

УДК 519.6

С. А. Ишанов, Л. В. Зинин, Е. В. Зубков, С. В. Мациевский

КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВОЗБУЖДЕННЫЙ МОЛЕКУЛЯРНЫЙ АЗОТ В ИОНОСФЕРНОЙ ПЛАЗМЕ

7

Представлена математическая модель для исследования нестационарных процессов, протекающих в ионосфере и плазмосфере Земли. Она позволяет исследовать динамику взаимодействия заряженной и нейтральной компонент ионосферной плазмы, а также выявить вклад различных процессов в формирование ионосферы. Результаты вычислительного эксперимента указывают на сильную зависимость электронной концентрации от высотного распределения азота. Учет колебательного возбуждения молекулярного азота приводит к заметным вариациям электронной концентрации и температуры на высотах слоя F2 ионосферы и улучшает согласие результатов модельных расчетов вариаций электронной концентрации с экспериментальными данными. Показано, что вклад малых компонент в аэрономические процессы существенен.

The mathematical model for research of the non-stationary processes proceeding in ionosphere and plasmasphere of Earth is presented. This model allows to investigate dynamics of interaction charged and neutral components of ionospheric plasma, and also to reveal a contribution of various processes to formation of ionosphere. Results of computing experiment indicate strong dependence of electronic concentration on high-rise distribution of nitrogen. The accounting of oscillatory excitement of molecular nitrogen leads to noticeable variations of electronic concentration and temperature at ionosphere F2 layer heights and improves a consent of results of model calculations of variations of electronic concentration with experimental data. It is shown that the contribution of small component in aeronomiche processes is essential.

Ключевые слова: математическая модель, нестационарный процесс, ионосфера, плазмосфера, вычислительный эксперимент, электронная концентрация, азот, молекулярный азот, аэродинамика, экспериментальные данные.

Key words: mathematical model, non-stationary process, ionosphere, plasmasphere, computing experiment, electronic concentration, nitrogen, molecular nitrogen, aerodynamics, experimental data.

Введение

Непрерывное возрастание техногенного (химического, электромагнитного) воздействия на ионосферу Земли требует глубокого понимания физико-химических процессов в околоземной плазме, умения прогнозировать возможное поведение этой многокомпонентной среды в различных геофизических условиях.

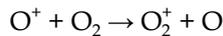


Возмущения естественного и антропогенного происхождения в атмосфере обуславливают образование возбужденных молекул на различных высотах.

Благодаря запасу внутренней энергии и большим сечениям взаимодействия эти компоненты играют заметную роль в кинетике микропроцессов ионосферной плазмы. Влияние колебательно-возбужденного азота $N_2^{(v)}$ на динамику и структуру ионосферы исследовалось в работах [1; 2; 4]. Колебательное возбуждение молекул азота влияет на скорость ионно-молекулярной реакции



которая вместе с реакцией



определяет рекомбинацию заряженных частиц в F2-области.

От распределения молекул азота по колебательным уровням зависит скорость охлаждения электронного газа, а, следовательно, и электронная температура [2].

Цель данной работы состоит в получении высотно-временного распределения концентраций колебательно-возбужденного азота $N_2^{(v)}$ ($v = \overline{1, 10}$) для среднеширотной ионосферы и в изучении его влияния на концентрацию электронов в F-области.

Корректный расчет концентраций $N_2^{(v)}$ возможен на основе совместного решения системы уравнений, описывающей самосогласованную динамику нейтральной, заряженной и колебательно возбужденной компоненты ионосферной плазмы.

1. Нестационарная математическая модель тепловой плазмы в магнитных силовых трубках

Математическая модель [4–7] построена для исследования нестационарных процессов, происходящих в ионосфере и плазмосфере Земли. Модель основана на квазигидродинамическом описании плазмы и позволяет вычислять концентрации, потоковые скорости и температуры основных заряженных составляющих. Модель описывает частично ионизированную плазму, состоящую из свободных электронов, ионов



и нейтральных компонентов



Все параметры среды рассчитываются вдоль силовой линии геомагнитного поля, взятого в дипольном приближении, что позволяет свести уравнения модели к системе нестационарных одномерных уравнений. Силовая линия магнитного поля рассматривается как замкнутая, коротярующая вместе с Землей (модель среднеширотной ионосферы и плазмосферы).



