенному уменьшению отношения интегральных интенсивностей I_{749}/I_{337} и I_{669}/I_{337} по сравнению с авроральными высыпаниями электронов [Кириллов и др., 1987; Кириллов и Белаховский, 2020а]. Кроме того, кинетика синглетных состояний O_{2} на высотах средней атмосферы во время высыпания протонов рассмотрены как с учетом прямого возбуждения высокоэнергичными частицами, так и с учетом межмолекулярных процессов переноса электронного возбуждения. Показано, что процессы гашения состояния $b^{1}\Sigma_{g}^{+}$ во время неупругих молекулярных столкновений приводят к значительному понижению интенсивностей полос Атмосферной системы на высотах средней атмосферы.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-77-10018).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

 Дорман Л.И. Экспериментальные и теоретические основы астрофизики космических лучей. М.: Наука. 462 с. 1975.

- Кириллов А.С. Расчет констант скоростей взаимодействия синглетного и триплетного колебательно-возбужденного молекулярного кислорода // Квантовая электроника. Т. 42. № 7. С. 653–658. 2012.

- Кириллов А.С., Белаховский В.Б. Свечение полос молекулярного азота в атмосфере Земли во время высыпания высокоэнергичных электронов // Геомагнетизм и аэрономия. Т. 60. № 1. С. 93–98. 2020а.

- Кириллов А.С., Белаховский В.Б. Свечение полос Лаймана-Бирджа-Хопфилда N₂ в атмосфере Земли во время высыпания высокоэнергичных электронов // Геомагнетизм и аэрономия. Т. 60. № 6. С. 796-802. 20206.

- Кириллов А.С., Ягодкина О.И., Иванов В.Е., Воробьев В.Г. Механизмы возбуждения 1РG системы N₂ в полярных сияниях // Геомагнетизм и аэрономия. Т. 27. № 3. С. 419-427. 1987.

- Криволуцкий А.А., Репнев А.И. Воздействие космических факторов на озоносферу Земли. М.: ГЕОС. 382 с. 2009.

– *Криволуцкий А.А., Репнев А.И.* Воздействие космических энергичных частиц на атмосферу Земли // Геомагнетизм и аэрономия. Т. 52. № 6. С. 723–754. 2012.

– Маурчев Е.А., Балабин Ю.В., Гвоздевский Б.Б., Вашенюк Э.В. Новая численная модель для исследования космических лучей в атмосфере Земли // Изв. РАН. Сер. физич. Т. 79. № 5. С. 711–713. 2015.

– Маурчев Е.А., Балабин Ю.В. Модельный комплекс для исследования космических лучей RUSCOSMICS // Солнечно-земная физика. Т. 2. № 4. С. 3–8. 2016.

– Маурчев Е.А., Михалко Е.А., Германенко А.В., Балабин Ю.В., Гвоздевский Б.Б. / Программный комплекс RUSCOSMICS как инструмент для оценки скорости ионизации вещества атмосферы Земли протонами космических лучей // Изв. РАН. Сер. физич. Т. 83. № 5. С. 712–716. 2019.

— Шефов Н.Н., Семенов А.И., Хомич В.Ю. Излучение верхней атмосферы — индикатор ее структуры и динамики. М.: ГЕОС, 740 с. 2006.

— Широков Ю.М., Юдин Н.П. Ядерная физика. Уч. пос. М.: Наука. 729 с. 1980.

Agostinelli S., Allisonas J., Amako K. et al. Geant4 – a simulation toolkit // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 2003.
 V. 506. Sect. A. P. 250–303. 2003.

 Artamonov A.A., Mishev A.L., Usoskin I.G. Atmospheric ionization induced by precipitating electrons: Comparison of CRAC: EPII model with a parametrization model // J. Atmos. Sol. Terr. Phys. V. 149. P. 161–166. 2016.

- Bates D.R. Oxygen band system transition arrays // Planet. Space Sci. V.37. № 7. P. 881–887. 1989.

