

УДК 546.17 – 124 : 537.67.001.891.57

Эффекты учёта колебательных состояний молекулярного азота при численном моделировании поведения F2-области ионосферы Земли в период сильных магнитных бурь

Ю.В. Зубова, А.А. Намгаладзе

Политехнический факультет МГТУ, кафедра физики

Аннотация. В работе проводится исследование влияния учёта зависимости скорости ионно-молекулярной реакции переработки ионов O^+ в молекулярные ионы от колебательных состояний молекулярного азота на результаты модельных расчётов вариаций электронной концентрации и температуры на высотах F2-слоя в период 15-20 апреля 2002 года, включавший две геомагнитные бури. Результаты численных расчётов, выполненных с помощью модели UAM, сопоставлялись с данными наблюдений, полученными сетью радаров некогерентного рассеяния радиоволн. Сделан вывод о том, что учёт зависимости скорости реакции O^+ с N_2 от распределения молекул азота по колебательным уровням улучшает согласие результатов модельных версий как с данными наблюдений, так и между собой.

Abstract. In the work the authors have investigated how the variations of the F2-layer electron density and temperature numerically calculated for the period of April 15-20, 2002 including two geomagnetic storms depend on the $O^+ + N_2$ reaction rate taking into account the vibrationally excited molecular nitrogen. The results of numerical calculations performed using the Upper Atmosphere Model have been compared with the observation data obtained by the incoherent scatter radars. The conclusion has been made that ignoring the vibrationally excited molecular nitrogen by the numerical calculations worsens the agreement of model versions both with the observation data and with each other.

Ключевые слова: численное моделирование, ионосфера Земли, геомагнитные бури, ионосферно-термосферное взаимодействие, колебательное возбуждение молекулярного азота, концентрация и температура электронов

Key words: numerical modelling, the Earth ionosphere, geomagnetic storms, ionospheric-thermospheric interconnection, vibrationally excited molecular nitrogen, concentration and temperature of electrons

1. Введение

Главным химическим механизмом потерь доминирующих в F2-области ионов O^+ является их реакция с молекулярным азотом N_2 ($O^+ + N_2 \rightarrow NO^+ + O$). Скорость этой реакции зависит как от кинетических температур реагентов, так и от распределения молекул азота по колебательным уровням, характеризующегося колебательной температурой в случае бальмовского распределения. Кроме того, степень заселённости колебательных уровней N_2 влияет на скорость охлаждения электронного газа, а следовательно, и на электронную температуру (Павлов, Намгаладзе, 1988).

Сложность оценок скоростей реакций атмосферных газов с ионизованными компонентами заключается в том, что в лабораторных условиях практически невозможно воссоздать такие же состояния среды, которые наблюдаются в верхней атмосфере. Поэтому разными авторами были предложены в той или иной степени отличные друг от друга формулы зависимости скорости реакции ионов O^+ с N_2 для различных диапазонов температур реагентов (Schmeltkopf et al., 1968; McFarland et al., 1973; Albritton et al., 1977; St.-Maurice, Torr, 1978; Hierl et al., 1997). Самосогласованная оценка скорости реакции ионов O^+ с N_2 и полного потока крайнего ультрафиолетового солнечного излучения проводилась с использованием данных наблюдений, например, радаров некогерентного рассеяния радиоволн (Mikhailov, Schlegel, 2000).

Роль колебательного возбуждения молекул азота в поведении различных областей ионосферы в различных гелио-геофизических условиях изучалась, в том числе, и методом численного моделирования (Намгаладзе и др., 1981; Павлов, 1988; Richards et al., 1994; Korenkov et al., 1996; Павлов, Buonsanto, 1996; Jenkins et al., 1997; Korenkov et al., 1998; Павлов, Foster, 2001).

Настоящая работа преследовала цель изучить, насколько влияет учёт колебательного возбуждения молекул азота на результаты численного моделирования поведения F2-области ионосферы, проводимого с помощью глобальной численной модели верхней атмосферы Земли UAM. Данное исследование проведено с использованием данных измерений концентрации и температуры электронов для периода апрельских бурь 2002 года, в течение которого сразу семь радаров некогерентного рассеяния практически одновременно наблюдали за вариациями ионосферных параметров на высотах F-области.

Таким образом, результаты глобальной численной модели верхней атмосферы сопоставлялись с большим массивом данных наблюдений для всего диапазона широт Северного полушария.

2. Модель

Настоящее исследование проведено с использованием глобальной численной модели верхней атмосферы Земли (Upper Atmosphere Model – UAM). Модель была первоначально создана в Калининградской обсерватории ИЗМИРАН (*Намгаладзе и др.*, 1990) и позже модифицирована в Полярном геофизическом институте и в Мурманском государственном техническом университете для изучения высокоширотных явлений (*Namgaladze et al.*, 1998).

В модели UAM поведение многокомпонентной околоземной плазмы описывается нестационарными трёхмерными квазигидродинамическими уравнениями непрерывности, движения и теплового баланса для нейтрального, ионного и электронного газов совместно с уравнением для потенциала электрического поля:

$$\partial n_\alpha / \partial t + \nabla(n_\alpha \cdot V_\alpha) = Q_\alpha - L_\alpha, \quad \alpha = n, i, e, \quad (1)$$

$$\rho_\alpha [dV_\alpha / dt + \Omega \times (\Omega \times r) + 2 \Omega \times V_\alpha] = F_\alpha, \quad \rho_\alpha = m_\alpha \cdot n_\alpha, \quad (2)$$

$$\rho_\alpha c_{v\alpha} dT_\alpha / dt + p_\alpha \nabla V_\alpha = \nabla(\lambda_\alpha \nabla T_\alpha) + P_{Q\alpha} - P_{L\alpha} + P_{T\alpha}, \quad p_\alpha = n_\alpha k T_\alpha, \quad (3)$$

$$\nabla j = 0, \quad j = \sigma(E + V_n \times B) + j_m, \quad (4)$$

где индексы n, i, e обозначают нейтральный, ионный и электронный газы, соответственно; $n_\alpha, Q_\alpha, L_\alpha$ – концентрация, скорость образования и скорость потерь α -газа; V_α – вектор среднемассовой скорости α -газа относительно вращающейся Земли; Ω – вектор угловой скорости вращения Земли; r – радиус-вектор от центра Земли до точки применения уравнения; $m_\alpha, \rho_\alpha, F_\alpha$ – масса одной частицы, массовая плотность и сила, действующая на единицу объема α -газа, соответственно; $c_{v\alpha}, \lambda_\alpha, T_\alpha$ – удельная теплоемкость при постоянном объеме, теплопроводность и температура α -газа, соответственно; p_α – давление α -газа; $P_{Q\alpha}, P_{L\alpha}$ – скорости нагрева и охлаждения α -газа; $P_{T\alpha}$ – теплообмен между α -газом и другими газами, которые могут нагревать или охлаждать α -газ в зависимости от разницы температур между α -газом и другими газами; σ – тензор ионосферной проводимости, E – вектор напряженности электрического поля; B – вектор магнитной индукции; j_m – плотность магнитосферного тока.

Набор физических параметров, моделируемых с помощью UAM, включает концентрации основных нейтральных (O, O₂, N₂, H) и заряженных (O₂⁺, NO⁺, O⁺, H⁺, электроны) компонент верхней атмосферы; температуры нейтрального газа, ионов и электронов; компоненты векторов скорости нейтральных и заряженных частиц; потенциал и компоненты вектора напряженности электрического поля.

Помимо теоретического расчёта состава и температуры термосферы, скоростей термосферного ветра и ионосферных параметров, в модели можно использовать в качестве её составных частей эмпирические модели, например, модель термосферы MSIS (*Picone et al.*, 2002), модель горизонтальных нейтральных ветров HWM (*Hedin et al.*, 1996) и модель ионосферы IRI (*Bilitza*, 2001).

3. Численные эксперименты

В предыдущих работах (*Namgaladze et al.*, 2006) нами обсуждались результаты сопоставления электронной концентрации, ионной и электронной температур F2-слоя, рассчитанных с помощью модели UAM для периода 15-20 апреля 2002 года, с данными радаров некогерентного рассеяния радиоволн и эмпирической модели ионосферы IRI-2001. Было показано, что в целом результаты теоретических расчётов по модели UAM не противоречат радарным наблюдениям и воспроизводят характерные особенности поведения ионосферы во время геомагнитных возмущений.

