

Исследование кинетики электронно-возбужденного молекулярного азота в атмосферах планет Солнечной системы

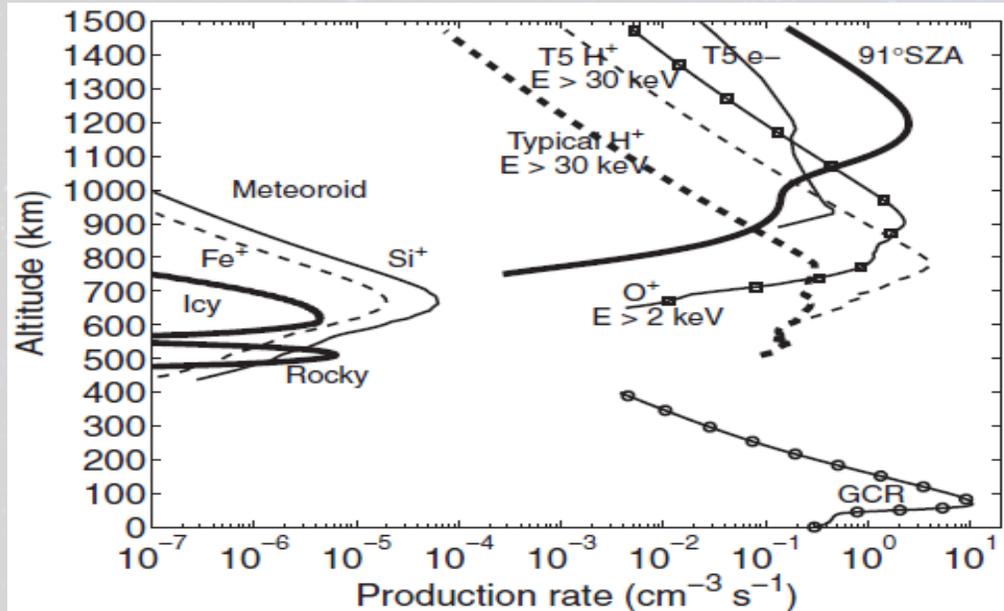
Кириллов А.С.

Полярный геофизический институт, Апатиты

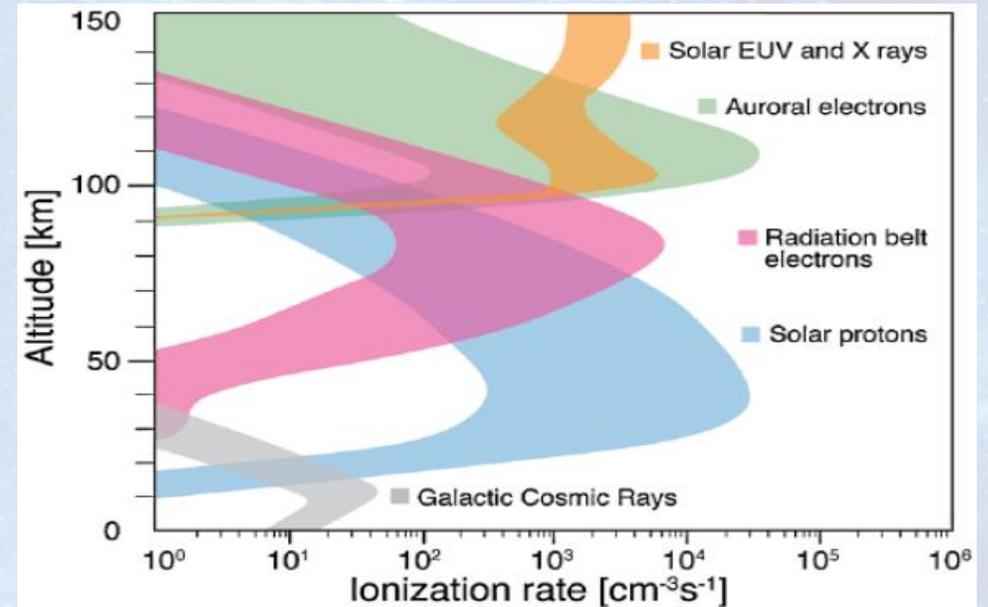


Скорости ионообразования в атмосферах Титана и Земли

Galand et al., 2014, Titan: Interior, Surface, Atmosphere and Space Environment, Chap.11,
Baker et al., 2012, EOS, v.93, p.325-326



XUV solar radiation with a SZA of 91° (thick, solid line);
magnetospheric electrons (thin, solid line);
magnetospheric protons (dashed lines);
magnetospheric oxygen ions (squares);
galactic cosmic rays (circles).



Внешний радиационный пояс Земли – источник
высыпающихся релятивистских электронов.
Магнитосферные электроны с энергией в десятки
кэВ ускоряются до релятивистских энергий (> 1
МэВ) во внешнем радиационном поясе Земли в
течение десятков часов.

Свечение окиси углерода в атмосфере Титана

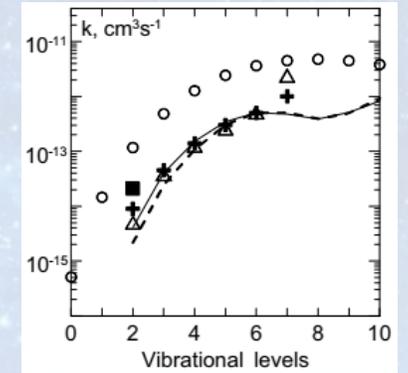
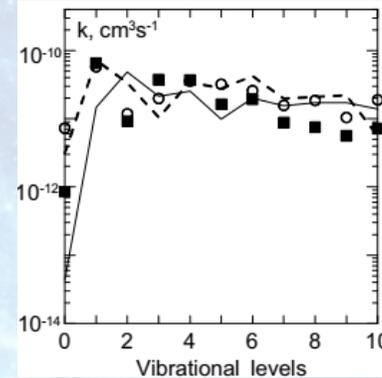
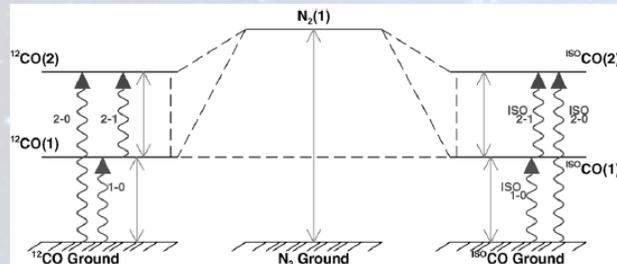


Lellouch et al., 2003, *Icarus*, 162, p.125.
 Lopez-Valverde et al., 2005, *Icarus*, 175, p.503.

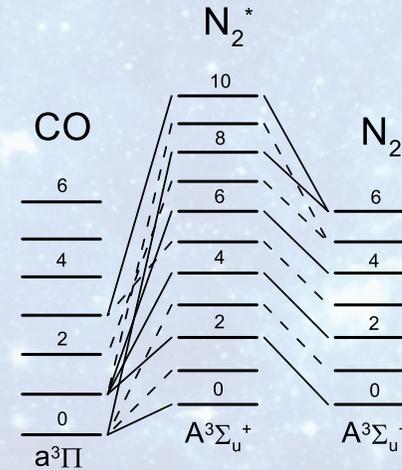
Зарегистрированы ИК эмиссии окиси углерода в атмосфере Титана в среднем инфракрасном диапазоне с помощью спектрометра ISAAC на Very Large Telescope (Чили), охватывающим диапазон 4.50–4.85 мкм. Обнаружено около 45 линий излучения, совпадающих с вращательно-колебательными линиями CO, включая CO(1–0) (P18–R11) и CO(2–1) (P11–R11).

Non-LTE Model была использована для анализа колебательной кинетики $^{12}\text{CO}(1)$, $^{12}\text{CO}(2)$, $\text{N}_2(1)$, $^{13}\text{CO}(1)$, $^{13}\text{CO}(2)$. В модель включено прямое поглощение солнечного излучения на длине волны 4.7 мкм в основной полосе (1–0) и в первой полосе (2–1) обоих изотопов CO, а также в переходах (2–0) на длине волны 2.3 мкм.

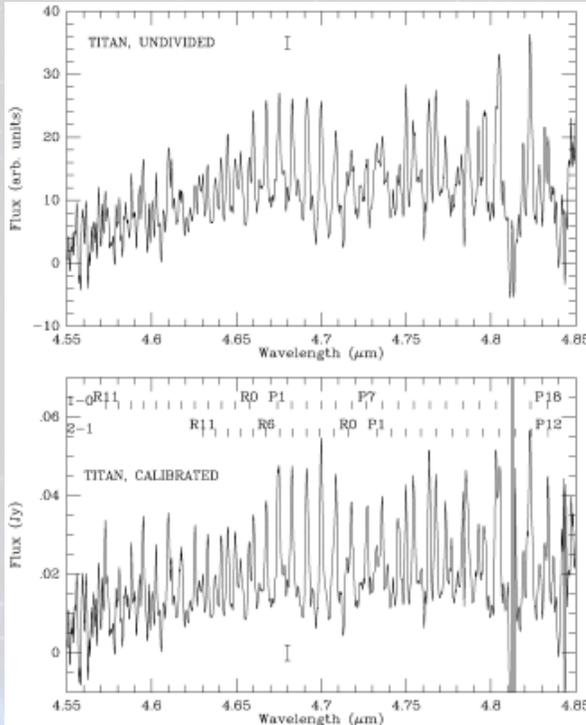
Non-LTE Model обеспечивает разумное согласие по эмиссии (1–0), но не согласуется по эмиссии (2–1), то есть занижает результаты в ~2 раза.