Математическая модель включает уравнения непрерывности, движения и теплового баланса заряженных частиц. Уравнения непрерывности используются в виде

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \frac{1}{A} \frac{\partial A n_\alpha u_\alpha}{\partial s} = Q_\alpha - L_\alpha, \quad (1)$$

где n_α – концентрация заряженных частиц сорта α (индекс α принимает значения O^+ , H^+ , ...); u_α – переносная скорость частиц; L_α – скорость гибели и Q_α – скорость рождения частиц; t – время; s – пространственная координата, отсчитываемая вдоль силовой линии магнитного поля; $A(s)$ – так называемая расходимость силовых линий. В правых частях уравнений учитывается ионизация солнечным ультрафиолетовым излучением, реакции перезарядки и рекомбинации.

Уравнения движения имеют вид

$$\frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial u_\alpha}{\partial s} + \frac{1}{m_\alpha n_\alpha} \frac{\partial P_\alpha}{\partial s} = F_\alpha, \quad (2)$$

здесь m_α – масса частицы сорта α ; P_α – давление, равное $kn_\alpha T_\alpha$, где k – постоянная Больцмана; T_α – температура; F_α – внешняя сила, включающая силу трения, силу тяжести и электрическую силу. Индекс α в уравнении (2) означает сорт положительно заряженного иона, как и в уравнении (1).

В силу предположения о квазинейтральности плазмы электронная концентрация и потоковая скорость электронов вычисляются по формулам

$$N_e = \sum_\alpha n_\alpha, \quad u_e = \frac{\sum n_\alpha u_\alpha}{N_e}.$$

Уравнения теплового баланса используются в модели в виде

$$\frac{3}{2} kn_\alpha \left(\frac{\partial T_\alpha}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial T_\alpha}{\partial s} \right) + \frac{P_\alpha}{A} \frac{\partial A u_\alpha}{\partial s} - \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial s} \left(A \lambda_\alpha \frac{\partial T_\alpha}{\partial s} \right) = \theta_\alpha, \quad (3)$$

где λ_α – коэффициент теплопроводности; θ_α – разность скоростей нагрева и охлаждения частиц сорта α . В уравнении (3) индекс α принимает значения e^- , O^+ , H^+ , ... Правая часть уравнения теплового баланса электронов включает в себя и скорость нелокального нагрева посредством сверхтепловых электронов.

Высотно-временное распределение малых компонентов в предположении, что в рассматриваемой области высот силовая линия совпадает с местной вертикалью, описывается уравнением непрерывности вида (1).

Полное описание коэффициентов уравнений модели ионосферы и плазмосферы, схемы фотохимических реакций, способа построения разностной сетки и других деталей математической модели приведено в [4–6].

В [4–7] описаны различные вычислительные алгоритмы решения уравнений модели. В частности, в [3] показаны границы применимости так называемого диффузионного приближения. В качестве базовых в модели используются неявные разностные схемы. Линеаризованные



уравнения непрерывности и движения для каждого сорта заряженных частиц решаются совместно, при этом пространственные производные аппроксимируются несимметричными конечными разностями. В модели предусмотрен двухступенчатый итерационный процесс, состоящий из итераций по нелинейности, выполняемых отдельно при численном решении уравнений теплового баланса и при решении систем уравнений непрерывности и движения для каждого сорта заряженных частиц, и внешнего итерационного цикла, включающего решение всех уравнений модели на текущем временном шаге.

Построенные таким образом вычислительные алгоритмы устойчивы при достаточно больших шагах интегрирования по времени, что позволяет применять их для исследования ионосферных процессов с характерными временами от нескольких минут до десятков суток.

