

УДК 551.593

ЭЛЕКТРОННАЯ КИНЕТИКА МОЛЕКУЛЯРНОГО АЗОТА И МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА В СРЕДНЕЙ АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ В СОБЫТИЯХ GLE 23-ГО СОЛНЕЧНОГО ЦИКЛА

© 2023 г. А. С. Кириллов¹, *, В. Б. Балаховский¹, **, Е. А. Маурчев¹,
Ю. В. Балабин¹, А. В. Германенко¹, Б. Б. Гвоздевский¹

¹Полярный геофизический институт (ПГИ), Апатиты (Мурманская область), Россия

*e-mail: kirillov@pgia.ru

**e-mail: belakhov@mail.ru

Поступила в редакцию 27.04.2022 г.

После доработки 18.05.2022 г.

Принята к публикации 20.07.2022 г.

На основании моделей электронной кинетики триплетных и синглетных состояний молекулярного азота и синглетных состояний молекулярного кислорода для средней атмосферы Земли проведен расчет профилей интенсивностей полос первой и второй положительных систем N₂, полос Лаймана–Бирджа–Хопфилда N₂, инфракрасных полос O₂ в случае высыпания в атмосферу Земли высокоэнергичных протонов во время событий GLE65, GLE67, GLE69, GLE70 солнечного цикла 23. Расчеты показали, что практически на всем рассматриваемом интервале высот 20–80 км имеется значительный вклад процессов гашения некоторых электронно-возбужденных состояний N₂ и O₂ при молекулярных столкновениях. Кинетика синглетных состояний O₂ на высотах средней атмосферы во время высыпаний протонов рассмотрена как с учетом прямого возбуждения высокоэнергичными частицами, так и с учетом межмолекулярных процессов переноса электронного возбуждения.

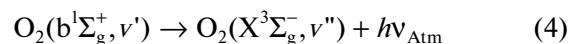
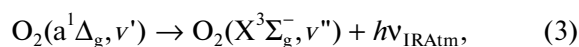
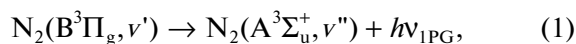
DOI: 10.31857/S0016794022060062, EDN: ADCFJJ

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. При взаимодействии высокоэнергичных выпадающих частиц и вторичных электронов с атмосферными составляющими образуются электронно-возбужденные и колебательно-возбужденные молекулы. Данные молекулы не только излучают эмиссии различных диапазонов длин волн, но и могут участвовать в различных химических процессах. Скорости таких процессов возрастают из-за внутреннего возбуждения молекул и уменьшения активационных барьеров химических реакций [Русанов и Фридман, 1984]. Поэтому при исследовании химического состава и излучательного баланса атмосферы во время возмущений, связанных с дополнительным притоком энергии, необходим учет электронной и колебательной кинетики основных атмосферных составляющих N₂ и O₂.

В предыдущей работе [Кириллов и др., 2021] были проведены расчеты профилей интенсивно-

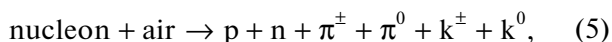
стей полос первой (1PG, 749 нм и 669 нм) и второй (2PG, 337 нм) положительных систем молекулярного азота, а также полос Инфракрасной Атмосферной (IRAtm, 1270 нм) и Атмосферной (Atm, 762 нм) систем молекулярного кислорода, обусловленных спонтанными излучательными переходами между электронно-возбужденными состояниями молекул N₂ и O₂,



на высотах 20–80 км средней атмосферы Земли во время высыпания высокоэнергичных протонов в атмосферу Земли во время события GLE69 (Ground level enhancement) от 20 января 2005 г., при котором произошло возрастание скорости счета нейтронных мониторов (НМ), возникшее вследствие увеличения числа протонов (в основном с энергией до 10 ГэВ) в потоке первичных космических лучей (КЛ). На основании моделей

электронной кинетики триплетных состояний ($A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_g$, $W^3\Delta_u$, $B^3\Sigma_u^-$, $C^3\Pi_u$) 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 указанных переходов (1–4) с учетом излучательных и столкновительных процессов в средней атмосфере Земли.

При вторжении в атмосферу Земли первичных 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 ядрами атомов воздуха (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:



где p – протоны; n – нейтроны; $\pi^\pm$, π^0 – пионы; $k^\pm$, k^0 – каоны.

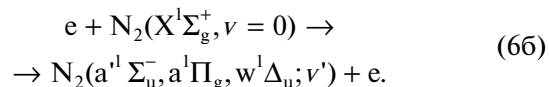
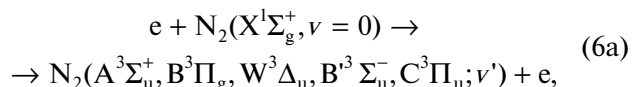
Взаимодействие элементарных частиц, образованных в процессе (5), с молекулами составляющих средней атмосферы Земли приводит к образованию потоков вторичных электронов. Как показывают исследования взаимодействия высокоэнергичных протонов с молекулами азота и кислорода [Porter et al., 1976], при протонных 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; Кривоуцкий и Репнев, 2009, 2012].