Рассчитанные константы гашения
 $\text{N}_2(\text{A}, v=0-10) + \text{CO}(\text{X}, v=0) \rightarrow \text{N}_2(\text{X}, v \geq 0) + \text{CO}(\text{a}, v')$
 $\text{N}_2(\text{A}, v=0-10) + \text{N}_2(\text{X}, v=0) \rightarrow \text{N}_2(\text{X}, v \geq 0) + \text{N}_2(\text{A}, v' < v)$
 Kirillov [*Chem. Phys. Lett.*, 2016, 643, p.131]
 с помощью Rosen-Zener приближения.

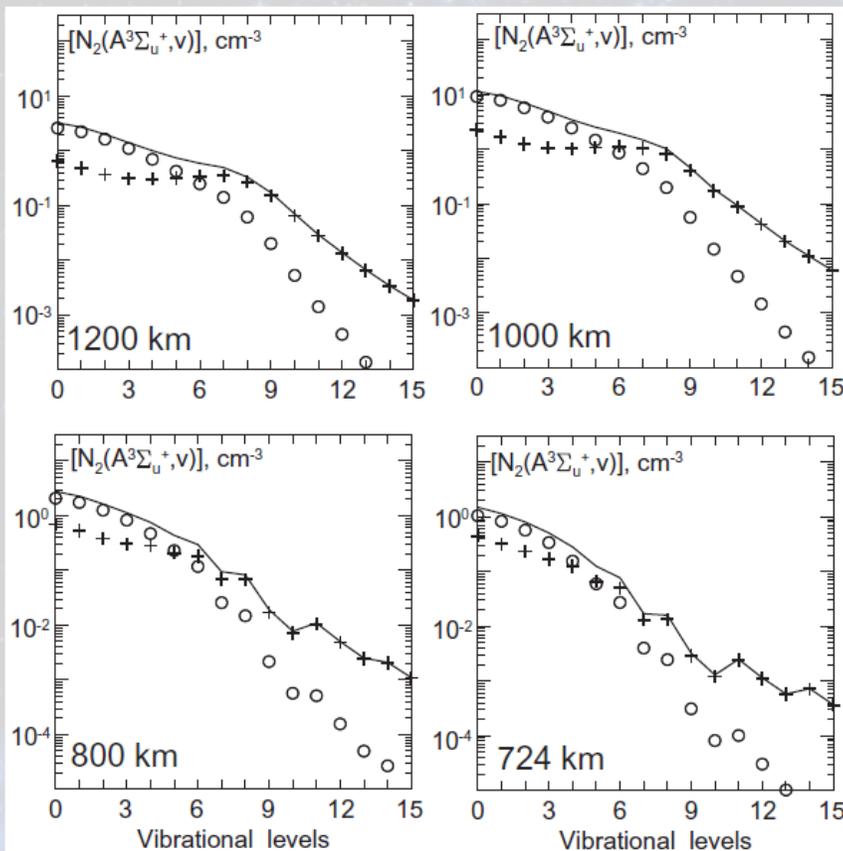


REVIEWER #1:
 The case is not made for $\text{N}_2(\text{A})$ -CO collisions to be important in planetary studies.
 The author could consider whether the paper "Carbon monoxide fluorescence from Titan's atmosphere", M.A. López-Valverde et al., 2005, *ICARUS*, 175, p.503 is appropriate for this.

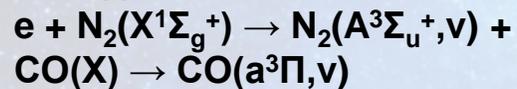


Рассчитанные колебательные населенности $N_2(A^3\Sigma_u^+, v)$ и $CO(a^3\Pi, v)$ на высотах верхней атмосферы Титана

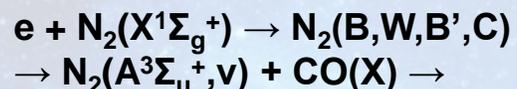
Kirillov et al., 2017, Chem. Phys. Lett., v.685, p.95



Вклад



(крестики)



(кружки)

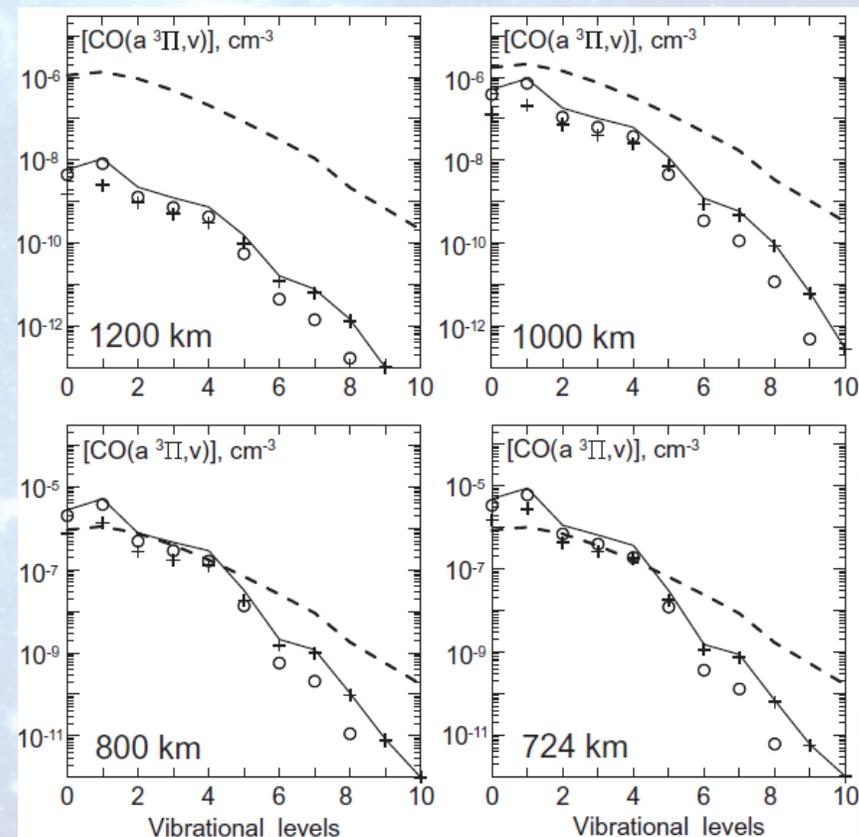
Сумма процессов –

сплошные линии

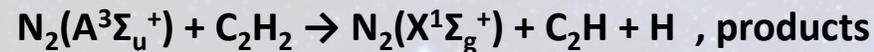
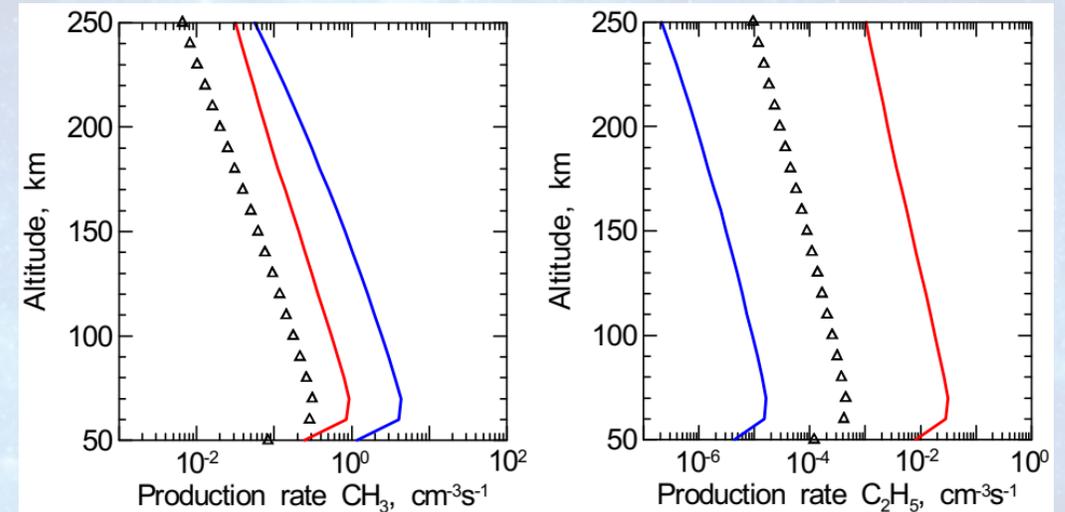
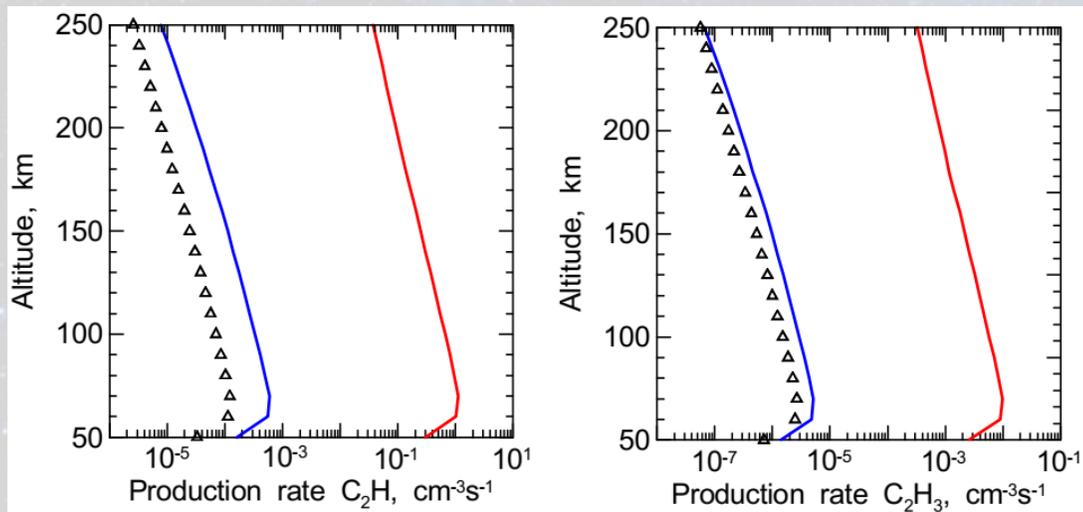
Вклад