При проведении исследования (*Namgaladze et al.*, 2006) в модели UAM не учитывалась зависимость скорости реакции O⁺ + N₂ от распределения молекул азота по колебательным уровням. Однако при высокой солнечной активности эффекты колебательного возбуждения молекул азота становятся значительными (*Ennis et al.*, 1995). С целью оценить, насколько влияет на результаты теоретических расчётов ионосферных параметров учёт колебательного возбуждения молекулярного азота, нами было проведено численное моделирование поведения электронной концентрации и температуры на высотах F2-слоя в тот же период 15-20 апреля 2002 года с использованием описанных ниже формул.

В обзорной статье (*Павлов, Намгаладзе*, 1988) приведена следующая формула для расчёта коэффициента $\beta^* = \beta(O^+, N_2)$ скорости реакции O⁺ + N₂ → NO⁺ + N с учётом колебательно-возбуждённого молекулярного азота N₂^{*}:

$$\beta^* = \sum_{i=0}^{\infty} (k_i n_i / \Sigma n_i), \quad (5)$$

где k_i – это коэффициент скорости реакции для i -го возбуждённого уровня N_2 с концентрацией n_i ; k_0 – коэффициент без учёта N_2^* (St.-Maurice, Torr, 1978). Коэффициенты k_i для колебательных уровней рассчитываются по формуле:

$$k_i = A_i T_n + B_i, \quad (6)$$

где T_n – температура нейтрального газа, а коэффициенты A_i и B_i для первых пяти колебательных уровней приведены в таблице.

Таблица

i	1	2	3	4	5
$A_i, \text{см}^3/(\text{К}\cdot\text{с})$	$3.39 \cdot 10^{-15}$	$2.23 \cdot 10^{-14}$	$3.02 \cdot 10^{-14}$	$-2.74 \cdot 10^{-14}$	$-3.84 \cdot 10^{-15}$
$B_i, \text{см}^3/\text{с}$	$3.72 \cdot 10^{-13}$	$3.09 \cdot 10^{-11}$	$1.92 \cdot 10^{-10}$	$2.90 \cdot 10^{-10}$	$5.85 \cdot 10^{-11}$

Для случая больцмановского распределения:

$$n_i / \Sigma n_i = (1 - \exp(-3353/T_v)) \cdot \exp(-3353 \cdot i/T_v), \quad i \geq 1, \quad (7)$$

где T_v – колебательная температура N_2^* . Результаты численных экспериментов (Павлов, 1985; Richards, Torr, 1986) показали, что на высотах максимума F2-слоя колебательная температура превышает температуру нейтрального газа не более чем на 300 К.

В настоящей работе модельные расчёты были выполнены в следующих четырёх вариантах:

- 1) с расчётом состава и температуры термосферы по модели NRLMSISE-00 (Picone et al., 2002) – далее MSISE, с коэффициентом реакции $\beta^* = \beta(O^+, N_2)$ без учёта колебательно-возбуждённого N_2^* (обозначен как UAM(MSISE));
- 2) то же, что и в первом варианте, но с коэффициентом реакции $\beta^* = \beta(O^+, N_2)$, учитывающим первые четыре колебательных уровня N_2^* в соответствии с формулами (5-7) (обозначен как UAM(MSISE)+ N_2^*);
- 3) с полностью теоретическим расчётом параметров термосферы и ионосферы с коэффициентом реакции $\beta^* = \beta(O^+, N_2)$ без учёта N_2^* (обозначен как (UAM(TM)));
- 4) то же, что и в третьем варианте, но с учётом первых четырёх колебательных уровней N_2^* по формулам (5-7) (обозначен как UAM(TM)+ N_2^*).

Начальные условия для всех вариантов были одинаковыми и представляли собой распределения параметров верхней атмосферы, полученные по модели UAM для 24 UT 14 апреля в ходе расчёта с составом и температурой термосферы по модели MSISE. Границы аврорального овала, потоки высвобождающихся электронов и разность электрических потенциалов поперёк полярной шапки задавались по аппроксимированным данным спутников серии DMSP. Коэффициент отношения колебательной температуры к температуре нейтралов был выбран равным 1.25 согласно работе (Korenkov et al., 1996).

Отметим, что модельные расчёты с учётом первых пяти колебательных уровней N_2^* показали, что разница в значениях электронной концентрации, обусловленная учётом первых четырёх или первых пяти колебательных уровней при расчетах скорости реакции $\beta^* = \beta(O^+, N_2)$, составляет порядка нескольких процентов.

Временные вариации концентрации (N_e) и температуры (T_e) электронов над станциями некогерентного рассеяния на высоте вблизи максимума F2-слоя (около 350 км), полученные в каждом из четырёх вариантов теоретических расчётов, представлены на рис. 1-14 в сравнении с данными наблюдений.

4. Обсуждение результатов и выводы

Как видно из рисунков, все варианты расчётов в той или иной степени демонстрируют отрицательный эффект магнитных бурь – падение электронной концентрации от 15 к 18 апреля. Учёт колебательного возбуждения молекул N_2 значительно меняет ход временных вариаций электронной концентрации как в варианте с MSISE, так и в варианте с теоретическим расчётом состава и температуры термосферы. Учёт N_2^* ведёт к уменьшению примерно в два раза значений N_e в течение суток (за исключением ночных часов над Миллстоун Хиллом). Это значительно улучшает согласие с наблюдениями варианта со MSISE, который с коэффициентом без учёта колебательного возбуждения N_2^* даёт самые высокие значения N_e . Исключение составляет станция EISCAT. Кроме того, из рисунков видно, что если варианты UAM(MSISE) и UAM(TM) без учёта N_2^* дают сильно отличающиеся значения электронной концентрации, то при включении N_2^* разница в результатах сокращается в несколько раз.

Электронная концентрация над Аресибо, 10^{12} м^{-3}

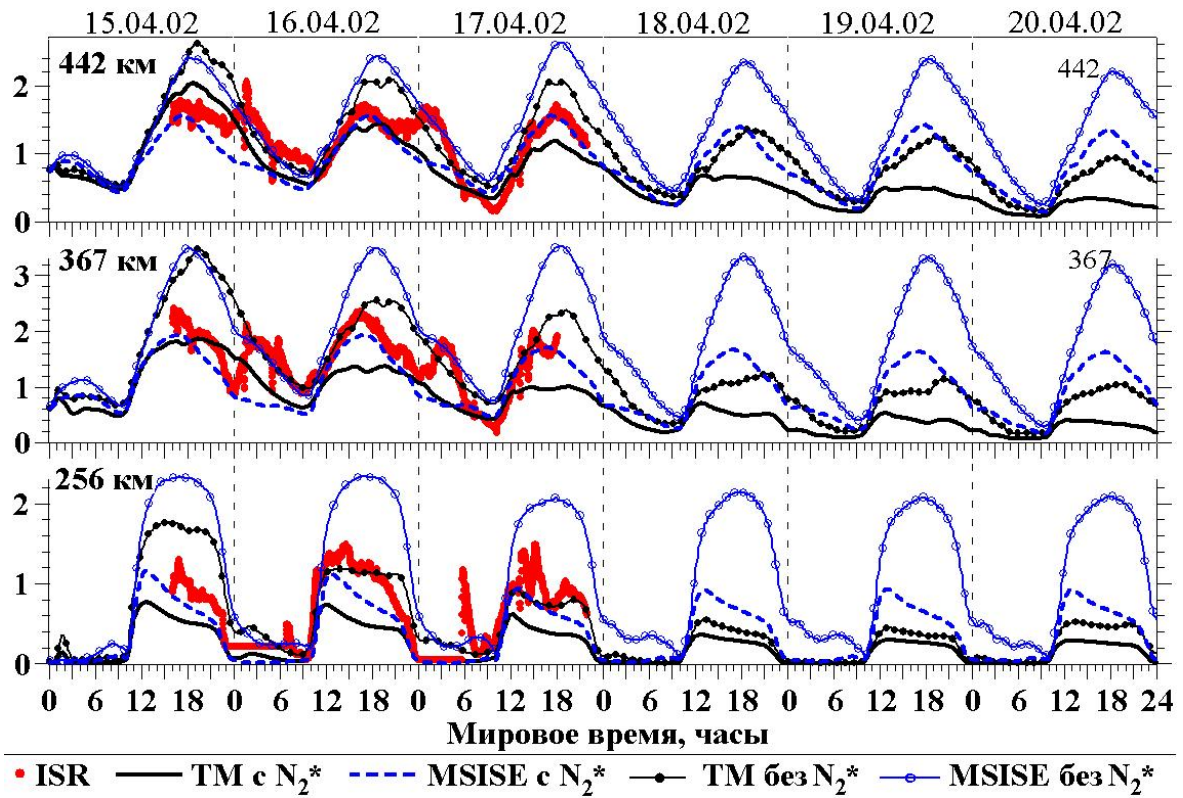


Рис. 1. Вариации электронной концентрации на трёх высотах над Аресибо, рассчитанные разными версиями модели UAM для 15-20 апреля 2002 года в сравнении с данными наблюдений