В настоящей работе рассмотрена кинетика как триплетных ($A^3\Sigma_u^+$, $B^3\Pi_g$, $W^3\Delta_u$, $B^3\Sigma_u^-$, $C^3\Pi_u$), так и синглетных ($a^1\Sigma_u^-$, $a^1\Pi_g$, $w^1\Delta_u$) состояний молекулярного азота, а также синглетных ($a^1\Delta_g$, $b^1\Sigma_g^+$) со-

стояний молекулярного кислорода на высотах средней атмосферы во время событий GLE65 (28 октября 2003 г.), GLE67 (02 ноября 2003 г.), GLE69 (20 января 2005 г.), GLE70 (13 декабря 2006 г.), при которых произошли возрастания скорости счета НМ, возникших 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 и синглетного молекулярного азота для высот средней атмосферы Земли во время высыпания высокоэнергичных электронов (ВВЭ) и КЛ представлена в работах [Kirillov and Belakhovsky, 2019; Кириллов и Белаховский, 2020а, б; Кириллов и др., 2021]. В настоящих расчетах при вторжении КЛ аналогично рассмотрены процессы возбуждения пяти триплетных и трех синглетных состояний N_2 вторичными электронами, образованных в процессах ионизации элементарными частицами, образованными в процессах (5):



При этом учтены следующие колебательные уровни пяти триплетных состояний: $A^3\Sigma_u^+$ ($v' = 0-29$), $B^3\Pi_g$ ($v' = 0-18$), $W^3\Delta_u$ ($v' = 0-21$), $B^3\Sigma_u^-$ ($v' = 0-15$), $C^3\Pi_u$ ($v' = 0-4$) и трех синглетных состояний: $a^1\Sigma_u^-$ ($v' = 0-17$), $a^1\Pi_g$ ($v' = 0-6$), $w^1\Delta_u$ ($v' = 0-13$). 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 (6а), а для состояния $B^3\Sigma_u^-$ – более 93% [Gilmore et al., 1992]. Для состояний $a^1\Sigma_u^-$, $a^1\Pi_g$ и $w^1\Delta_u$ учтено более 99, 87 и 92% возбуждения (соответственно) в результате процессов (6б) [Gilmore et al., 1992]. На рисунке 1 представлена схема рассматриваемых колебательных уровней всех восьми электронно-возбужденных состояний N_2 .

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 $A^3\Sigma_u^+, v' \rightarrow$

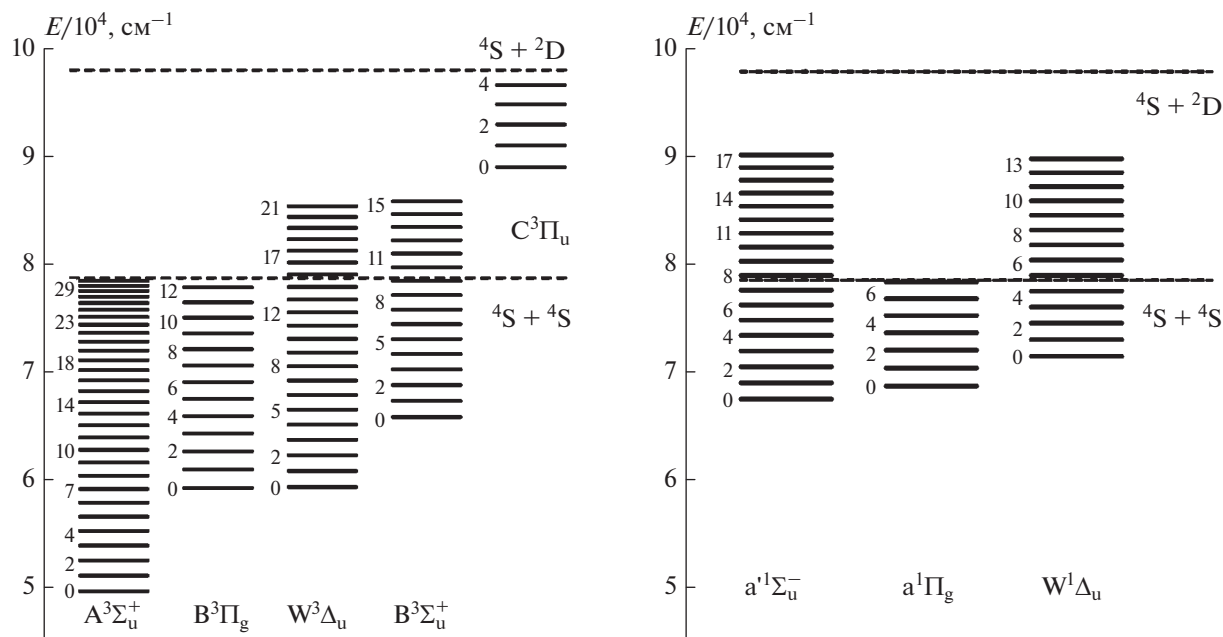
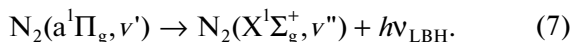


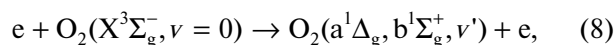
Рис. 1. Схема колебательных уровней восьми электронно-возбужденных состояний N_2 .

$\rightarrow X^1\Sigma_g^+, v''$ (полосы Вегарда–Каплана) (VK) [Gilmore et al., 1992]. Для синглетных состояний молекулярного азота учтено свечение системы полос Лаймана–Бирджа–Хопфилда N_2 (LBH), которая является главной в дальнем ультрафиолетовом участке (120–200 нм) спектра свечения и происходит при спонтанных переходах с синглетного электронно-возбужденного состояния $a^1\Pi_g$ на основное состояние $X^1\Sigma_g^+$:

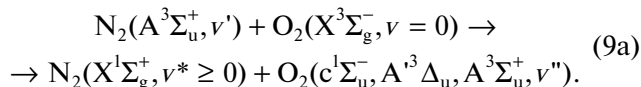


Кроме спонтанных переходов (7) с излучением LBH полос при рассмотрении кинетики синглетных состояний молекулы азота необходимо еще учесть излучение инфракрасных полос двух систем МакФарлана (переходы $w^1\Delta_u, v' \leftrightarrow a^1\Pi_g, v''$ и $a^1\Sigma_u^-, v' \leftrightarrow a^1\Pi_g, v''$) [Gilmore et al., 1992], а также спонтанные переходы $a^1\Sigma_u^-, v' \rightarrow X^1\Sigma_g^+, v''$ (полосы Огавы–Танаки–Уилкинсона–Малликена) [Casassa and Golde, 1979].