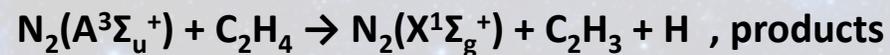
пунктирные линии



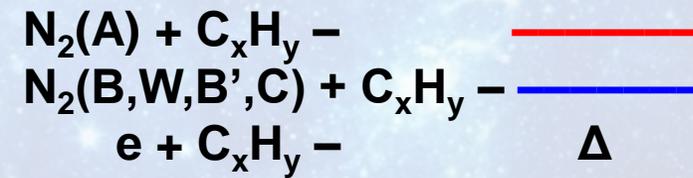
Рассчитанные скорости образования радикалов C_2H , C_2H_3 , CH_3 , C_2H_5 на высотах 50-250 км при столкновениях $N_2(A)$ и $N_2(B,W,B',C)$ с молекулами C_2H_2 , C_2H_4 , CH_4 , C_2H_6



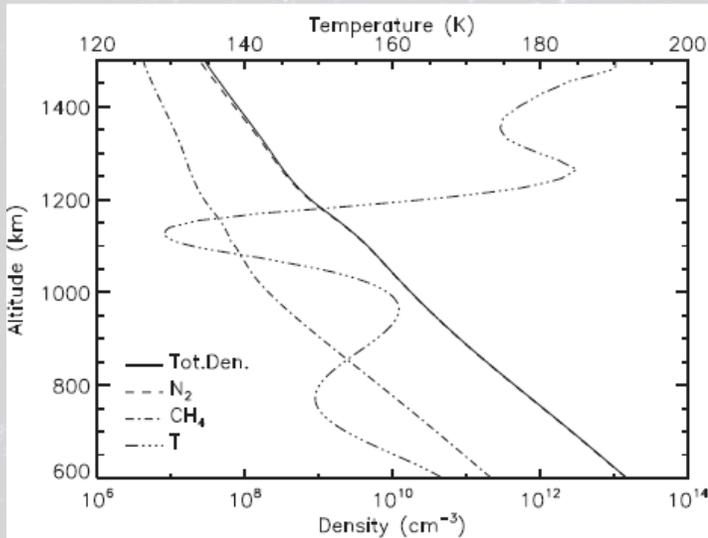
$k=1.4 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$, Umemoto (2007), Dutuit et al. (2013)



$k=0.97 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$, Umemoto (2007), Dutuit et al. (2013)

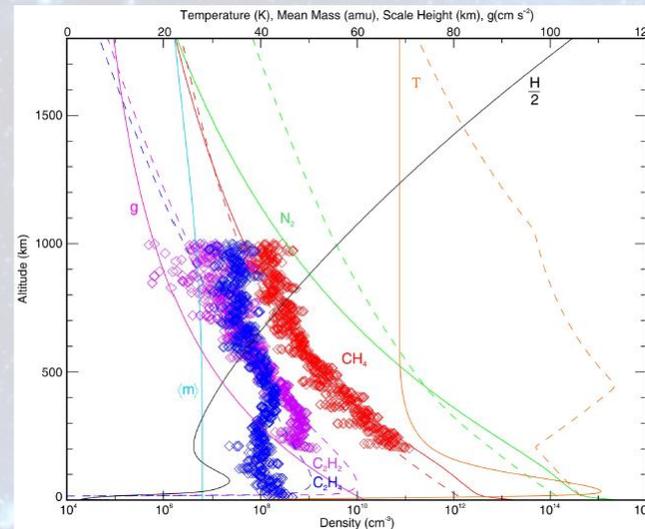


Профили N_2 , CH_4 , CO концентраций в верхних атмосферах Титана, Плутона, Тритона



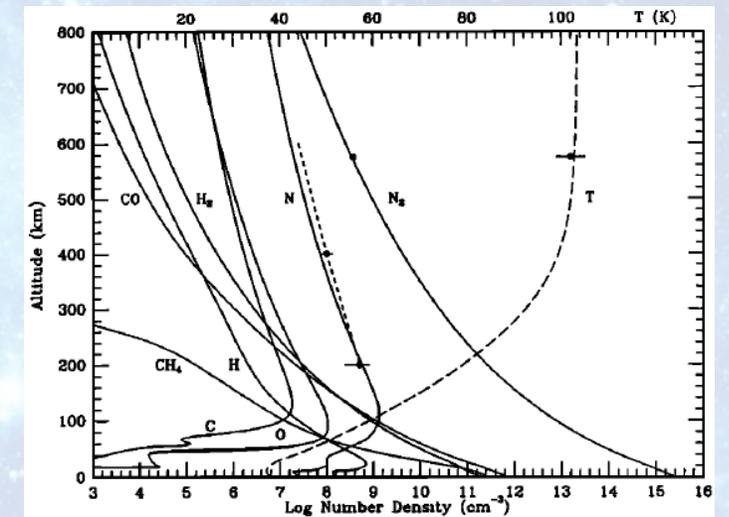
Профили N_2 и CH_4 концентраций согласно [Lavvas et al., 2015, ICARUS, v.260, p.29].

$[CO]=5 \cdot 10^{-5} \cdot ([N_2]+[CH_4])$ согласно [Fabiano et al., 2017, ICARUS, v.293, p.119]



Профили N_2 и CH_4 концентраций согласно [Gladstone et al., 2016, SCIENCE, v.351, aad8866].

$[CO]=5 \cdot 10^{-4} \cdot ([N_2]+[CH_4])$ согласно [Lellouch et al., 2017, ICARUS, v.286, p.289].

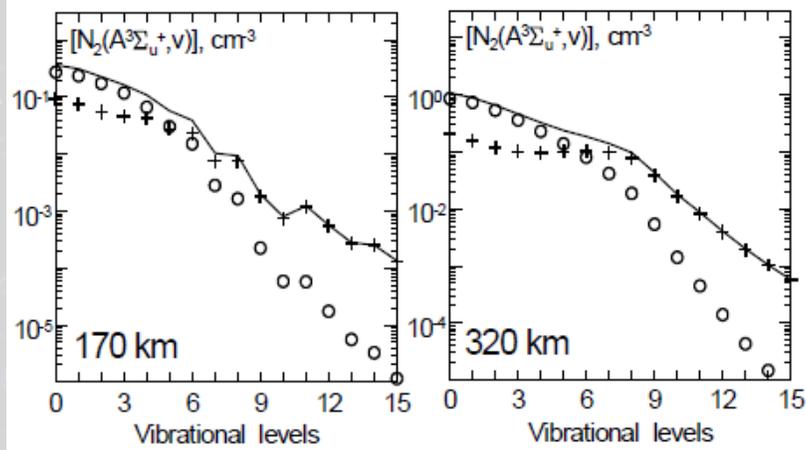


Профили N_2 и CH_4 концентраций согласно [Krasnopolsky and Cruikshank, 1995, J. Geophys. Res. - E, v.100, p.21271].

$[CO]=6 \cdot 10^{-4} \cdot ([N_2]+[CH_4])$ согласно [Strobel and Zhu, 2017, ICARUS, v.291, p.55].