Электронная температура над Аресибо, К

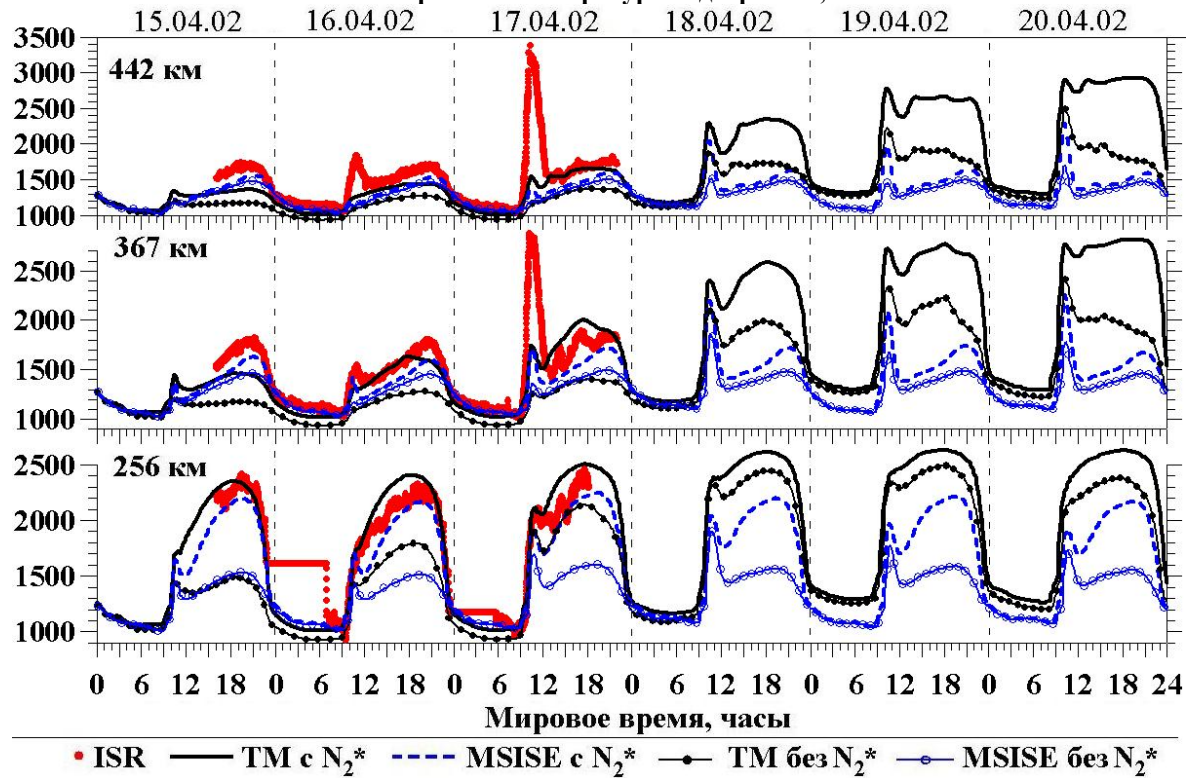


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для электронной температуры

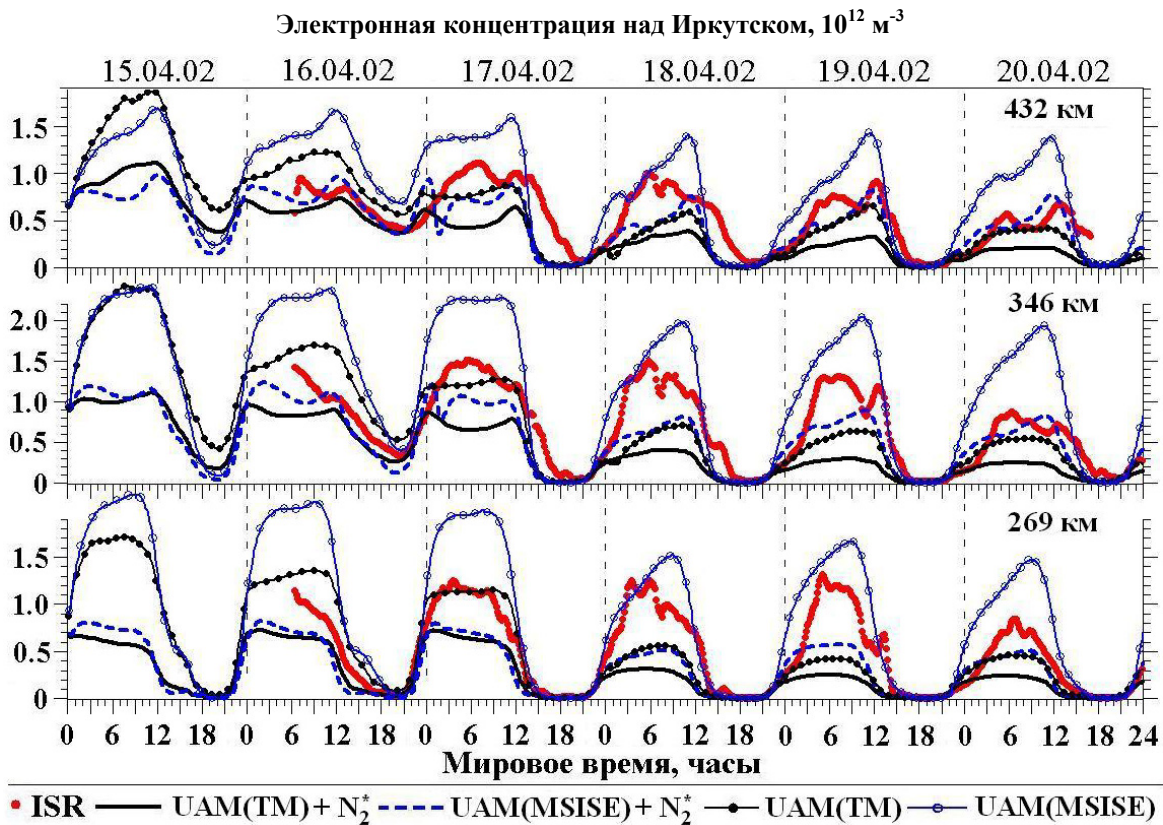


Рис. 3. Вариации электронной концентрации на трёх высотах над Иркутском, рассчитанные разными версиями модели UAM для 15-20 апреля 2002 года в сравнении с данными наблюдений