Нестационарность модели и отсутствие необходимости задания верхних граничных условий позволили использовать ее для изучения различных процессов в ионосферной плазме [4–7].

2. Уравнение непрерывности для колебательно-возбужденного молекулярного азота

Уравнение, описывающее высотно-временное распределение колебательно-возбужденного молекулярного азота $N_2^{(v)}$ для каждого колебательного уровня (v), представим в виде

$$\frac{\partial n_v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(n_v v_{nz}) = -\alpha_v n_v + Q_v, \quad (4)$$

где n_v – концентрация $N_2^{(v)}$ на уровнях $v = 1, \dots, 9$; v_{nz} – вертикальная составляющая скорости молекулярной диффузии; Q_v , α_v – члены, учитывающие образования и потери $N_2^{(v)}$ в фотохимических реакциях (табл.).

Таблица химических реакций колебательно-возбужденного N_2

Реакция	Константа скорости ($\text{см}^3 \text{с}^{-1}$)
$O(^1D) + N_2 \xrightarrow{k_1} N_2^{(v)} + O(^3P)$	$k_1 = 5 \cdot 10^{-11}$
$N(^4S) + NO \xrightarrow{k_2} N_2^{(v)} + O(^3P)$	$k_2 = 3 \cdot 10^{-11}$
$N_2^{(v_1)} + O(^3P) \xrightarrow{k_3} O(^3P) + N_2^{(v_1-1)}$	$k_3 = 1,2 \cdot 10^{-13} \exp(-23/T^{1/3})$
$N_2^{(v_1)} + N_2^{(v_2)} \xleftrightarrow{k_4} N_2^{(v_1-1)} + N_2^{(v_2+1)}$	$k_4 = 3 \cdot 10^{-12}$
$N_2^{(v_1)} + e \xleftarrow{k_5} N_2^{(v_2)} + e$	$k_5 = \exp(P_1 + P_2 + P_3/T_e + P_4/T_e)$
$O^+ + N_2^{(v_1)} \xrightarrow{k_6} NO^+ + N$	$\lg k_6 = a_v + b_v T_n + c_v T_n^2 + d_v - 16$

Примечание. $P_1, P_2, P_3, P_4, a_v, b_v, c_v, d_v$ – коэффициенты [5].



Скорость молекулярной диффузии определяется как

$$v_{nz} = -D \left(\frac{1}{n_v} \frac{\partial n_v}{\partial z} + \frac{1}{T_n} \frac{\partial T_n}{\partial z} + \frac{1}{H} \right), \quad (5)$$

где $H = \frac{kT_n}{mg}$ – шкала высот $N_2^{(v)}$; m – масса молекулы N_2 ; T_n – температура нейтрального газа.

Коэффициент диффузии D не зависит от номера колебательного уровня и рассчитывался по формуле:

$$D_{N_2} = \frac{5 \cdot 10^{18}}{M} \left(\frac{T_n}{300} \right)^{0,75} \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1},$$

11

где M – суммарная концентрация основных нейтральных составляющих в O_2 , N_2 и O .

После подстановки (5) в (4) получим

$$\frac{\partial n_v}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial n_v}{\partial z} + \beta n_v \right) - \alpha_v n_v + Q_v, \quad (6)$$

здесь $\lambda = D$; $\beta = D \left(\frac{1}{T_n} \frac{\partial T_n}{\partial z} + \frac{1}{H} \right)$.

Система уравнений (6) дополняется нижними и верхними граничными условиями. Нижние граничные условия определяются из предположения фотохимического равновесия, а верхние – из условия равенства нулю потока частиц. При решении уравнений (6) использовался потоковый вариант метода прогонки.

Термодинамическая характеристика ионосферной плазмы – колебательная температура $N_2^{(v)}$ рассчитывается по формуле

$$T_v = \frac{\theta}{\ln \left(1 + \frac{\sum_{v=0}^8 N_2^{(v)}}{\sum_{v=1}^8 N_2^{(v)}} \right)},$$

где $\theta = 3390\text{K}$.