Рассчитанные колебательные населенности $N_2(A^3\Sigma_u^+, v)$ и $CO(a^3\Pi, v)$ на высотах верхних атмосфер Тритона и Плутона

Кириллов, 2020, Астрон. Вестник, т.54, с.33

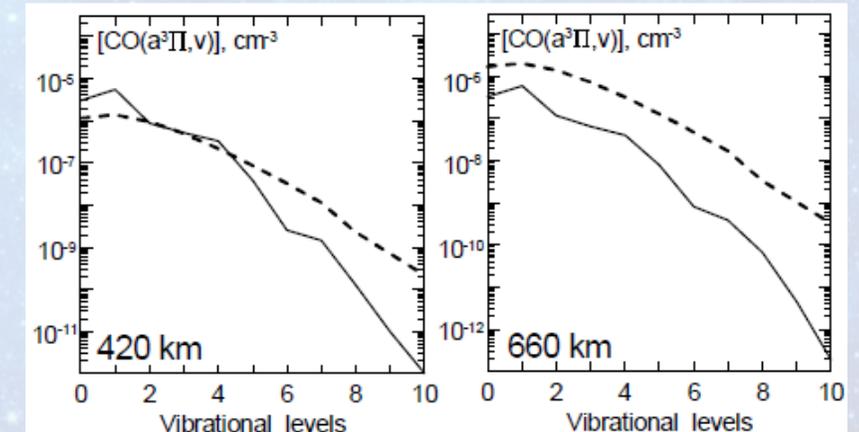
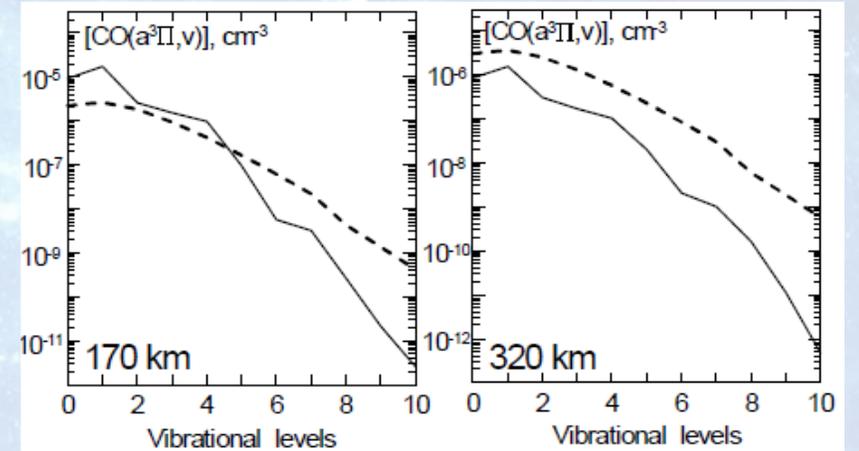
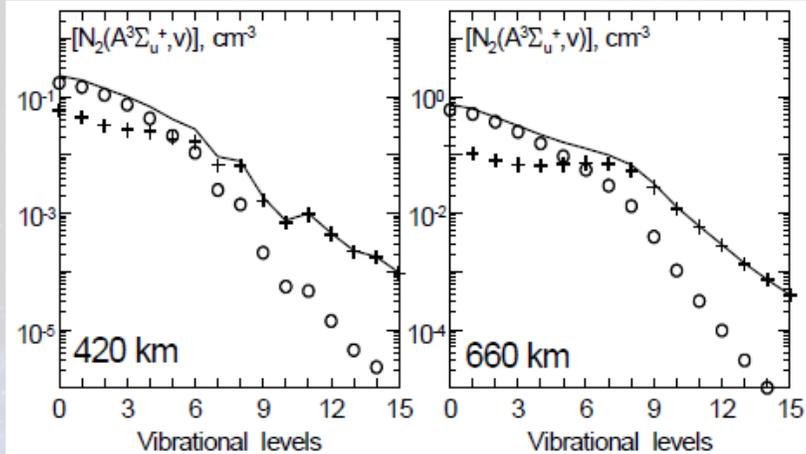


Вклад
 $e + N_2(X^1\Sigma_g^+) \rightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+, v) + CO(X) \rightarrow CO(a^3\Pi, v)$
 (крестики)

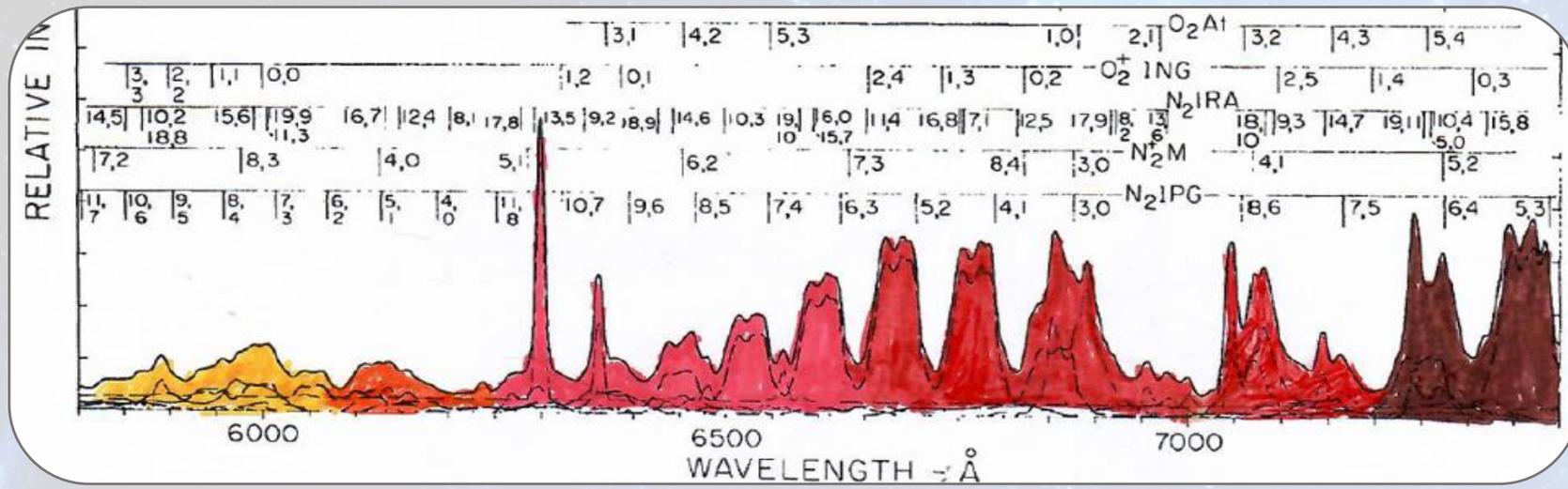
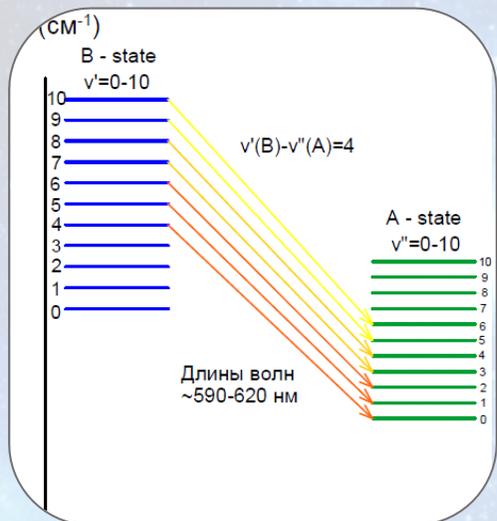
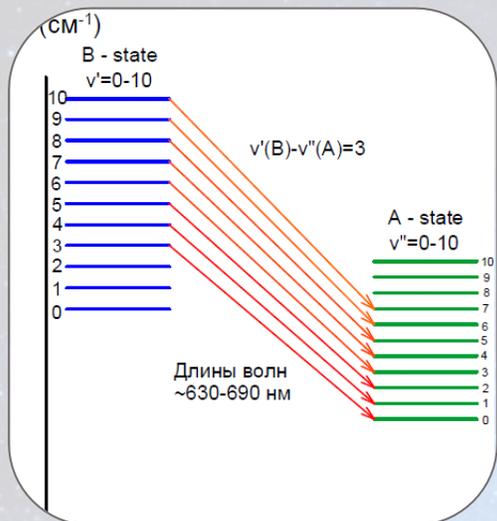
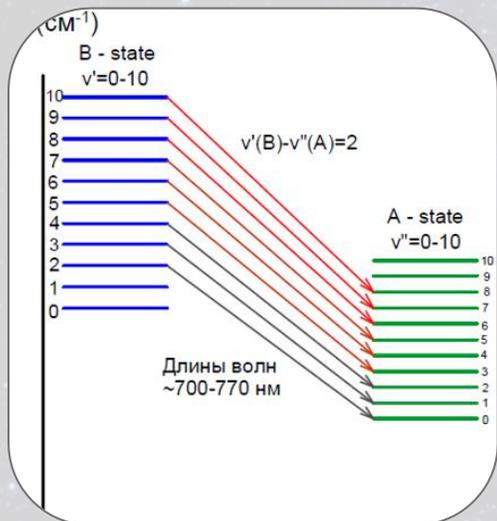
Вклад
 $e + N_2(X^1\Sigma_g^+) \rightarrow N_2(B, W, B', C) \rightarrow N_2(A^3\Sigma_u^+, v) + CO(X) \rightarrow CO(a^3\Pi, v)$
 (кружки)