Кинетическая модель электронно-возбужденного синглетного молекулярного кислорода для высот средней атмосферы Земли во время ВВЭ и GLE69 представлена в работах [Kirillov and Belakhovsky, 2021; Кириллов и др., 2021]. В настоящих расчетах интенсивностей полос молекулярного кислорода при высыпании КЛ аналогично рассмотрены процессы возбуждения двух синглетных состояний O_2 вторичными электронами:

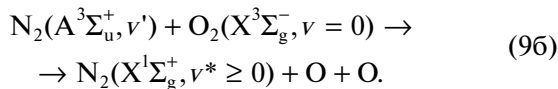


а также процесс переноса энергии электронного возбуждения метастабильного молекулярного азота при столкновении с молекулами O_2 и возбуждение состояний Герцберга $c^1\Sigma_u^-, A^3\Delta_u, A^3\Sigma_u^+$ у молекулярного кислорода



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 (9a) был проведен в работе [Kirillov, 2008], а сравнение со всеми имеющимися в мировой научной литературе экспериментальными данными приведено в публикации [Kirillov and Belakhovsky, 2021]. Как показали теоретические расчеты, при исследовании роли межмолекулярных процессов переноса энергии электронного возбуждения (9a) 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 O_2 доминирующим

каналом взаимодействий является процесс диссоциации молекулы O_2 и образование двух атомов кислорода [Kirillov, 2008; Kirillov and Belakhovsky, 2021]



В работах [Kirillov and Belakhovsky, 2019; Кириллов и Белаховский, 2020а, б; Кириллов и др., 2021] было показано влияние роста плотности в средней атмосфере на рассчитанные колебательные населенности состояний $B^3\Pi_g$ и $a^1\Pi_g$. Поэтому $B^3\Pi_g$ и $a^1\Pi_g$ состояния (аналогично $W^3\Delta_u$, $B^3\Sigma_u^+$, $a^1\Sigma_u^+$, $w^1\Delta_u$) могут вносить вклад в возбуждение синглетных состояний $a^1\Delta_g$ и $b^1\Sigma_g^+$ молекулярного кислорода аналогично $A^3\Sigma_u^+$ состоянию при неупругих молекулярных столкновениях в средней атмосфере. Расчет констант гашения для столкновений $N_2(B^3\Pi_g, W^3\Delta_u, B^3\Sigma_u^+) + O_2$, $N_2(a^1\Sigma_u^+, a^1\Pi_g, w^1\Delta_u) + O_2$ был проведен в работе [Kirillov, 2011]. В тех расчетах не было получено хорошего согласия с имеющимися экспериментальными данными [Piper, 1987, 1992; Marinelli et al., 1989; Khachatryan et al., 2003; Umemoto, 2003; Umemoto et al., 2003] для столкновений $N_2(B^3\Pi_g, v = 0-12) + O_2$, $N_2(a^1\Sigma_u^+, v = 0) + O_2$, $N_2(a^1\Pi_g, v = 0.1) + O_2$. Однако, как было показано в работе [Kirillov, 2011], одними из основных продуктов данных взаимодействий являются диссоциация молекулы кислорода и процессы образования электронно-возбужденных молекул $O_2(a^1\Delta_g, b^1\Sigma_g^+)$. 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 N_2 и O_2 в средней атмосфере Земли.

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

В настоящей работе рассмотрены события GLE 23-го солнечного цикла (1997–2009 гг.), которым 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 помо-

щи которого создаются соответствующие модели. В Полярном геофизическом институте был разработан программный пакет RUSCOSMICS, 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].

Событие GLE65 произошло 28 октября 2003 г., когда активность Солнца еще была близка к максимуму. GLE65 произошло от вспышки 4B/X17.2 с координатами S16E08. В 11:02 UT отмечено начало радиовсплеска II типа, указывающего на появление в магнитосфере Солнца энергичных частиц. Амплитуда возрастания на некоторых южно-полярных станциях у НМ превышала 40% от уровня галактического фона. Однако наиболее раннее начало возрастания отмечено в 11:14 UT на ст. Норильск.

Событие GLE67 произошло 2 ноября 2003 г. от вспышки 2B/X8.3 с координатами S18W59. В 17:14 UT наблюдалось начало радиовсплеска II типа. Максимальная амплитуда возрастания на некоторых южно-полярных станциях у НМ достигала 15–18% от уровня галактического фона. Наиболее раннее начало возрастания отмечено в 17:29 UT на ст. Мак-Мердо в Антарктиде.

Событие GLE69 произошло 20 января 2005 г. от вспышки 2B/X7.1 с координатами N14W61. Вспышка сопровождалась радиовсплесками II и IV типов. Начало радиоизлучения II типа (вероятный момент генерации релятивистских КЛ) зафиксировано в 06:44 UT. Событие GLE69 на начальной фазе характеризовалось очень большой амплитудой возрастания (более 4000%) и сильной анизотропией “север–юг” в релятивистском потоке КЛ. На начальной фазе спектр солнечных космических лучей соответствовал быстрой компоненте.