- Burkholder J.B., Sander S.P., Abbatt J., Barker J.R., Huie R.E., Kolb C.E., Kurylo M.J., Orkin V.L., Wilmouth D.M., Wine P.H. Chemical kinetics and photochemical data for use in atmospheric studies, Evaluation No. 18, Jet Propulsion Laboratory Publication 15–10, Jet Propulsion Laboratory, Pasadena. 1392 pages. 2015.

- 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. A. V. 109. No 17. P. 3912–3920. 2005.

- Gilmore F.R., Laher R.R., Espy P.J. Franck-Condon factors, r-centroids, electronic transition moments, and Einstein coefficients for many nitrogen and oxygen band systems // J. Phys. Chem. Ref. Data. V. 21. \mathbb{N} 5. P. 1005–1107. 1992.

– *Itikawa Y.* Cross sections for electron collisions with nitrogen molecules // J. Phys. Chem. Ref. Data. V. 35. № 1. P. 31–53. 2006.

- *Itikawa Y*. Cross sections for electron collisions with oxygen molecules // J. Phys. Chem. Ref. Data. V. 38. № 1. P. 1–20. 2009.

- *Kirillov A.S.* The study of intermolecular energy transfers in electronic energy quenching for molecular collisions N_2-N_2 , N_2-O_2 , O_2-O_2 // Ann. Geophys. V. 26. No 5. P. 1149–1157. 2008.

- *Kirillov A.S.* Excitation and quenching of ultraviolet nitrogen bands in the mixture of N_2 and O_2 molecules // J. Quan. Spec. Rad. Tran. V. 112. No 13. P. 2164-2174. 2011.

- *Kirillov A.S.* The calculations of quenching rate coeffi-

cients 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.* Intermolecular electron energy transfer processes in the quenching of $N_2(C^3\Pi_u, v = 0.4)$ by collisions with N_2 molecules // Chem. Phys. Lett. V. 715. P. 263–267. 2019.

- *Kirillov A.S., Belakhovsky V.B.* The kinetics of N_2 triplet electronic states in the upper and middle atmosphere during relativistic electron precipitations // Geophys. Res. Lett. V. 46. Nº 13. P. 7734-7743. 2019.

- 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. 126. № 5. e2020JD033177. 2021. https://doi.org/10.1029/2020JD033177 - *Krupenie P.H.* The spectrum of molecular oxygen // J. Phys. Chem. Ref. Data. V. 1. No 2. P. 423–534. 1972.

– *Piper L.G.* Energy transfer studies on N₂($X^{1}\Sigma_{g}^{+}$, v) and N₂($B^{3}\Pi_{o}$) // J. Chem. Phys. V. 97. № 1. P. 270–275. 1992.

– Porter H.S., Jackman C.H., Green A.E.S. Efficiencies for production of atomic nitrogen and oxygen by relativistic proton impact in air // J. Chem. Phys. V. 65. № 1. P. 154–167. 1976.

- Simpson J.A. Introduction to the galactic cosmic radiation. In: Shapiro M.M. (eds) Composition and origin of cosmic rays. 1983, NATO ASI Series (Series C: Mathematical and Physical Sciences). V. 107. P. 1–24. Springer, Dordrecht. − Turunen E., Verronen P.T., Seppälä A., Rodger C.J., Clilverd M.A., Tamminen J., Enell C.-F., Ulich T. Impact of different energies of precipitating particles on NO_x generation in the middle and upper atmosphere during geomagnetic storms // J. Atmos. Sol. Terr. Phys. V. 71. № 10–11. P. 1176–1189. 2009.

– Umemoto H. Selective production and kinetic analysis of thermally equilibrated $N_2(B^3\Pi_g, v=0)$ and $N_2(W^3\Delta_u, v=0) //$ Phys. Chem. Chem. Phys. V. 5. No 24. P. 5392–5398. 2003.

- Vashenyuk E.V., Balabin Yu.V., Gvozdevsky B.B. Features of relativistic solar proton spectra derived from ground level enhancement events (GLE) modeling // Astrophysics and Space Sciences Transactions. V. 7. N° 4. P. 459–463. 2011.