Сумма процессов –
 сплошные линии

Вклад
 $e + CO(X^1\Sigma^+) \rightarrow CO(a^3\Pi, v)$ –
 пунктирные линии

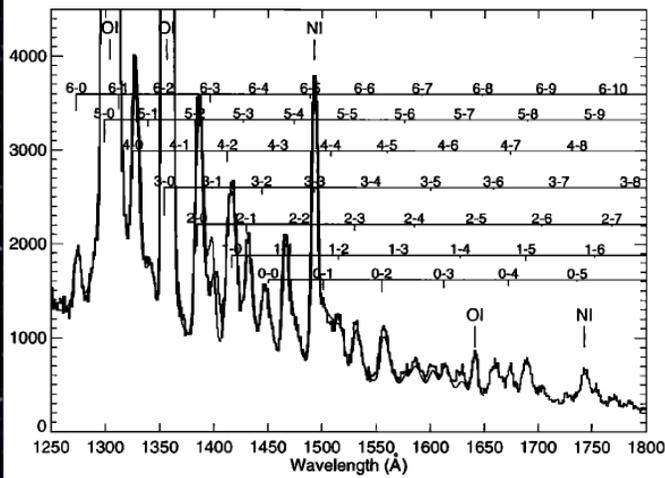


Переходы между состояниями В и А с излучением красных и инфракрасных полос молекулярного азота

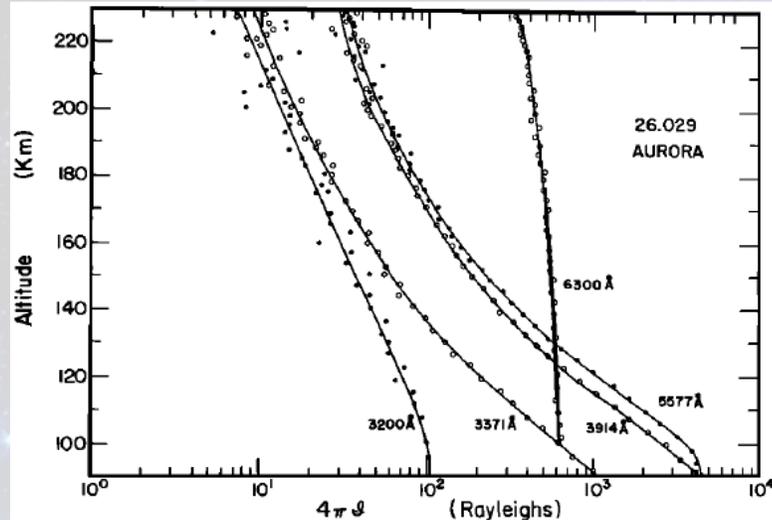
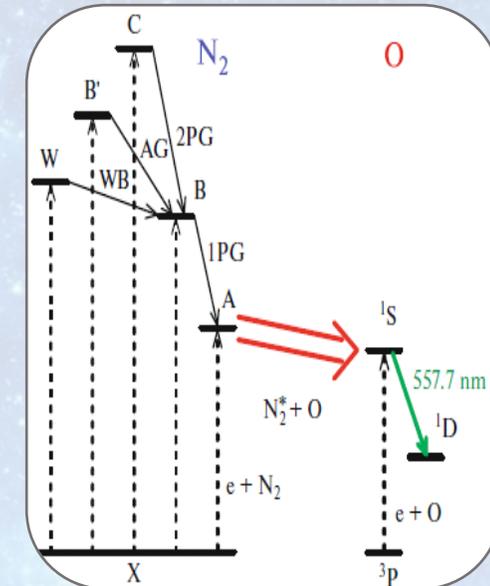
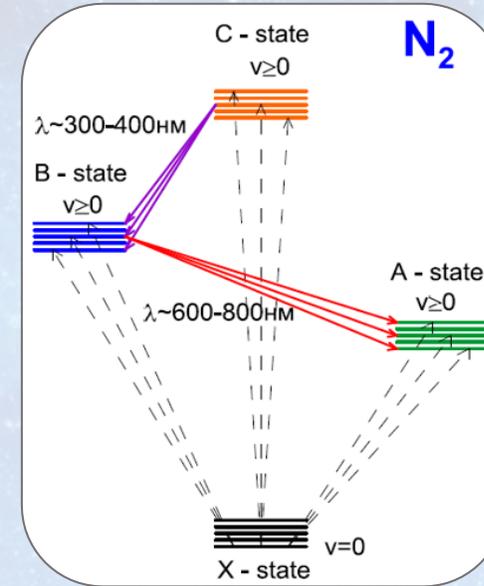


Переходы с $\Delta v = v'(B) - v''(A) = 2, 3, 4$.
 Экспериментальные данные свечения полос первой положительной системы N_2 согласно Vallance Jones, Aurora, 1974.

Вклад метестабильного N₂ в свечение зеленой линии O



УФ спектры N₂ в дневном свечении атмосферы Земли (Discovery, STS-39) [Budzien et al., 1994, J. Geophys. Res. - A, v.99, p.23275]



Sharp et al., 1979, J. Geophys. Res., 84, p.1977

McDade and Llewellyn [1984, Planet. Space Sci., 32, p.1195] показали, что для объяснения наблюдаемых интенсивностей свечения линии 557.7 нм в ракетном эксперименте [Sharp et al., 1979] достаточно учесть только $v=0$ $N_2(A^3\Sigma_u^+, v=0) + O(^3P) \rightarrow N_2(X^1\Sigma_g^+, v' \geq 0) + O(^1S)$

Расчеты [Кириллов и Аладьев, 1998, Косм. Иссл., т.36, с.451] констант скоростей с помощью приближения Ландау-Зинера показали, что константа для $v=0$ в несколько раз превосходит значения констант для $v>0$.

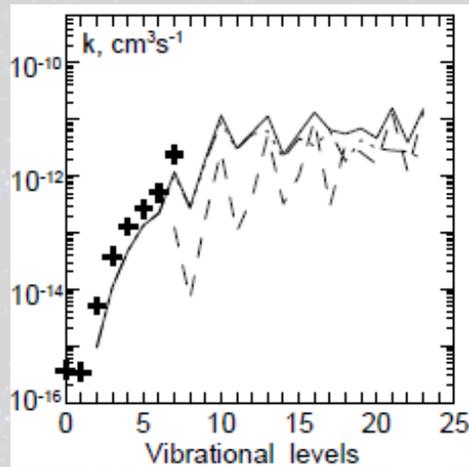
Константы скоростей взаимодействия для $N_2(A, B, W, B')$ + N_2 столкновений

Kirillov, 2004, Adv. Space Res, v.33, p.998

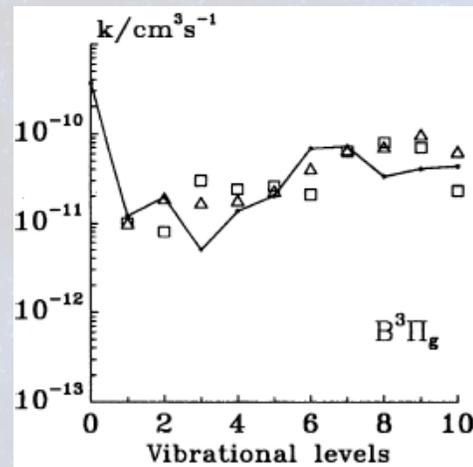
Kirillov, 2010, Ann. Geophys., v.28, p.181

Kirillov, 2011, J. Quan. Spec. Rad. Tran., v.112, p.2164

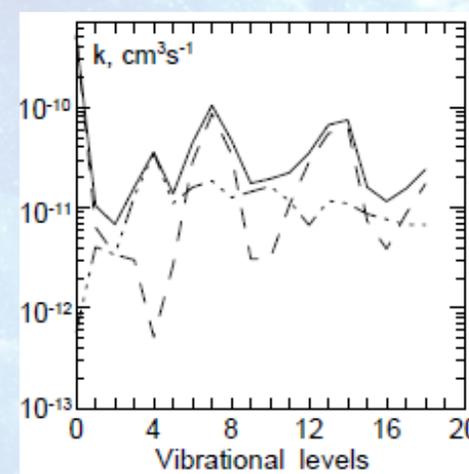
Kirillov, 2016, Chem. Phys. Lett., v.643, p.131



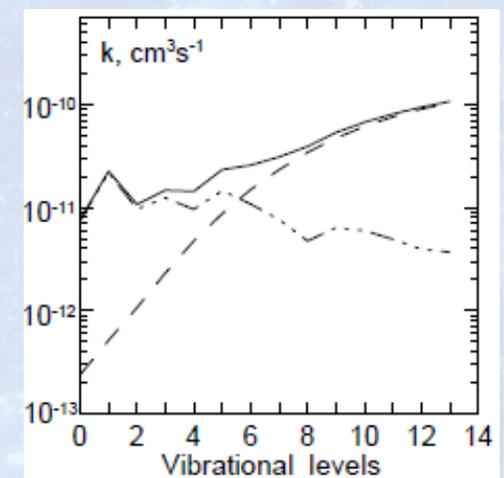
$A^3\Sigma_u^+$



$B^3\Pi_g$



$W^3\Delta_u$

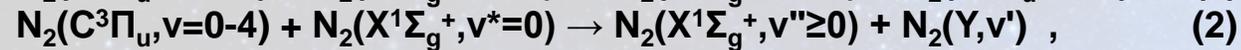


$B'^3\Sigma_u^-$

Константы скоростей взаимодействия для $N_2(C) + N_2$ столкновений

Kirillov, 2019, Chem. Phys. Lett., v.715, p.263

Intermolecular electron energy transfer processes:



Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными Dilecce et al. [2006, Chem. Phys. Lett., v.431, p.241]

(● и ▲):

а – для процесса (1),

б – для процесса (2).