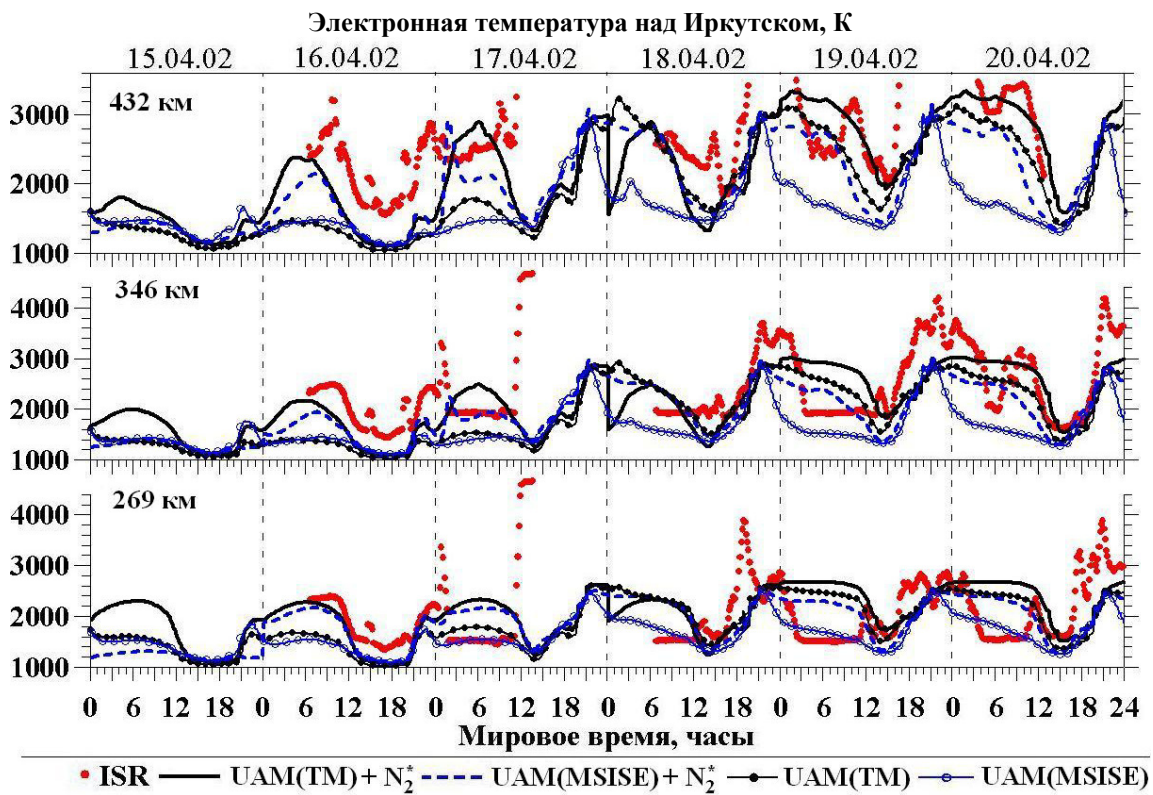


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, но для электронной температуры

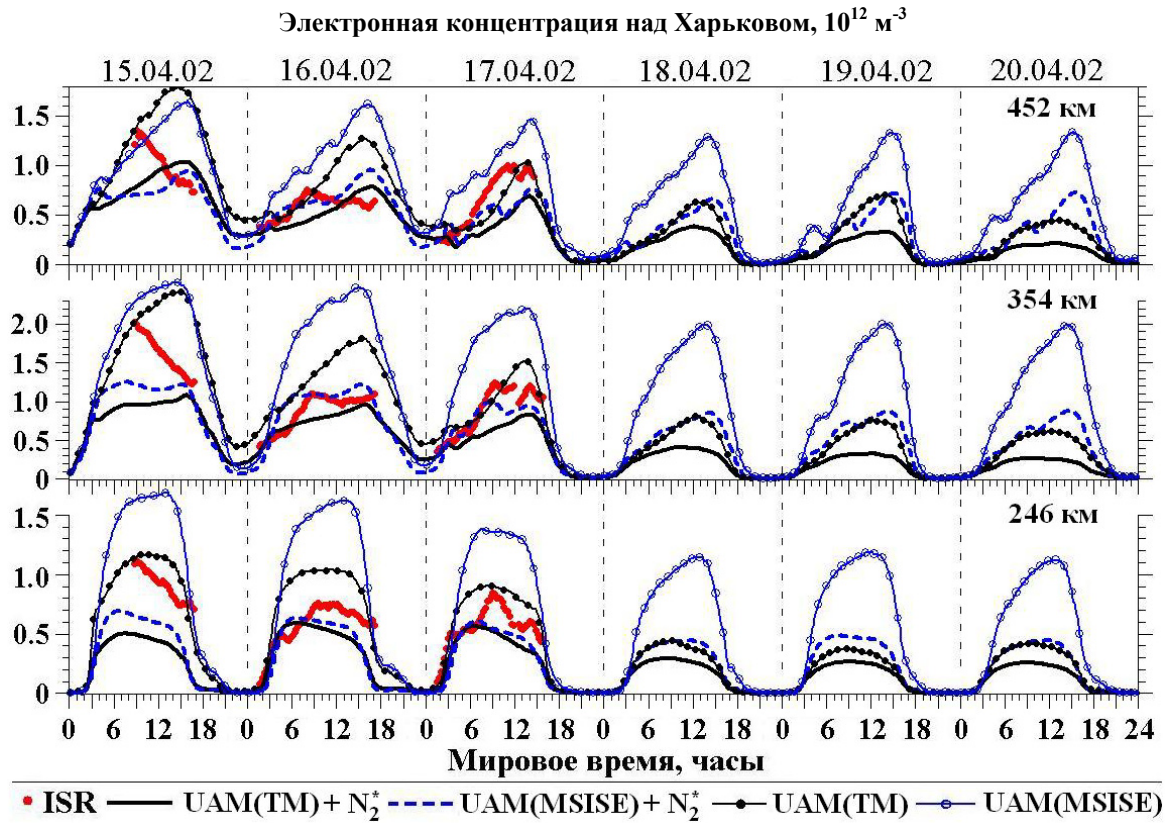


Рис. 5. Вариации электронной концентрации на трёх высотах над Харьковом, рассчитанные разными версиями модели UAM для 15-20 апреля 2002 года в сравнении с данными наблюдений