Колебательная температура учитывается при определении скорости охлаждения электронного газа при возбуждении колебательных уровней молекул N_2 .

Фотохимические источники и стоки Q_v и α_v для колебательно-возбужденного азота рассчитываются согласно работам [2; 4; 5] с учетом таблицы.

В качестве основных источников $N_2^{(v)}$ приняты: экзотермическая реакция атомарного азота с окисью азота, гашение метастабильных атомов кислорода в состоянии 1D на молекулярном азоте, взаимодействие с атомарным кислородом $O(^3P)$, с тепловыми, быстрыми электронами.

Необходимо отметить, что на высотах порядка 200 км начинает играть роль молекулярная диффузия для $N_2^{(v)}$.



3. Результаты вычислительных экспериментов

По модели NRLMSISE-00 [8] вычислялись концентрации нейтральных компонентов и температура нейтральной атмосферы.

Высотно-временные распределения ионосферных параметров рассчитывались в дипольной системе координат, для средних широт (параметр Мак-Илвейна $L = 3$) для зимних условий, средней солнечной активности ($F_{10.7} = 150$) и высокой солнечной активности ($F_{10.7} = 234$). Другие входные данные брались согласно работам [5–7].

В работе возмущенные условия моделировались путем задания в начальных условиях завышенных значений температур и концентраций относительно фона.

Такие начальные условия могут соответствовать сильной солнечной вспышке или нагреву электронного газа мощным КВ-радиоизлучением.

Уравнения модели интегрировались методом конечных разностей с шагом по времени $\tau = 0,01$ с, затем с временным шагом $\tau = 0,1$ с в диффузионном приближении.

Нижние граничные условия — фотохимическое равновесие.

В качестве возмущенных начальных условий в полдень задавалось высотное распределение концентраций ионов, электронов, малых компонентов и электронной температуры с $T_{e \max} = 1,3$ эВ на высоте 300 км.

На рисунке 1 приводятся полученные на основе модельных расчетов высотные профили электронной T_e и колебательной T_v температур.

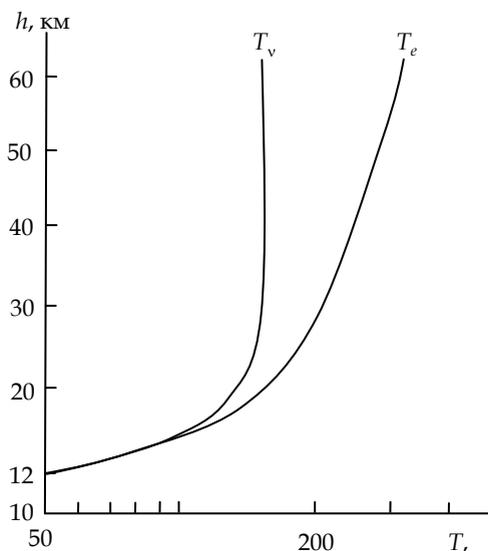


Рис. 1. Высотные профили колебательной T_v и электронной T_e температур для дневных условий в невозмущенной среднеширотной ионосфере



В случае возмущения температура T_v может достигать 3000 К, вклад реакции (R1) в потери ионов O^+ в F2-области заметно увеличивается, что приводит к существенному понижению электронной концентрации.

Важную роль в энергетическом балансе ионосферы играют электронно-возбужденные атомы кислорода $O(^1D)$ и колебательно-возбужденные молекулы азота. На рисунке 2 представлены высотно-временные профили $N_e(h)$. В расчетах электронная концентрация определялась из условия квазинейтральности. Через 30 мин от начала возмущения типа солнечной вспышки электронная концентрация релаксирует к фоновым значениям. На рисунке 3 показаны высотные распределения $O(^1D)$ в зависимости от момента времени.