Вклад $Y = W^3\Pi_g$ (○), $W^3\Delta_u$ (---), $V^3\Sigma_u^-$ (- - -)

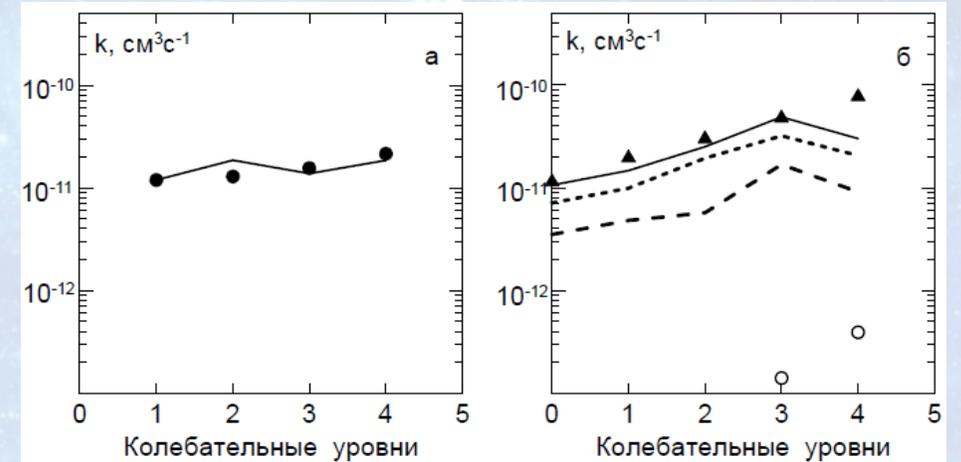


Table 1

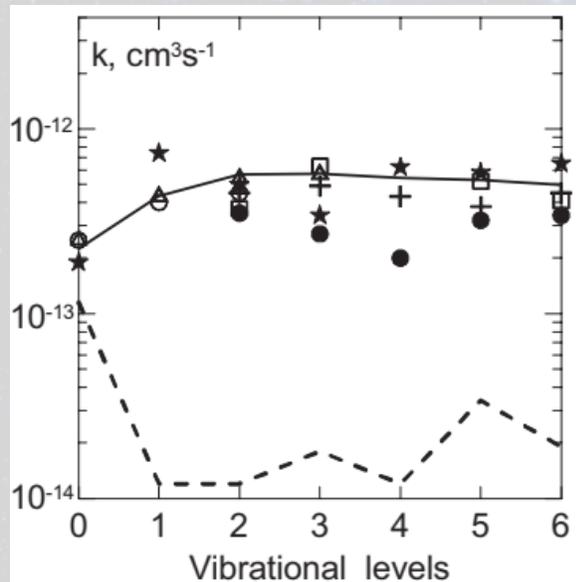
The calculated total quenching rate coefficients of the $C^3\Pi_u$ state are compared with experimental data [10,12–20] (in $10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$).

$v = 0$	$v = 1$	$v = 2$	$v = 3$	$v = 4$	References
1.06	2.66	4.37	6.27	4.86	This work
1.14 ± 0.12	3.14 ± 0.21	4.28 ± 0.21	6.34 ± 0.27	9.86 ± 0.46	Dilecce et al. [10]
1.0 ± 0.2	2.3 ± 0.3	3.0 ± 0.5	3.5 ± 0.7	–	Brocklehurst and Downing [12]
1.1 ± 0.1	2.2 ± 0.8	3.1 ± 0.7	–	–	Calo and Axtmann [13]
1.0 ± 0.1	2.6 ± 0.2	–	–	–	Millet et al. [14]
1.09 ± 0.11	2.53 ± 0.25	4.13 ± 0.41	4.28 ± 0.43	–	Chen et al. [15]
3.2 ± 0.3	–	–	–	8.8 ± 0.9	Becker et al. [16]
1.5	3.7	8	–	–	Urosevic et al. [17]
–	3.3 ± 0.4	6.3 ± 0.8	8 ± 2	–	Gat et al. [18]
1.3 ± 0.2	2.9 ± 0.3	4.6 ± 0.6	4.3 ± 0.6	–	Pancheshnyi et al. [19]
–	2.9 ± 0.4	4.3 ± 0.6	4.8 ± 0.8	4.9 ± 0.9	Simek et al. [20]

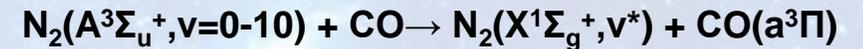
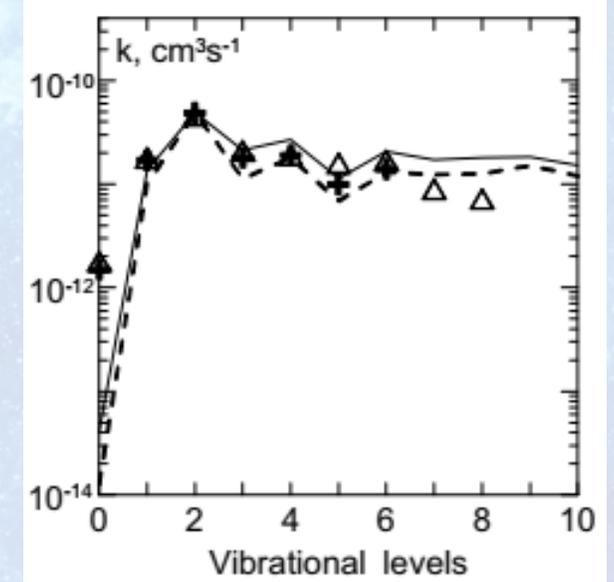
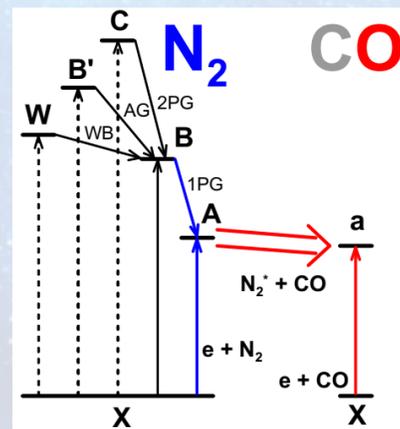
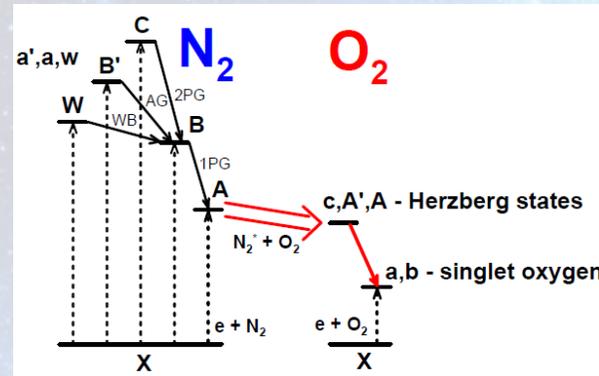
Константы скоростей взаимодействия для $N_2(A) + O_2$, CO столкновений