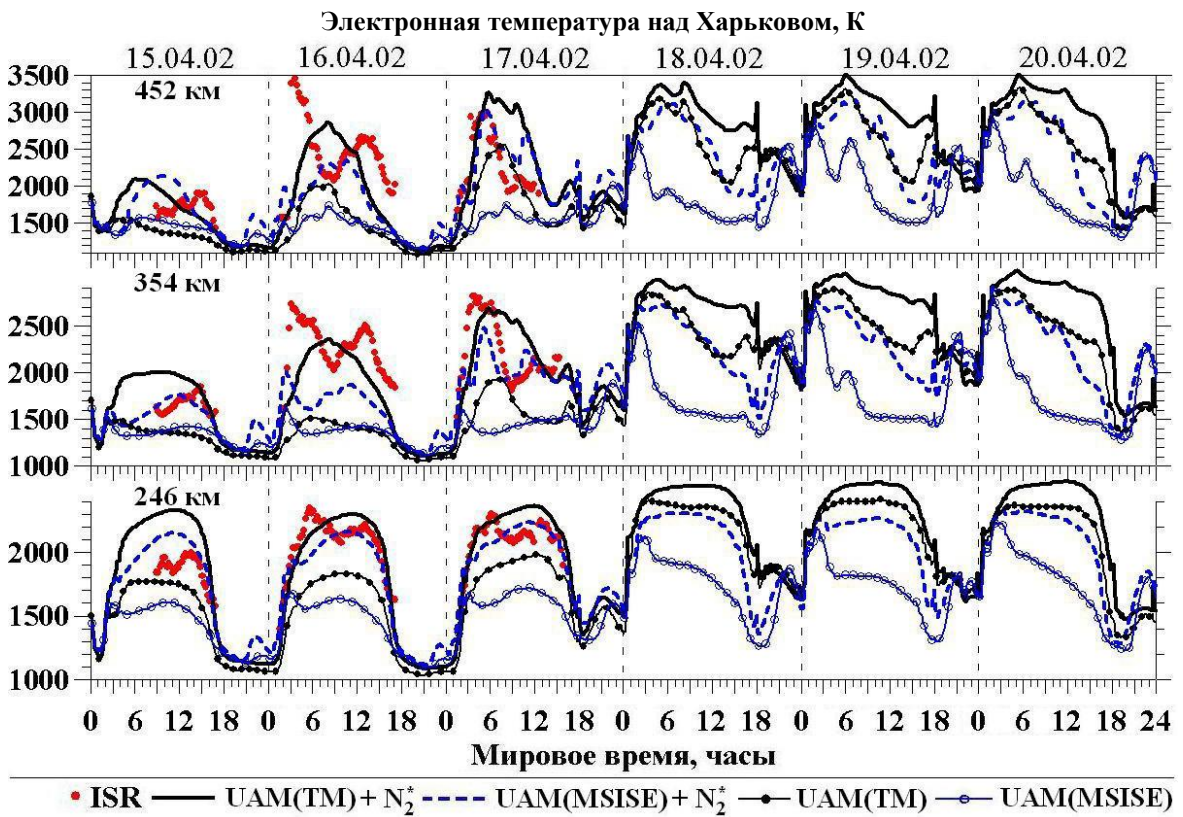
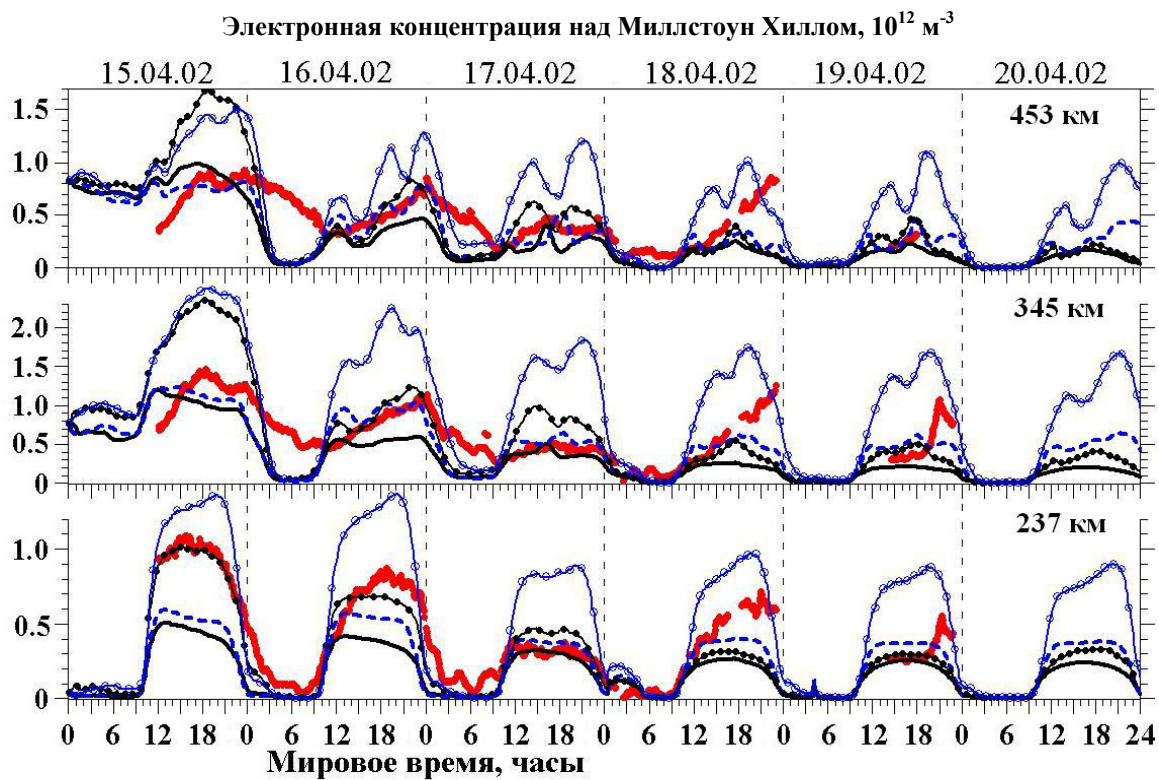
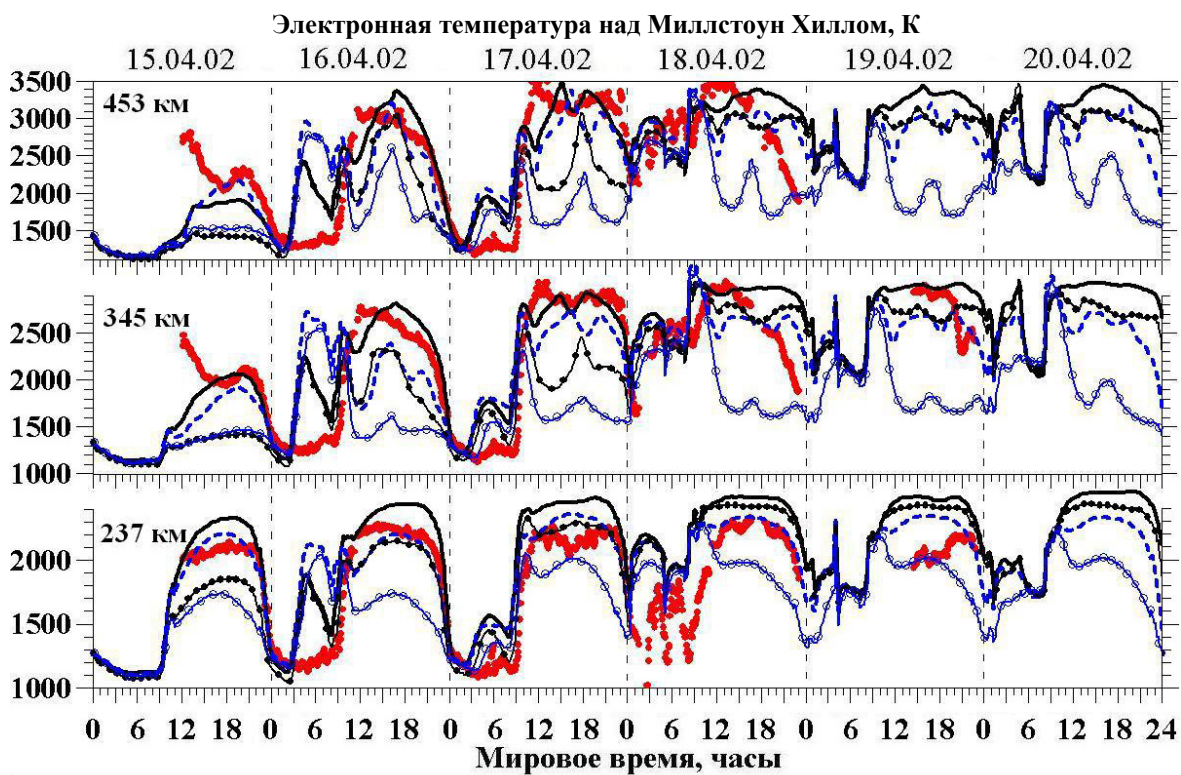


Рис. 6. То же, что и на рис. 5, но для электронной температуры



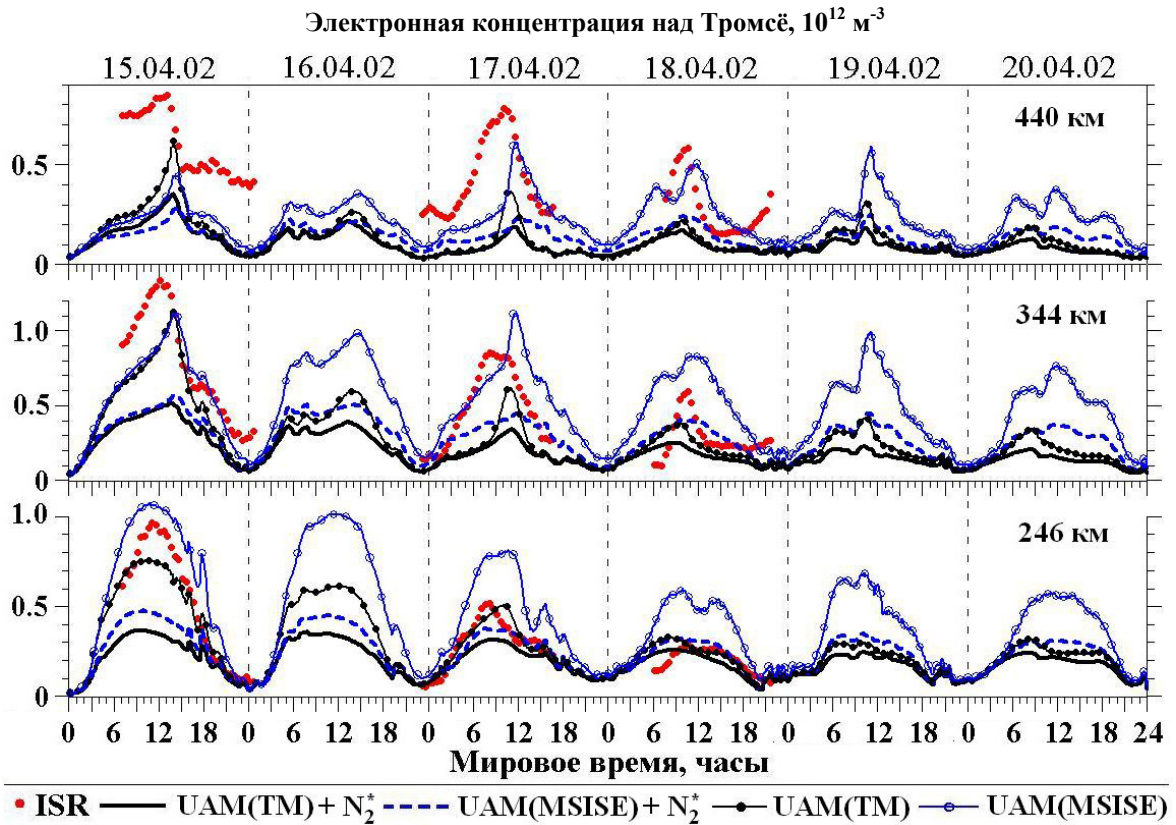
• ISR — UAM(TM)+N₂⁺ — UAM(MSISE)+N₂⁺ — UAM(TM) — UAM(MSISE)