Событие GLE 70, последнее событие 23-го цикла солнечной активности, произошло 13 декабря 2006 г. в 02:40 UT. Активная область с координатами S06W24 вызвала солнечную вспышку класса 2B/X3.4. Вспышка сопровождалась радиовсплесками типа II, IV и выбросом корональной массы типа “гало”. По данным НМ продолжительность события составила около 5 ч. Несмотря на то, что событие GLE70 происходило на спаде цикла, это было достаточно мощное событие (третье по интенсивности в 23-м цикле). Наибольший рост интенсивности космических лучей наблюдался на ст. Оулу (92%).

Следует отметить, что большинство GLE (и все в 23-м цикле) имеют следующую структуру. На начальной фазе события (фаза роста и достижения максимума, 1–1.5 ч) спектр КЛ соответствует быстрой компоненте. Поток частиц дости-

гает атмосферы в полярных и средних широтах, а в отдельных событиях — и на экваторе, несмотря на то, что жесткость геомагнитного обрезания там ~15 ГВ. Вторая фаза события (фаза спада) имеет мягкий спектр КЛ, простирающийся не далее 2–3 ГВ в самых крупных событиях. В связи с геомагнитным обрезанием медленная компонента может достигнуть атмосферы только в полярных и приполярных областях. Линия геомагнитного обрезания в 1 ГВ по территории России примерно соответствует широте 62 градуса на западе России и широте 66 градусов на востоке.

Воспользуемся в настоящей работе высотными профилями скоростей ионизации и потоков вторичных электронов для высот 20–80 км для медленной компоненты солнечных КЛ. Для быстрой компоненты солнечных КЛ, имеющей жесткий энергетический спектр с верхним пределом ~10 ГэВ, 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 иная. Медленная компонента имеет мягкий энергетический спектр, зато плотность потока частиц превосходит галактический уровень на 4–5 порядков. 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, второй положительных систем и Лаймана–Бирджа–Хопфилда молекулярного азота воспользуемся решением систем уравнений [Kirillov and Belakhovsky, 2019; Кириллов и Белаховский, 2020а, б; Кириллов и др., 2021] для получения концентраций электронно-возбужденных молекул $N_2(B^3\Pi_g, v')$, $N_2(C^3\Pi_u, v')$ и $N_2(a^1\Pi_g, v')$:

$$\begin{aligned} & Q^B q_{0v'}^{XB} + \sum_{Y, v''} A_{v''v'}^{YB} N_{v''}^Y + \sum_{v''} A_{v''v'}^{CB} N_{v''}^C + \\ & + \sum_{Y, v''} k^{*YB}_{v''v'} N_{v''}^Y ([N_2] + [O_2]) + \sum_{Y, v''} k^{**YB}_{v''v'} N_{v''}^Y [N_2] + \\ & + \sum_{v''} k^{*BB}_{v''v'} N_{v''}^B [N_2] + \sum_{v''} k^{**CB}_{v''v'} N_{v''}^C [N_2] = \\ & = \left\{ \sum_{Y, v''} A_{v''v'}^{BY} + \sum_{Y, v''} k^{*BY}_{v''v'} ([N_2] + [O_2]) + \right. \\ & \left. + \sum_{Y, v''} k^{**BY}_{v''v'} [N_2] + \sum_{v''} k^{**BB}_{v''v'} [N_2] + k^{**B}_{v'} [O_2] \right\} N_{v'}^B, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & Q^C q_{0v'}^{XC} + \sum_{v'' > v'} k^{**CC}_{v''v'} N_{v''}^C [N_2] = \\ & = \left\{ \sum_{v''} A_{v''v'}^{CB} + \sum_{Y, v''} k^{*CY}_{v''v'} [N_2] + \right. \\ & \left. + \sum_{v''} k^{**CB}_{v''v'} [N_2] + \sum_{v'' < v'} k^{**CC}_{v''v'} [N_2] + k^{**C}_{v'} [O_2] \right\} N_{v'}^C, \end{aligned} \quad (11)$$

где Y обозначают состояния $A^3\Sigma_u^+$, $W^3\Delta_u$, $B^3\Sigma_u^-$; Q^B , Q^C — скорости возбуждения $B^3\Pi_g$, $C^3\Pi_u$ 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 — коэффициенты Эйнштейна для всех упомянутых ранее спонтанных переходов; k^* и k^{**} подразумевают константы скоростей внутримолекулярных и межмолекулярных процессов переноса энергии, соответственно;

$$\begin{aligned} & Q^a q_{0v'}^{Xa} + \sum_{Y, v''} A_{v''v'}^{Ya} N_{v''}^Y + \sum_{Y, v''} k^{*Ya}_{v''v'} N_{v''}^Y ([N_2] + [O_2]) + \\ & + \sum_{Y, v''} k^{**Ya}_{v''v'} N_{v''}^Y [N_2] + \sum_{v''} k^{**aa}_{v''v'} N_{v''}^a [N_2] = \\ & = \left\{ \sum_{Y, v''} A_{v''v'}^{aY} + \sum_{Y, v''} k^{*aY}_{v''v'} ([N_2] + [O_2]) + \right. \\ & \left. + \sum_{Y, v''} k^{**aY}_{v''v'} [N_2] + \sum_{v''} k^{**aa}_{v''v'} [N_2] + k^{**a}_{v'} [O_2] \right\} N_{v'}^a, \end{aligned} \quad (12)$$

где Y и Z обозначают $a^1\Sigma_u^-$, $w^1\Delta_u$; Q^Y , Q^a — скорости возбуждения Y , $a^1\Pi_g$ состояний, соответственно; A — коэффициенты Эйнштейна для всех упомянутых спонтанных переходов; k^* и k^{**} подразумевают константы скоростей внутримолекулярных и межмолекулярных процессов переноса энергии соответственно. Кроме того, при расчете концентраций $N_2(C^3\Pi_u, v')$ учтем гашение данного состояния [Kirillov, 2019], поскольку на нижних высотах рассматриваемого диапазона столкновительные времена жизни состояния $C^3\Pi_u$ 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; Кириллов и др., 2021] для получения концентраций электронно-возбужденных молекул $O_2(a^1\Delta_g, v')$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+, v')$:

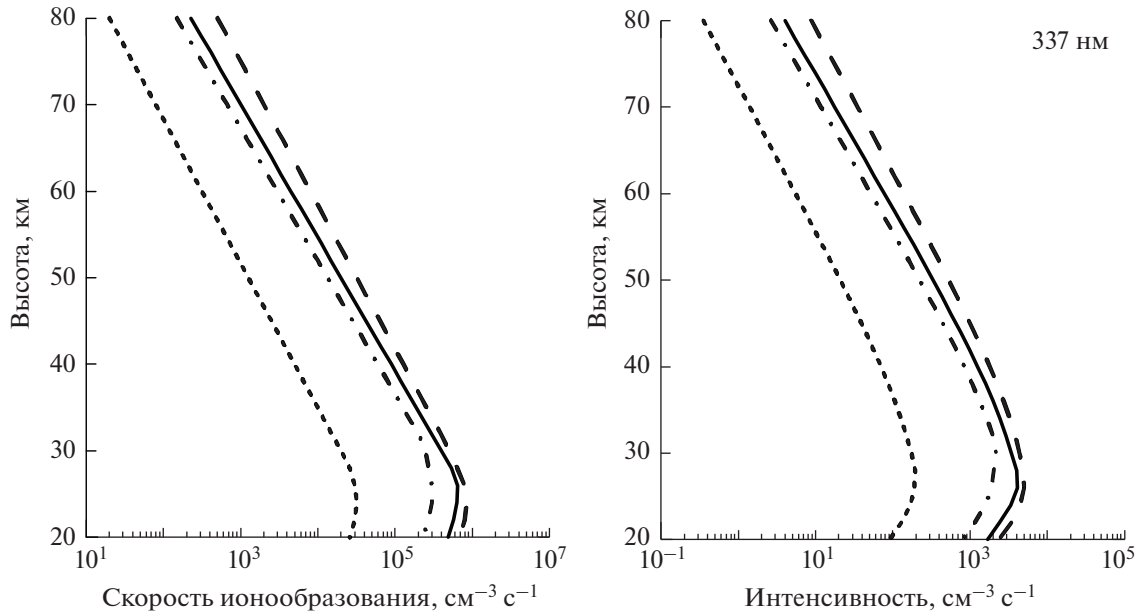
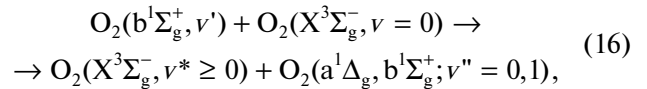
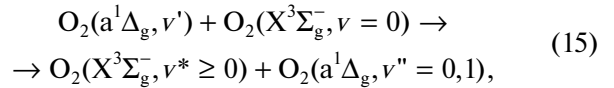


Рис. 2. Профили рассчитанных скоростей ионизации и скоростей объемной интенсивности полосы 337 нм молекулярного азота: GLE65 (короткие штрихи), GLE67 (штрихпунктирные линии), GLE69 (длинные штрихи), GLE70 (сплошные линии).

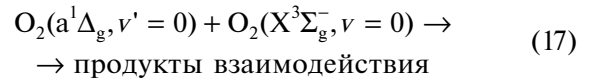
$$\begin{aligned}
 \frac{\partial N_{v'}^a}{\partial t} = & Q^a q_{0v'}^{Xa} + \sum_{Y=b,c,A';v''} A_{v''v'}^{Ya} N_{v''}^{A'} + \\
 & + \sum_{Y=b,c,A';A;v''} k_{v''v'}^{*Ya} N_{v''}^Y ([N_2] + [O_2]) + \\
 & + \sum_{Y=a,b,c,A';A;v''} k_{v''v'}^{**Ya} N_{v''}^Y [O_2] - \left\{ \sum_{v''} A_{v'v''}^{aX} + \right. \\
 & + \sum_{v''} k_{v'v''}^{*aX} ([N_2] + [O_2]) + \sum_{v''} k_{v'v''}^{**aa} [O_2] \left. \right\} N_{v'}^a, \\
 & Q^b q_{0v'}^{Xb} + \sum_{Y=c,A';A;v''} k_{v''v'}^{*Yb} N_{v''}^Y ([N_2] + [O_2]) + \\
 & + \sum_{Y=b,c,A';A;v''} k_{v''v'}^{**Yb} N_{v''}^Y [O_2] = \left\{ \sum_{v''} A_{v'v''}^{bX} + \sum_{v''} A_{v'v''}^{ba} + (14) \right. \\
 & + \sum_{Y=X,a;v''} k_{v'v''}^{*bY} ([N_2] + [O_2]) + \sum_{Y=a,b;v''} k_{v'v''}^{**bY} [O_2] \left. \right\} N_{v'}^b,
 \end{aligned} \quad (13)$$

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 $X^3\Sigma_g^-, v=0 \rightarrow a^1\Delta_g, v'$ 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 внутри-молекулярных и межмолекулярных процессов переноса энергии с участием электронно-воз-

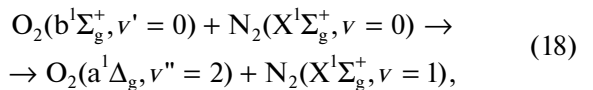
бужденной молекулы кислорода соответственно. При этом основной вклад в гашение $O_2(a^1\Delta_g, v' > 0)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+, v' > 0)$ вносят межмолекулярные процессы переноса энергии [Кириллов, 2012]



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



с $k_{17} = 1.7 \times 10^{-18} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$ согласно [Burkholder et al., 2015],



с $k_{18} = 2 \times 10^{-15} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$ согласно [Dunlea et al., 2005; Kirillov, 2013; Burkholder et al., 2015].