Kirillov, 2016, Chem. Phys. Lett., v.715, p.263

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



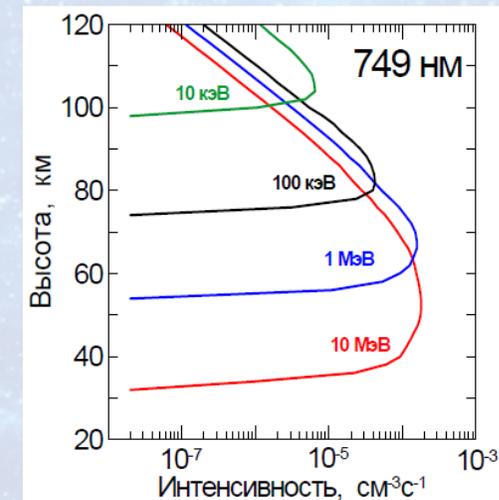
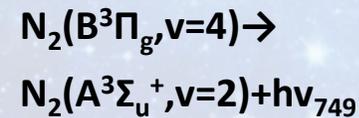
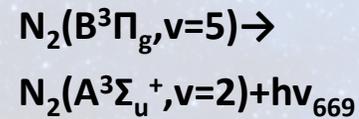
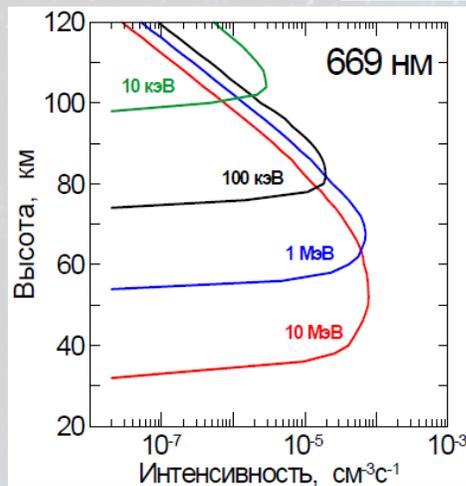
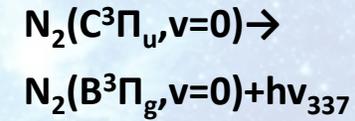
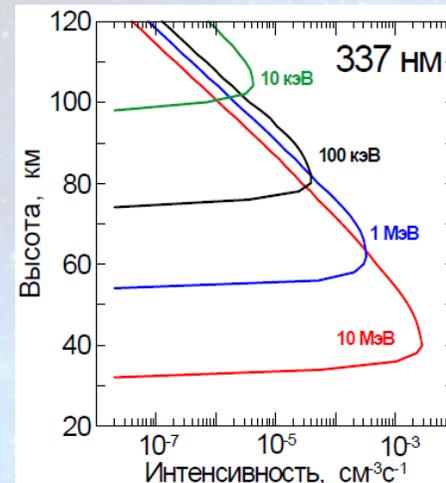
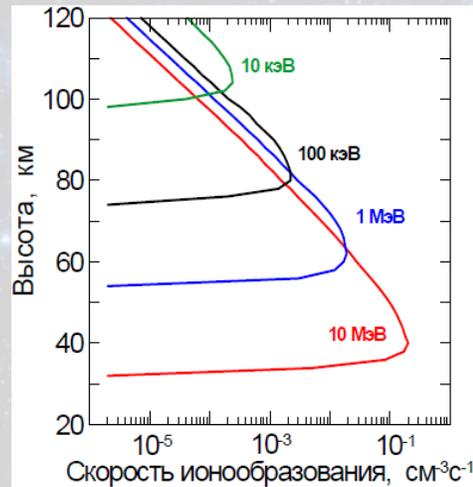
Сплошная линия – результаты расчета,
пунктирная линия – вклад $O_2(c, A', A)$,
значки – различные экспериментальные данные



Сплошная и пунктирная линии –
результаты расчета,
значки – экспериментальные данные

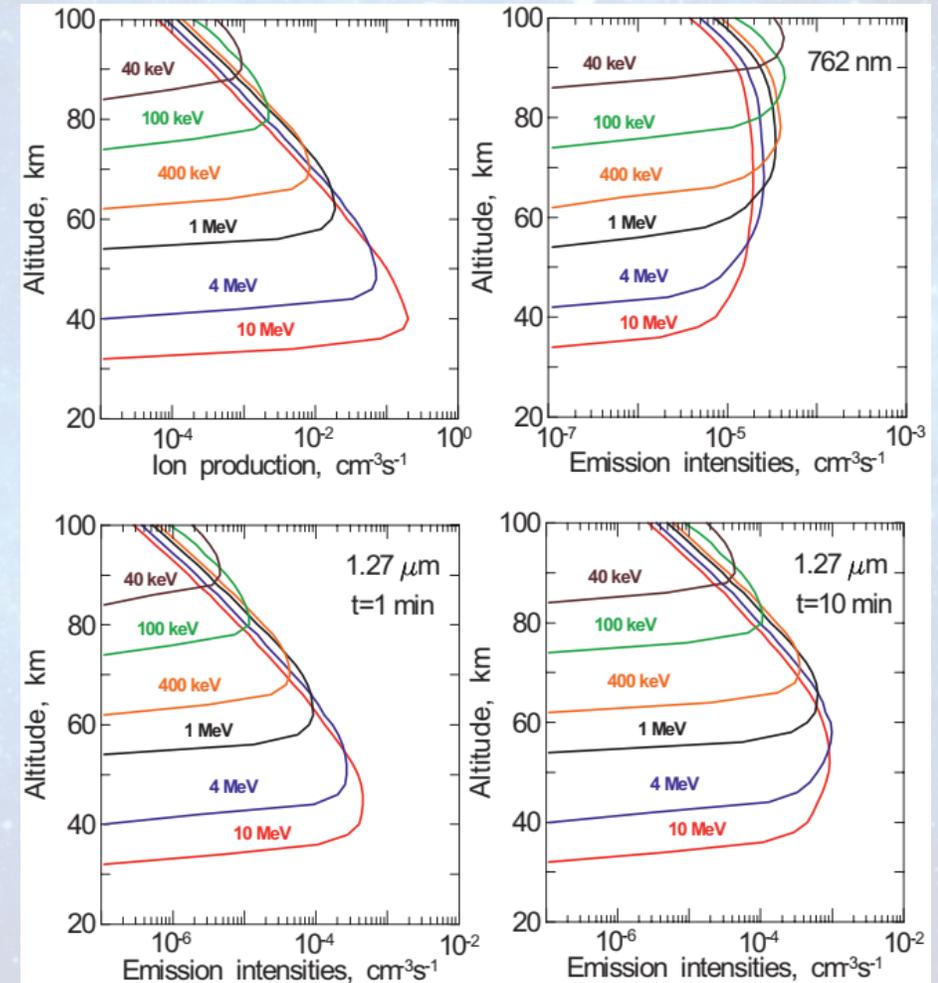
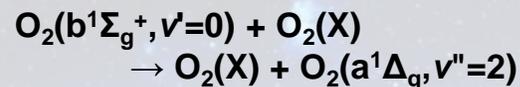
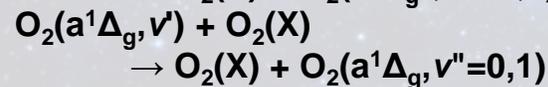
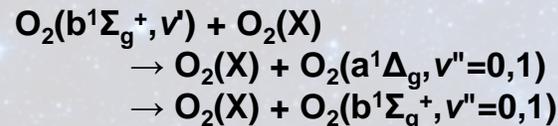
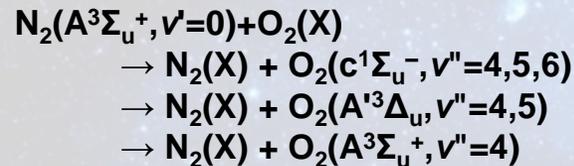
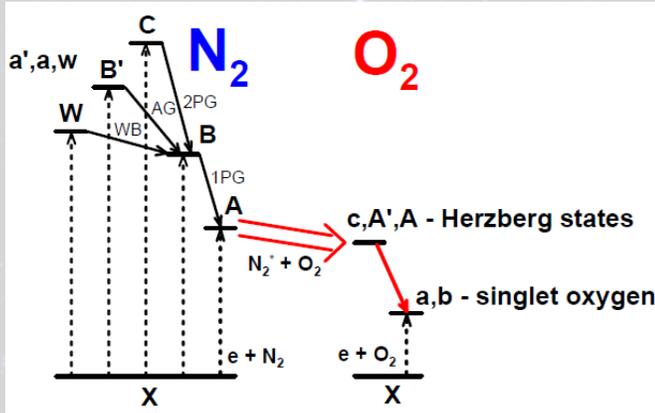
Высотные профили скорости ионообразования и рассчитанных интенсивностей полос 337, 669, 749 нм N₂ для E=10 кэВ, 100 кэВ, 1 МэВ, 10 МэВ

Kirillov, Belakhovsky, 2019, Geophys. Res. Lett., v.46, p.7734



Высотные профили рассчитанных интенсивностей полос 762 нм $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ и 1.27 мкм $O_2(a^1\Delta_g)$ для $E=40, 100, 400$ кэВ и 1, 4, 10 МэВ

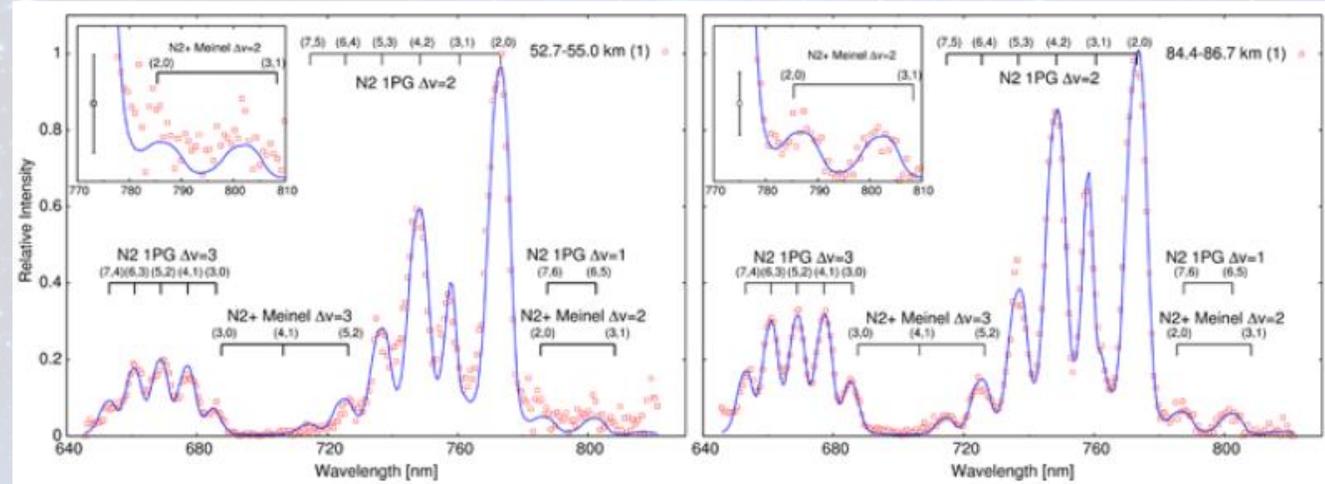
Kirillov, Belakhovsky, 2021, J.Geophys. Res.: Atmosphere, v.126, e2020JD033177