Рис. 7. Вариации электронной концентрации на трёх высотах над Миллстоун Хиллом, рассчитанные разными версиями модели UAM для 15-20 апреля 2002 года в сравнении с данными наблюдений



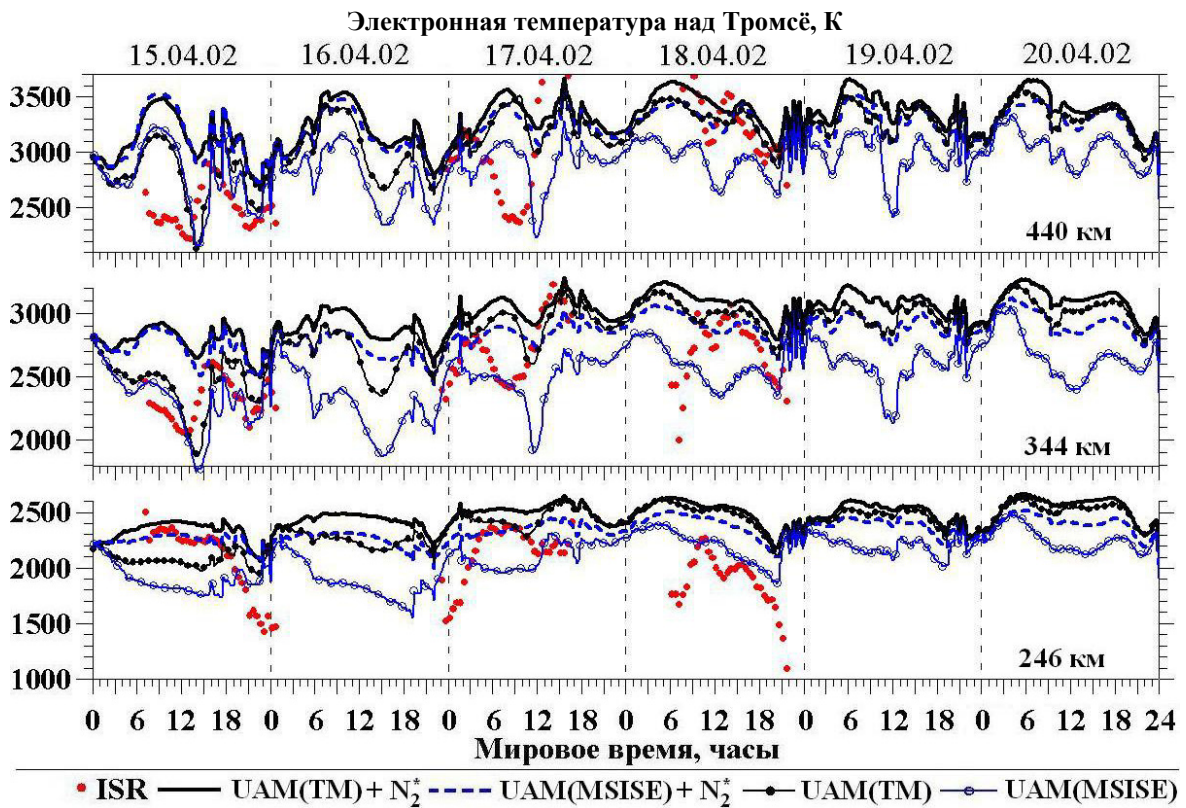
• ISR — UAM(TM)+N₂⁺ — UAM(MSISE)+N₂⁺ — UAM(TM) — UAM(MSISE)

Рис. 8. То же, что и на рис. 7, но для электронной температуры



• ISR — UAM(TM) + N₂⁺ — UAM(MSISE) + N₂⁺ — UAM(TM) — UAM(MSISE)

Рис. 9. Вариации электронной концентрации на трёх высотах над Тромсё, рассчитанные разными версиями модели UAM для 15-20 апреля 2002 года в сравнении с данными наблюдений



• ISR — UAM(TM) + N₂⁺ — UAM(MSISE) + N₂⁺ — UAM(TM) — UAM(MSISE)

Рис. 10. То же, что и на рис. 9, но для электронной температуры

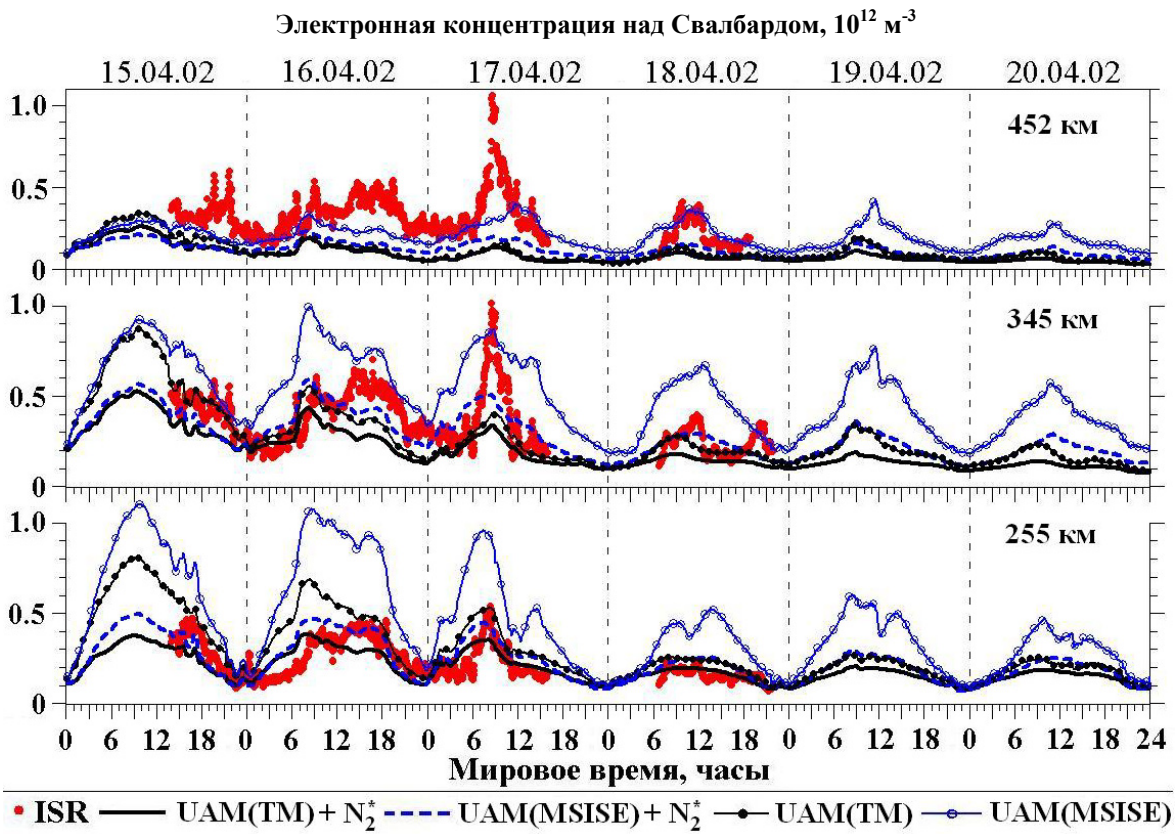


Рис. 11. Вариации электронной концентрации на трёх высотах над Свалбардом, рассчитанные разными версиями модели UAM для 15-20 апреля 2002 года в сравнении с данными наблюдений