На рисунке 2 показаны профили рассчитанных скоростей ионизации и скоростей объемной интенсивности полосы 337 нм второй положительной системы N_2 , связанной со спонтанными излучательными переходами (2) с $v'=0 \rightarrow v''=0$, для всех четырех рассмотренных случаев GLE. Как видно из рис. 2, профили объемной

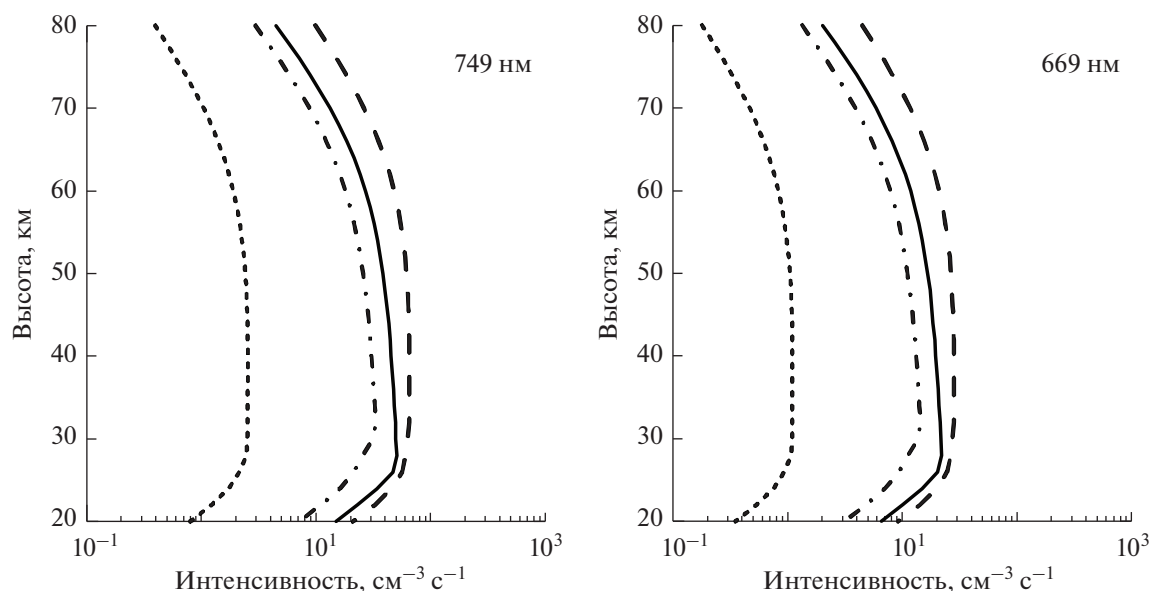


Рис. 3. Профили рассчитанных скоростей объемной интенсивности полос 749 и 669 нм молекулярного азота: обозначения как на рис. 2.

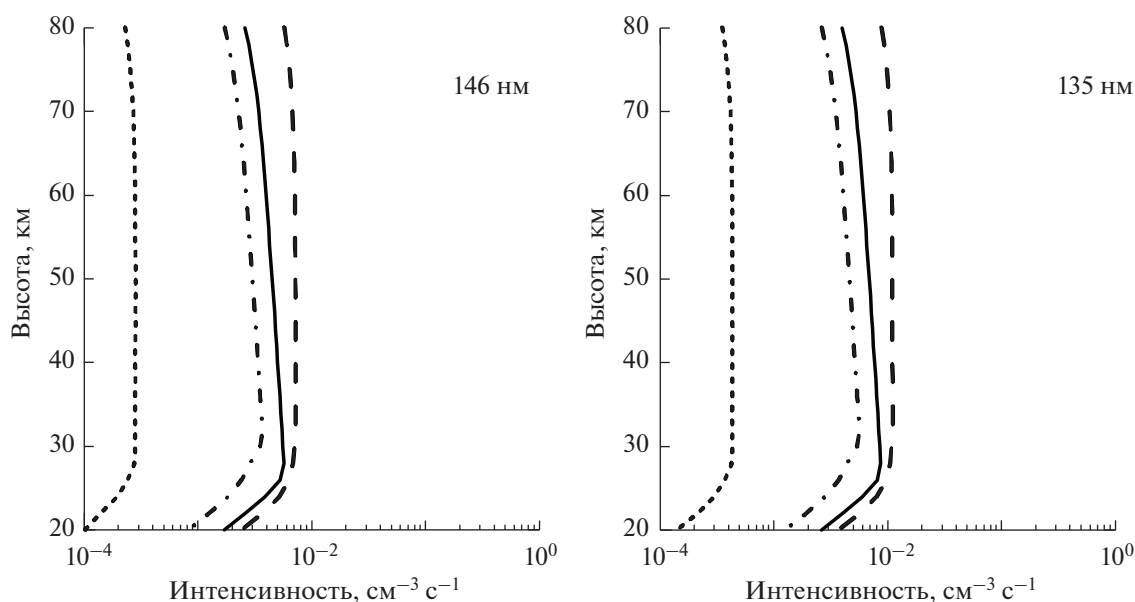


Рис. 4. Профили рассчитанных скоростей объемной интенсивности полос 146 и 135 нм молекулярного азота: обозначения как на рис. 2.