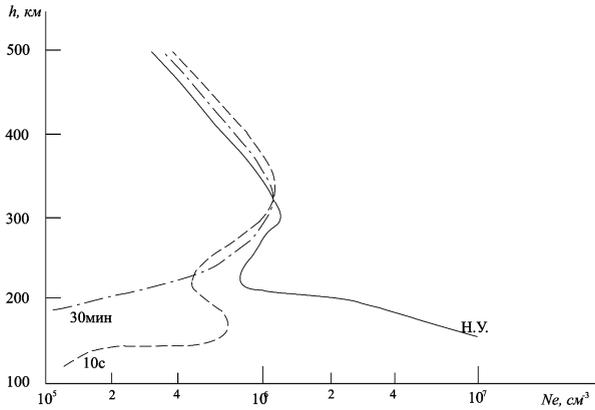


Рис. 2. Высотные профили электронной концентрации N_e в различные моменты времени

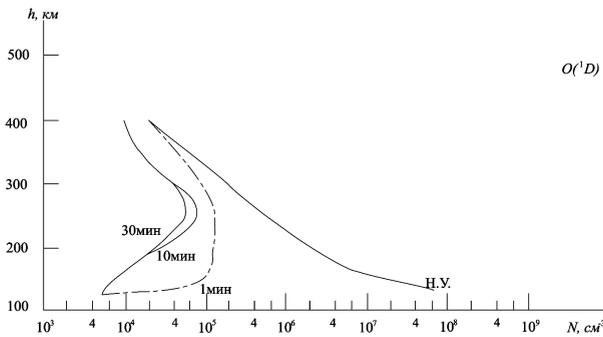


Рис. 3. Высотные профили концентрации $O(^1D)$ в различные моменты времени

В качестве основных источников для $O(^1D)$ взяты: диссоциативная рекомбинация O_2^+ , соударения фотоэлектронов с атомным кислородом $O(^3P)$, реакция взаимодействия $N(^2D)$ с O_2 . Переход атомарного кислорода $O(^1D)$ в основное состояние дает красную линию $\lambda = 6300 \text{ \AA}$ и $\lambda = 6364 \text{ \AA}$.

Время установления концентрации $O(^1D)$ от начальных условий до фоновых значений составляет 30–40 минут.

На рисунке 4 показано высотно-временное распределение колебательно-возбужденного азота на первом колебательном уровне.

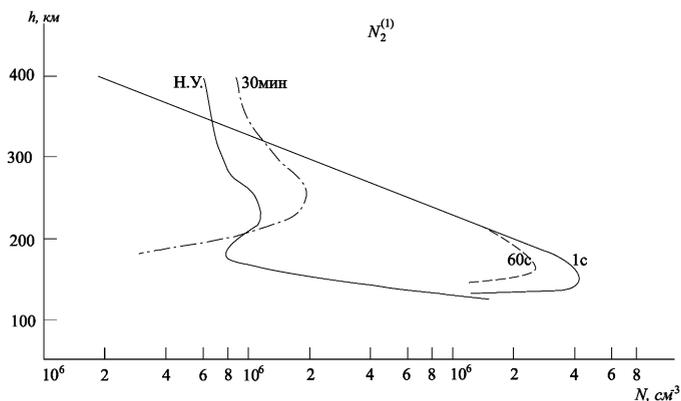


Рис. 4. Высотные профили распределения концентрации колебательно-возбужденного азота $N_2^{(v)}$ на первом уровне

В начальные моменты времени и до 30 мин сохраняются достаточно высокие концентрации $N_2^{(1)}$ относительно фоновых значений.

Заключение

Представленная модель позволяет исследовать динамику взаимодействия заряженной и нейтральной компонент ионосферной плазмы, а также выявить вклад различных процессов в формирование ионосферы.

Результаты решения рассмотренной модельной задачи могут быть использованы для интерпретации существующих экспериментальных данных как по концентрации, так и по интенсивности свечения метастабильных компонент.