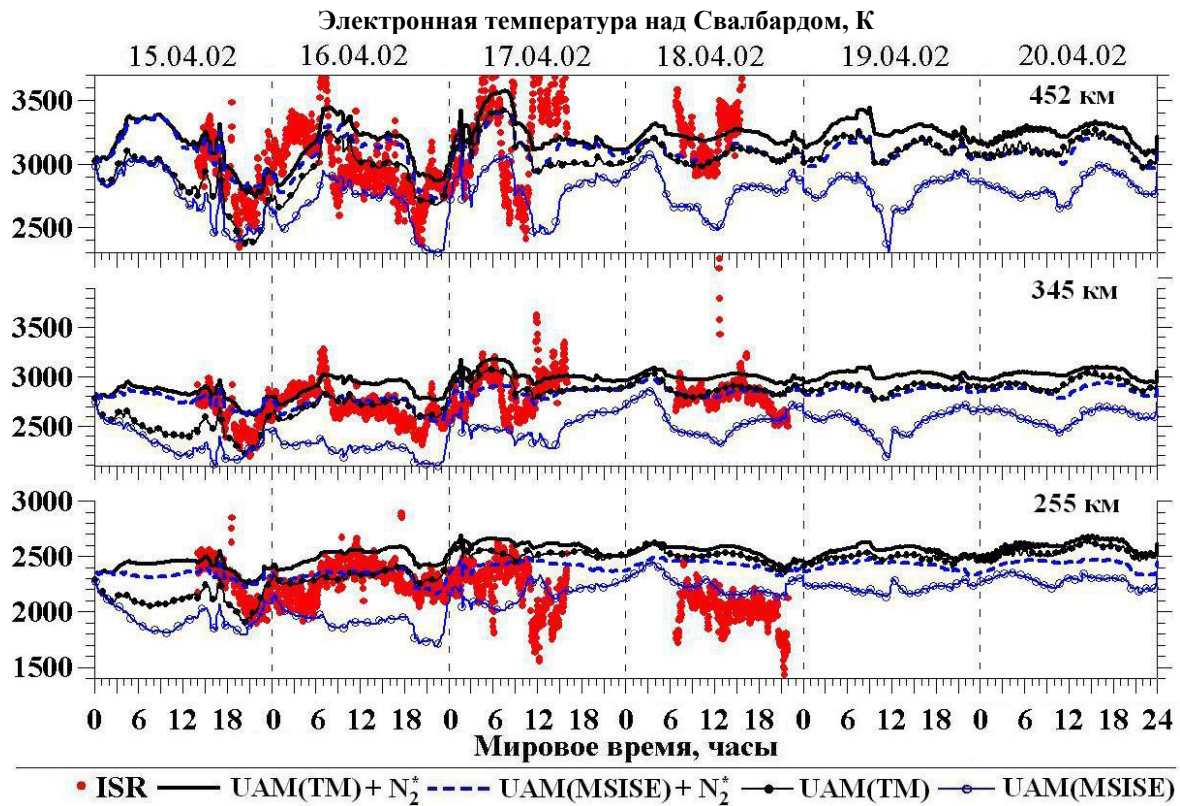


Рис. 12. То же, что и на рис. 11, но для электронной температуры

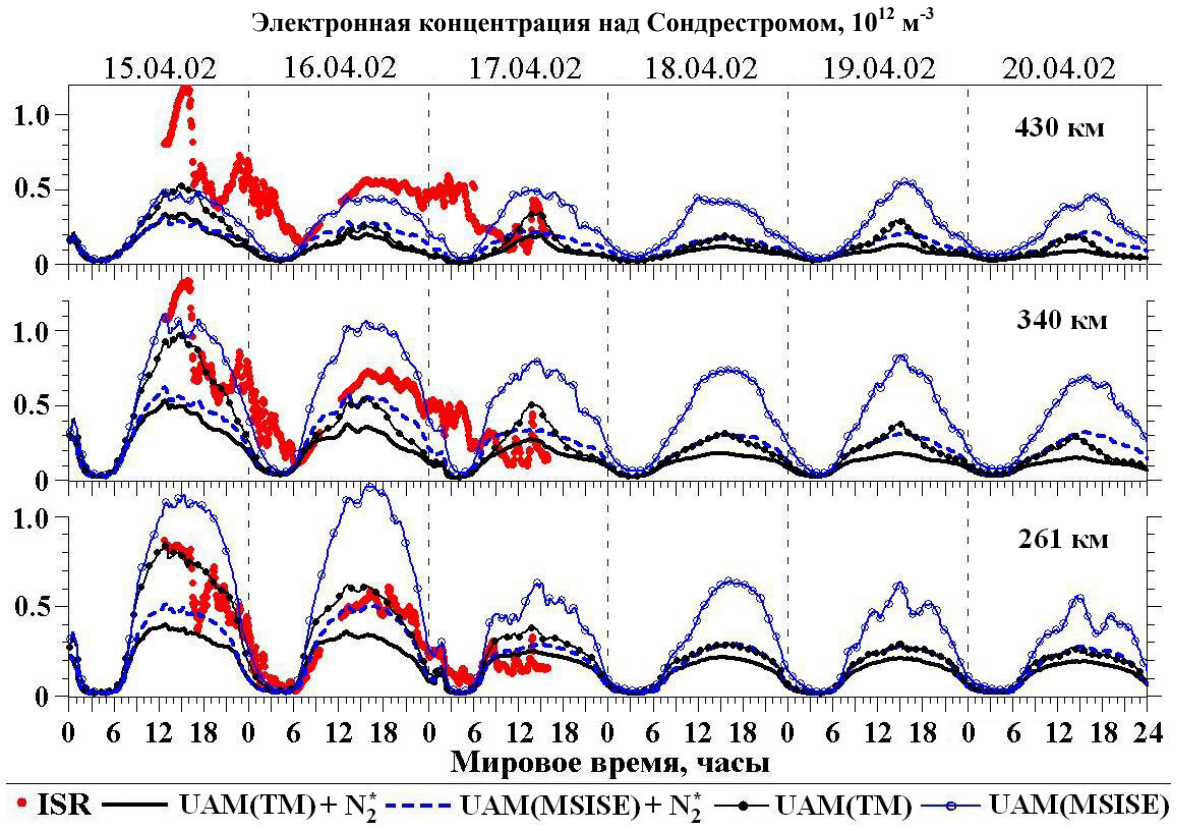


Рис. 13. Вариации электронной концентрации на трёх высотах над Сондрестромом, рассчитанные разными версиями модели UAM для 15-20 апреля 2002 года в сравнении с данными наблюдений