N₂ полосы в спектре свечения средней атмосферы Земли во время спрайтов

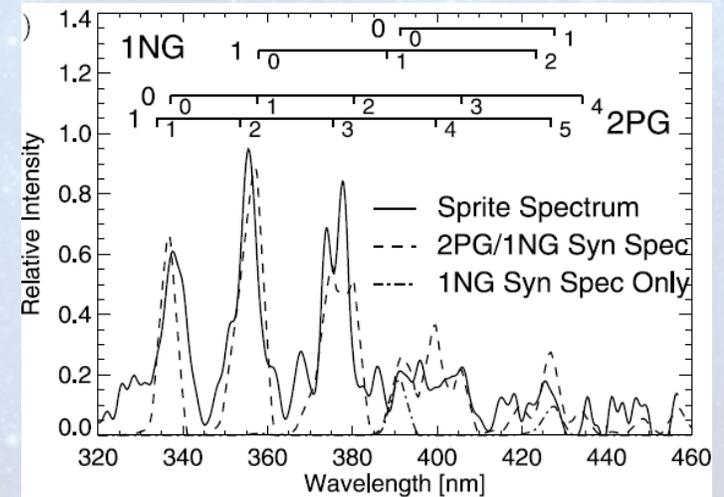


A large sprite over France
[Marskar, 2024, PSST, 33, 025034]

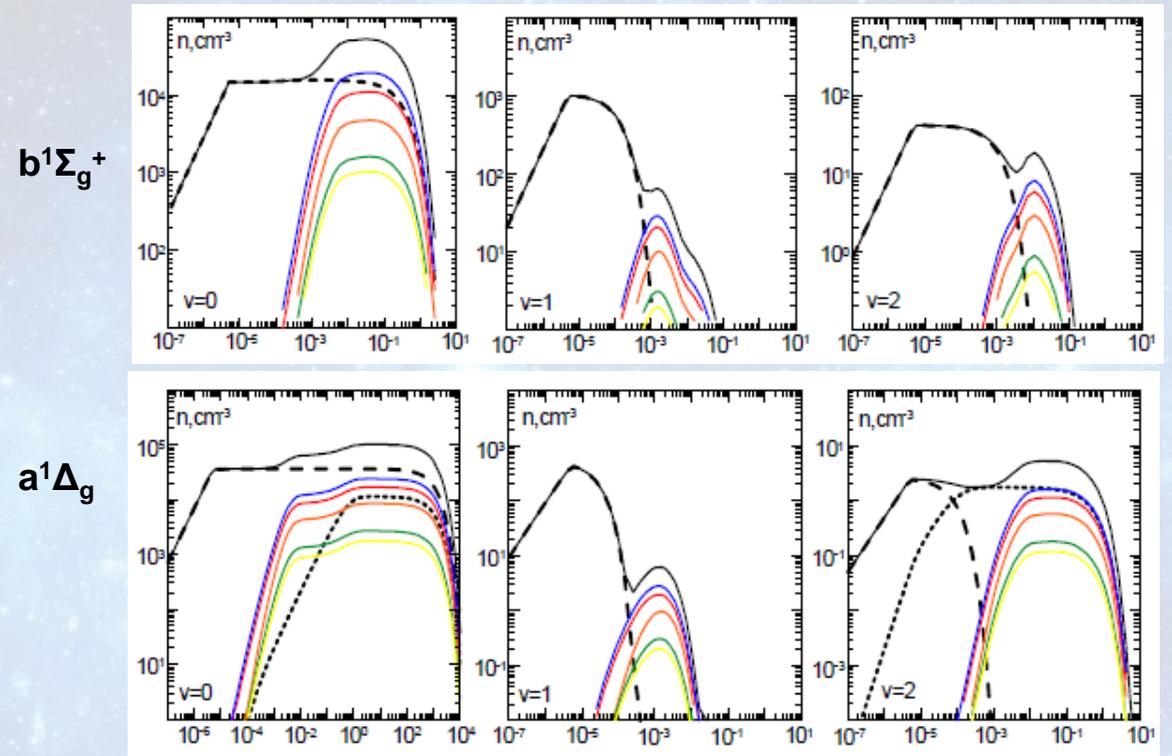
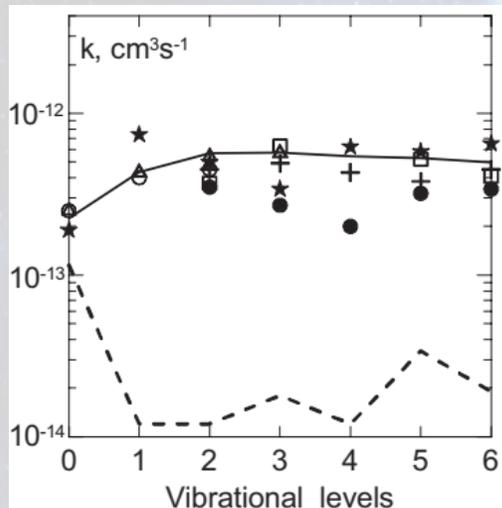
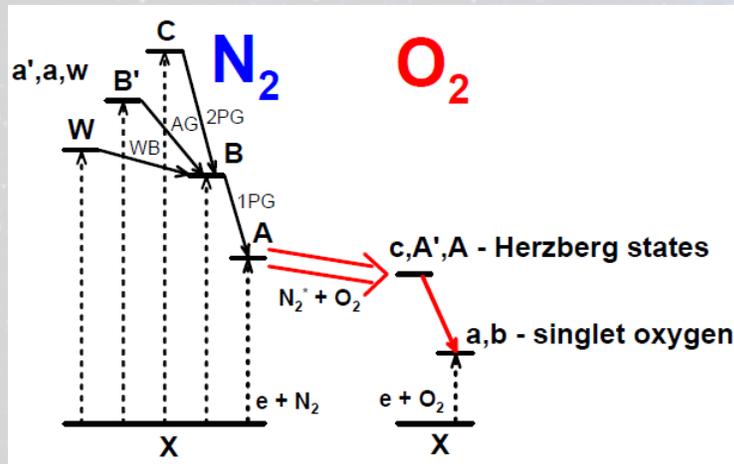


The red spectra of sprites by Kanmae et al., 2007,
Geophys. Res. Lett., v.34, L07810

The blue spectrum of sprite by Heavner et al., 2010,
J. Geophys. Res. - A, v.115, A00E44



Примеры рассчитанных концентраций синглетного кислорода $O_2(a^1\Delta_g, v=0-2)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+, v=0-2)$ на высоте 70 км средней атмосферы Земли во время спрайтов



Вклад прямого возбуждения $e + O_2$ (---),
 от состояний $A^3\Sigma_u^+$ (—), $B^3\Pi_g$ (—), $W^3\Delta_u$ (—),
 $V^3\Sigma_u^-$ (—), $C^3\Pi_u$ (—)

Вклад состояния $b^1\Sigma_g^+$ в возбуждение $a^1\Delta_g$ (- - -)

Заключение

1. Рассмотрена электронная кинетика триплетных состояний A, B, W, B', C молекулярного азота N_2 в средней атмосфере Титана на высотах 50-250 км при высыпании в атмосферу космических лучей. Исследовано взаимодействие электронно-возбужденных молекул N_2 с молекулами ацетилена C_2H_2 , этилена C_2H_4 , метана CH_4 и этана C_2H_6 в средней атмосфере Титана на высотах 50-250 км. Впервые показано доминирование реакций электронно-возбужденного молекулярного азота в процессах образования радикалов при столкновении с молекулами углеводородов. Расчитаны скорости процессов переноса электронного возбуждения с метастабильного молекулярного азота $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ на молекулы CO в верхних атмосферах Титана, Тритона, Плутона.

2. Аналогичные кинетические расчеты с участием триплетного электронно-возбужденного молекулярного азота проведены для средней атмосферы Земли 30-80 км во время высыпания в атмосферу высокоэнергичных релятивистских частиц. Проведен расчет интенсивностей свечения полос 1PG и 2PG систем N_2 во время высыпания высокоэнергичных электронов. Показано, что происходит значительное понижение интенсивностей свечения полос первой положительной системы с уменьшением высоты из-за влияния столкновительных процессов на населенности колебательных уровней молекулы $N_2(B^3\Pi_g)$. Исследовано влияние межмолекулярных процессов переноса энергии с $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ на образование синглетного кислорода и свечение Атмосферных и Инфракрасных атмосферных полос O_2 на высотах средней атмосферы Земли.

**СПАСИБО
ЗА ВНИМАНИЕ !**