интенсивности полосы 337 нм во многом повторяют профили скорости ионообразования. Лишь на нижних высотах рассмотренного интервала высот начинается сказываться гашение состояния C^3P_u [Kirillov, 2019]. Рассчитанные интенсивности ультрафиолетовой полосы 337 нм варьируются от $I_{337} \sim 350$ Рл для GLE65 до $I_{337} \sim 8.9$ кРл для GLE69 (1 Рэлей = 10^6 фотон/см² с).

Аналогично, на рис. 3 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. 3, процессы гашения состояния B^3P_g достаточно эффективны на высотах средней атмосферы Зем-

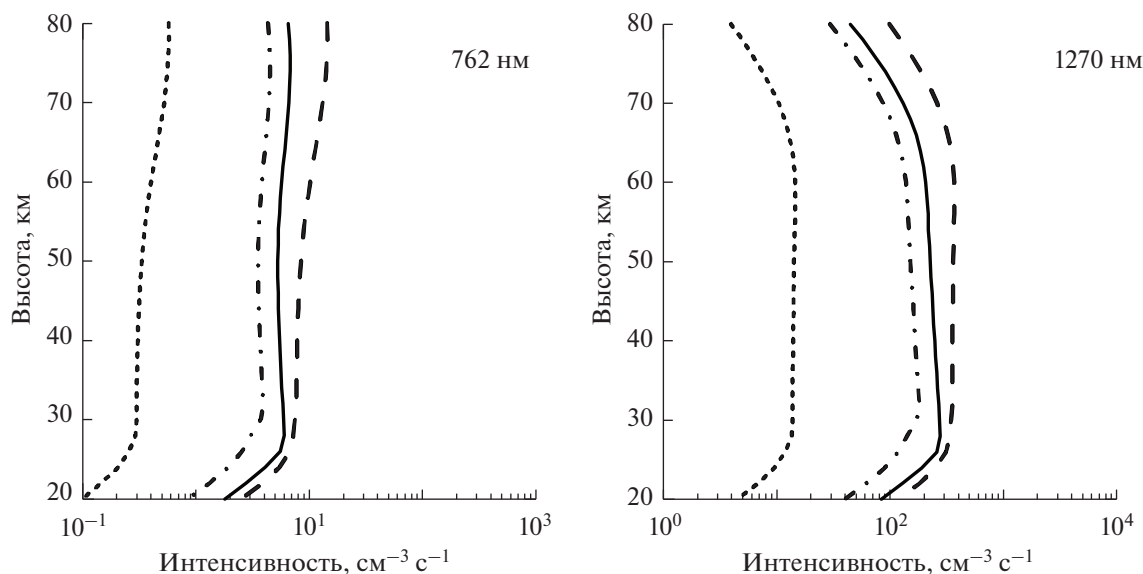


Рис. 5. Профили рассчитанных скоростей объемной интенсивности полос 762 и 1270 нм молекулярного кислорода: обозначения как на рис. 2.

ли. Поэтому рассчитанные интегральные интенсивности полос 749 и 669 нм варьируются $I_{749} \sim 11\text{--}290$ Рл и $I_{669} \sim 5\text{--}130$ Рл.

На рисунке 4 приведены профили рассчитанных скоростей объемных интенсивностей ультрафиолетовых полос 146 и 135 нм Лаймана–Бирджа–Хопфилда, обусловленных спонтанными излучательными переходами (7) с $v' = 1 \rightarrow v'' = 1$ и $v' = 3 \rightarrow v'' = 0$ соответственно. Как видно из рис. 4, для состояния $a^1\Pi_g$ очень эффективны процессы гашения на высотах средней атмосферы Земли. Поэтому рассчитанные интегральные интенсивности полос 146 и 135 нм варьируются $I_{146} \sim 1.6 \times 10^{-3}\text{--}4.1 \times 10^{-2}$ Рл и $I_{135} \sim 2.5 \times 10^{-3}\text{--}6.3 \times 10^{-2}$ Рл.

На рисунке 5 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 представлены результаты расчетов для времени $t = 30$ мин после начала высыпания высокоэнергичных протонов. В работе [Кириллов и др., 2021] было показано, что из-за большого излучательного времени жизни состояния $a^1\Delta_g$ (больше часа) и очень малых значений констант скоростей гашения при столкновениях для высот выше ~ 40 км наблюдается рост концентраций $O_2(a^1\Delta_g, v = 0)$ на протяжении десятков минут высыпания КЛ. Рассчитанная в работе [Кириллов и др., 2021] интегральная интенсивность полосы Инфракрасной Атмосферной системы I_{1270} варьируется от ~ 1 кРл при $t = 1$ мин до ~ 2 кРл при $t = 30$ мин. Что касается полосы 762 нм, то из профиля ее светимости видно, что на всем рассмотренном интервале высот эффективно гашение $O_2(b^1\Sigma_g^+, v = 0)$. Поэтому рассчитанная интегральная интенсивность данной полосы варьируется от $I_{762} \sim 2.3$ Рл для GLE65 до $I_{762} \sim 58$ Рл для GLE69.

В таблице 1 представлены рассчитанные интенсивности всех рассмотренных полос молекулярного азота и молекулярного кислорода во время событий GLE65, GLE67, GLE69, GLE70.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании моделей электронной кинетики триплетных и синглетных состояний молекулярного азота и синглетных состояний молекулярно-

Таблица 1. Рассчитанные интегральные интенсивности полос молекулярного азота и молекулярного кислорода во время событий GLE65, GLE67, GLE69, GLE70

Эмиссии	GLE65	GLE67	GLE69	GLE70
337 нм	350*	3900	8900	6700
749 нм	11	120	290	190
669 нм	5.0	53	83	130
146 нм	1.6×10^{-3}	1.6×10^{-2}	4.1×10^{-2}	2.6×10^{-2}
135 нм	2.5×10^{-3}	2.5×10^{-2}	6.3×10^{-2}	3.9×10^{-2}
762 нм	2.3	22	58	35
1270 нм	73	760	1900	1200

Примечание. * – в Рэлеях.