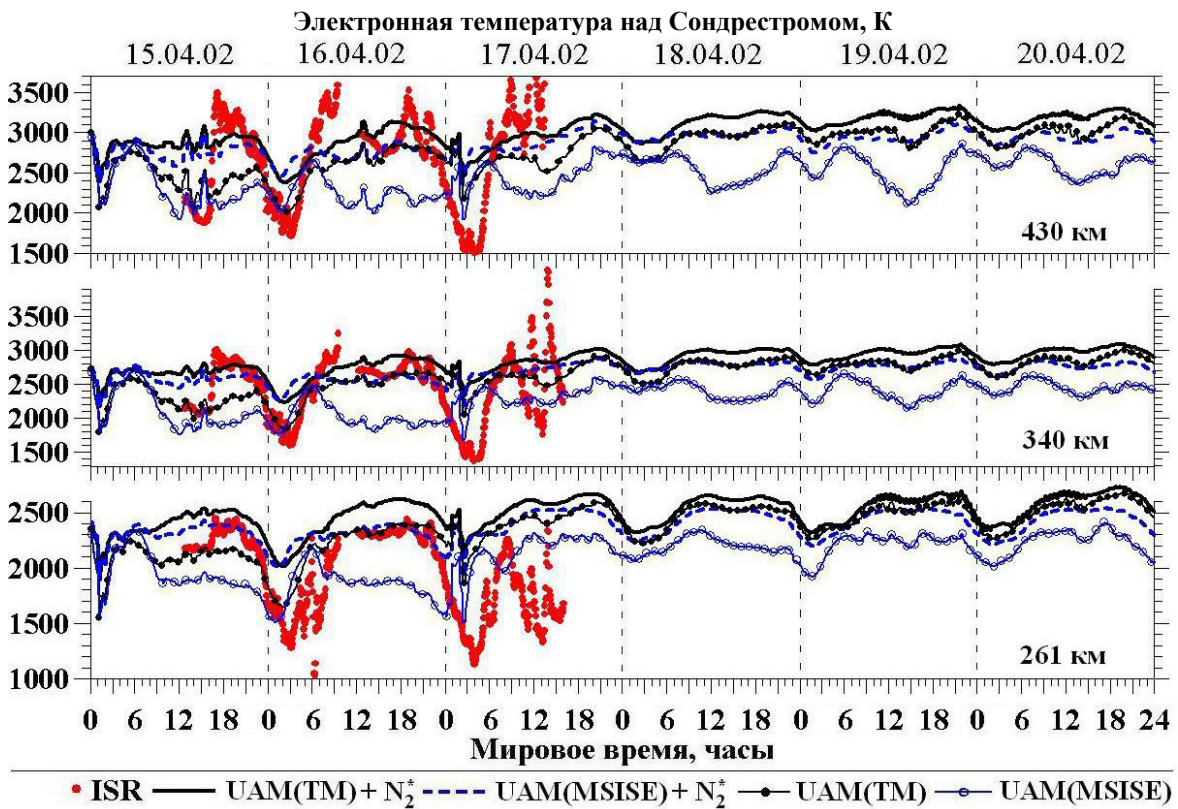


Рис. 14. То же, что и на рис. 13, но для электронной температуры

Все варианты численных расчётов демонстрируют рост температуры электронов с началом геомагнитных возмущений. Учёт колебательного возбуждения молекул азота при расчёте скорости реакции $\beta^* = \beta(O^+, N_2)$ приводит к увеличению до двух раз значений T_e как в варианте UAM(MSISE), так и в полностью теоретическом расчёте. Результаты расчётов с учётом N_2^* заметно лучше согласуются с данными наблюдений за электронной температурой на низких, средних и субавторальных широтах. Значения T_e , наблюдавшиеся радаром на высоких широтах, находятся в диапазоне разброса результатов всех четырёх вариантов численных расчётов, поэтому общее согласие с измерениями модельных значений T_e при учёте колебательного возбуждения азота остаётся для высоких широт примерно на том же уровне, что и в расчётах без N_2^* . Как и в случае с электронной концентрацией, расчёт скорости реакции $O^+ + N_2 \rightarrow NO^+ + N$ с учётом N_2^* приводит, в целом, к уменьшению степени расхождений результатов моделирования с составом и температурой, рассчитанными теоретически и по эмпирической модели MSISE.

Таким образом, учёт колебательного возбуждения молекул азота при моделировании поведения ионосферы в период 15-20 апреля 2002 года ведёт к улучшению согласия модельных результатов с данными наблюдений как электронной концентрации, так и электронной температуры. Кроме того, учёт N_2^* уменьшает расхождение результатов расчётов в вариантах модели с "теоретической термосферой" и составом и температурой по эмпирической модели MSISE.

Литература

- Albritton D.L., Dotan I., Lindinger W., McFarland M. Effects of ion speed distributions in flow-drift tube studies of ion-neutral reactions. *J. Chem. Phys.*, v.66, N 2, p.410-421, 1977.
- Bilitza D. International reference ionosphere 2000. *Radio Science*, v.36, N 2, p.261-275, 2001.
- Ennis A.E., Bailey G.J., Moffett R.J. Vibrational nitrogen concentration in the ionosphere and its dependence on season and solar cycle. *Ann. Geophysicae*, v.13, p.1164-1171, 1995.
- Hedin A.E., Fleming E.L., Manson A.H., Scmidlin F.J., Avery S.K., Clark R.R., Franke S.J., Fraser G.J., Tsunda T., Vial F., Vincent R.A. Empirical wind model for the upper, middle, and lower atmosphere. *J. Atmos. Terr. Phys.*, v.58, p.1421-1447, 1996.
- Hierl P.M., Dotan I., Seeley J.V., Van doran J.M., Morris R.A., Viggiano A.A. Rate coefficients for the reactions of O^+ with N_2 and O_2 as a function of temperature (300-1800K). *J. Chem. Phys.*, v.106(9), p.3540-3544, 1997.
- Jenkins B., Bailey G.J., Ennis A.E., Moffett R.J. The effect of vibrationally excited nitrogen on the low-latitude ionosphere. *Ann. Geophysicae*, v.15, p.1422-1428, 1997.
- Korenkov Yu.N., Klimenko V.V., Förster M., Bessarab F.S., Surotkin V.A. Calculated and observed ionospheric parameters for a Magion 2 passage and EISCAT data on July 31, 1990. *J. Geophys. Res.*, v.103, N A7, p.14697-14710, 1998.
- Korenkov Yu.N., Klimenko V.V., Forster M., Surotkin V.A., Smilauer J. Global modelling study (GSM TIP) of the ionospheric effects of excited N_2 , convection and heat fluxes by comparison with EISCAT and satellite data for 31 July, 1990. *Ann. Geophysicae*, v.14, p.1362-1374, 1996.
- McFarland M., Albritton D.L., Fehsenfeld F.C., Ferguson E.E., Schmeltekopf A.L. Flow-drift technique for ion mobility and ion-molecular reaction rate coefficient measurements. II. Positive ion reactions of N^+ , O^+ , and N_2^+ with O_2 and O^+ with N_2 from thermal to 2 eV. *J. Chem. Phys.*, v.59, p.6620-6628, 1973.
- Mikhailov A.V., Schlegel K. A self-consistent estimate of $O^+ + N_2$ – rate coefficient and total EUV solar flux with $\lambda < 1050 \text{ \AA}$ using EISCAT observations. *Ann. Geophysicae*, v.18, p.1164-1171, 2000.
- Namgaladze A.A., Martynenko O.V., Volkov M.A., Namgaladze A.N., Yurik R.Yu. High-latitude version of the global numerical model of the Earth's upper atmosphere. *Proceedings of the MSTU*, v.1, N 2, p.23-84, 1998.
- Namgaladze A.A., Zubova Yu.V., Namgaladze A.N., Martynenko O.V., Doronina E.N., Goncharenko L.P., Van Eyken A., Howells V., Thayer J.P., Taran V.I., Shpynev B., Zhou Q. Modelling of the ionosphere/thermosphere behaviour during the April 2002 magnetic storms: A comparison of the UAM results with the ISR and NRLMSISE-00 data. *Adv. in Space Research*, v.37, Is.2, p.380-391, 2006.
- Pavlov A.V. The role of vibrationally excited nitrogen in the ionosphere. *Pure and Applied Geophysics*, v.127, N 2/3, p.529-544, 1988.
- Pavlov A.V., Buonsanto M.J. Using steady state vibrational temperatures to model effects of N_2^* on calculations of electron densities. *J. Geophys. Res.*, v.101, N A12, p.26941-26946, 1996.
- Pavlov A.V., Foster J.C. Model/data comparison of F region ionospheric perturbation over Millstone Hill during the severe geomagnetic storm of July 15-16, 2000. *J. Geophys. Res.*, v.106, N A12, p.29051-29070, 2001.

- Picone J.M., Hedin A.E., Drob D.P., Aikin A.C.** NRLMSISE-00 empirical model of the atmosphere: Statistical comparisons and scientific issues. *J. Geophys. Res.*, v.107, p.1468, 10.1029/2002JA009430, 2002.
- Richards P.G., Torr D.G.** A factor of 2 reduction in theoretical F2-peak electron density due to enhanced vibrational excitation of N₂ in summer at solar maximum. *J. Geophys. Res.*, v.91, N 10, p.11331-11336, 1986.
- Richards P.G., Torr D.G., Reinisch B.W., Gamache R.R., Wilkinson P.J.** F2 peak electron density at Millstone Hill and Hobart: Comparison of theory and measurement at solar maximum. *J. Geophys. Res.*, v.99, p.15005-15016, 1994.
- Schmeltekopf A.L., Ferguson E.E., Fehsenfeld F.C.** After glow studies of the reactions He⁺, He(2³S), and O⁺ with vibrationally excited N₂. *J. Chem. Phys.*, v.48, p.2966-2973, 1968.
- St.-Maurice J.-P., Torr D.G.** Nonthermal rate coefficients in the ionosphere: The reactions of O⁺ with N₂, O₂ and NO. *J. Geophys. Res.*, v.83, N 3, p.969-977, 1978.
- Намгаладзе А.А., Захаров Л.П., Намгаладзе А.Н.** Численное моделирование ионосферных бурь. *Геомагнетизм и аэрономия*, т.21, № 2, с.259-265, 1981.
- Намгаладзе А.А., Кореньков Ю.Н., Клименко В.В., Карпов И.В., Бессараб Ф.С., Суроткин В.А., Глушенко Т.А., Наумова Н.М.** Глобальная численная модель термосферы, ионосферы и протоносферы Земли. *Геомагнетизм и аэрономия*, т.30, с.612-619, 1990.
- Павлов А.В.** Метод учёта влияния колебательно-возбуждённого азота на состав ионосферы. *М., Препр. ИЗМИРАН*, № 76(609), 24 с., 1985.
- Павлов А.В., Намгаладзе А.А.** Колебательно возбужденный молекулярный азот в верхней атмосфере. *Геомагнетизм и аэрономия*, т.28, № 5, с.705-721, 1988.