Результаты вычислительного эксперимента указывают на сильную зависимость электронной концентрации от высотного распределения $N_2^{(v)}$.

Учет колебательного возбуждения молекулярного азота приводит к достаточно заметным вариациям электронной концентрации и температуры на высотах слоя F2 ионосферы.

Например, при потоке солнечного радиоизлучения $F_{10.7} = 234$ летом в полуденное время концентрация N_m F2-области уменьшается в 1,7 раза.

Показано, что вклад малых компонент в аэрономические процессы существенен. Учет зависимости скорости ионно-молекулярной реакции (R1) от колебательных состояний молекулярного азота улучшает согласие результатов модельных расчетов вариаций электронной концентрации с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ по проекту № 14-01-00020а.

Список литературы

1. Павлов А. В., Намгалдзе А. А. Колебательно-возбужденный молекулярный азот в верхней атмосфере // Геомагнетизм и аэрономия. 1988. Т. 28, № 5. С. 705–721.
2. Pavlov A. V. The role of vibrationally excited nitrogen in the formation of the mid-latitude ionization through // *Ann. Geophys.* 1993. Vol. 11. P. 479–484.



3. Власов М. Н., Григорьев С. А., Ишанов С. А. и др. Сравнительный анализ различных гидродинамических приближений для описания ионосферно-магнитосферной плазмы // Космические исследования. 1991. Т. 29, № 3. С. 404 – 413.

4. Medvedev V. V., Ishanov S. A., Zenkin V. I. Effect of vibrationally excited nitrogen on recombination in ionosphere plasma // Geomagnetism and Aeronomy. 2003. Vol. 43, № 2. С. 248 – 255.

5. Ишанов С. А., Медведев В. В. Математическое моделирование метастабильных компонентов в ионосфере Земли // Инженерно-физический журнал. Национальная Академия наук Беларуси. 2005. Т. 78, № 6. С. 26 – 33.

6. Власов М. Н., Ишанов С. А., Григорьев С. А. Моделирование эффектов динамических возмущений плотности и температуры ионосферно-магнитосферной плазмы на плазмосферных высотах // Космические исследования. 1997. Т. 35, № 3. С. 248 – 252.

7. Ишанов С. А., Леванов Е. И., Медведев В. В. и др. Магнитосферно-ионосферные изменения, вызванные полетами космических аппаратов // Инженерно-физический журнал. 2006. Т. 79, № 6. С. 11 – 15.

8. Picone J. M., Hedin A. E., Drob D. P. et al. NRLMSISE-00 empirical model of the atmosphere: statistical comparisons and scientific issues // J. Geophys. Res. 2002. Vol. 107, NA 12. P. 1468–1483.

Об авторах

Сергей Александрович Ишанов – д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канга, Калининград.

E-mail: sergey.ishanov@ya.ru

Леонид Викторович Зинин – д-р физ.-мат. наук, проф., Балтийский федеральный университет им. И. Канга, Калининград.

E-mail: keonid.zinin@gmail.com

Евгений Вячеславович Зубков – асп., Балтийский федеральный университет им. И. Канга, Калининград.

E-mail: evgenyzubkov@mail.ru

Сергей Валентинович Мациевский – канд. физ.-мат. наук, доц., Балтийский федеральный университет им. И. Канга, Калининград.

E-mail: matsievsky@newmail.ru

About the authors

Prof. Sergey Ishanov – I. Kant Baltic Federal University, Kaliningrad.

E-mail: sergey.ishanov@ya.ru

Prof. Leonid Zinin – I. Kant Baltic Federal University, Kaliningrad.

E-mail: keonid.zinin@gmail.com

Evgeny Zubkov – PhD student, I. Kant Baltic Federal University, Kaliningrad.

E-mail: evgenyzubkov@mail.ru

Dr Sergey Matsievsky – Ass. Prof., I. Kant Baltic Federal University, Kaliningrad.

E-mail: matsievsky@newmail.ru