го кислорода для средней атмосферы Земли, представленных в публикациях [Кириллов и Белаховский, 2020а, б; Кириллов и др., 2021; Kirillov and Belakhovsky, 2019, 2021], проведен расчет профилей интенсивностей полос первой и второй положительных систем N_2 , полос Лаймана–Бирджа–Хопфилда N_2 , Инфракрасной Атмосферной и Атмосферной систем O_2 в случае высыпания в атмосферу Земли высокоэнергичных протонов во время событий GLE65 (28 октября 2003 г.), GLE67 (02 ноября 2003 г.), GLE69 (20 января 2005 г.), GLE70 (13 декабря 2006 г.) 23-го солнечного цикла (1997–2009 гг.). Для рассмотренных GLE 23-го солнечного цикла поток частиц достигает атмосферы в полярных и средних широтах, а в отдельных событиях — и на экваторе. При этом в связи с геомагнитным обрезанием медленная компонента КЛ может достигнуть атмосферы только в полярных и приполярных областях.

Расчеты показали, что практически на всем рассматриваемом интервале высот 20–80 км имеется значительный вклад процессов гашения состояний $V^3\Pi_g$ и $a^1\Pi_g$ (N_2) при молекулярных столкновениях. 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.

БЛАГОДАРНОСТИ

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 аэронавигация. Т. 60. № 1. С. 93–98. 2020а.
- Кириллов А.С., Белаховский В.Б. Свечение полос Лаймана–Бирджа–Хопфилда N_2 в атмосфере Земли во время высыпания высокоэнергичных электронов // Геомагнетизм и аэронавигация. Т. 60. № 6. С. 796–802. 2020б.
- Кириллов А.С., Белаховский В.Б., Маурчев Е.А., Балабин Ю.В., Германенко А.В., Гвоздевский Б.Б. Свечение молекулярного азота и молекулярного кислорода в средней атмосфере Земли во время высыпания высокоэнергичных протонов // Геомагнетизм и аэронавигация. Т. 61. № 6. С. 769–776. 2021.
- Кривоулицкий А.А., Репнев А.И. Воздействие космических факторов на озоносферу Земли. М.: ГЕОС. 382 с. 2009.
- Кривоулицкий А.А., Репнев А.И. Воздействие космических энергичных частиц на атмосферу Земли // Геомагнетизм и аэронавигация. 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 // Известия РАН. Сер. физическая. 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 // Известия РАН. Сер. физическая. Т. 83. № 5. С. 712–716. 2019.
- Русанов В.Д., Фридман А.А. Физика химически активной плазмы. М.: Наука, 415 с. 1984.
- 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., Allison J., Amako K. et al. Geant4 — a simulation toolkit // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. V. 506. Sect. A. P. 250–303. 2003.
- 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 p. 2015.
- Casassa M.P., Golde M.P. Vacuum UV emission by electronically-excited N_2 : The radiative lifetime of the $N_2(a^1\Sigma_u^-)$ state // Chem. Phys. Lett. V. 60. № 2. P. 281–285. 1979.
- 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. № 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. № 5. P. 1005–1107. 1992.
- Khachatryan A., Wouters E.R., Gudipati M.S., Ginter M.L., Copeland R.A. Temperature dependent collisional energy transfer of $N_2(a^1\Pi_g)$ and $a^1\Sigma_u^-$, $v = 0$ and 1) // EOS Trans. AGU. V. 48. № 46. P. F1149–F1150. 2003.
- 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. Geophysicae*. V. 26. № 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. № 13. P. 2164–2174. 2011.
- *Kirillov A.S.* The calculations of quenching rate coefficients of $O_2(b^1\Sigma_g^+, \nu)$ 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 $N_2(C^3\Pi_u, \nu = 0-4)$ 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. № 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. № 2. P. 423–534. 1972.
- *Marinelli W.J., Kessler W.J., Green B.D., Blumberg W.A.M.* Quenching of $N_2(a^1\Pi_g, \nu' = 0)$ by N_2 , O_2 , CO , CO_2 , CH_4 , H_2 , and Ar // *J. Chem. Phys.* V. 90. № 4. P. 2167–2173. 1989.
- *Piper L.G.* Quenching rate coefficients for $N_2(a^1\Sigma_u^-)$ // *J. Chem. Phys.* V. 87. № 3. P. 1625–1629. 1987.
- *Piper L.G.* Energy transfer studies on $N_2(X^1\Sigma_g^+, \nu)$ and $N_2(B^3\Pi_g)$ // *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 / Composition and origin of cosmic rays. Ed. Shapiro M.M. NATO ASI Series (Series C: Mathematical and Physical Sciences). V. 107. P. 1–24. Dordrecht: Springer. 1983.
- *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 $N_2(B^3\Pi_g, \nu = 0)$ and $N_2(W^3\Delta_u, \nu = 0)$ // *Phys. Chem. Chem. Phys.* V. 5. № 24. P. 5392–5398. 2003.
- *Umemoto H., Oku M., Iwai T.* Collisional intersystem crossing of $N_2(a^1\Sigma_u^-)$ to produce triplet-state molecular nitrogen // *J. Chem. Phys.* V.118. № 22. P. 10006–10011. 2003.
- *Vashenyuk E.V., Balabin Yu.V., Gvozdevsky B.B.* Features of relativistic solar proton spectra derived from ground level enhancement events (GLE) modeling // *Astrophys. Space Sci. Trans.* V. 7. № 4. P. 459–463. 2011.