

УДК 533.95:537.84:551.510.535

КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВОЗБУЖДЕННЫЕ N₂ И O₂ В ВЕРХНЕЙ АТМОСФЕРЕ (обзор)

© 2011 г. А. В. Павлов

Учреждение РАН Институт земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова РАН,
г. Троицк (Московская обл.)

e-mail: pavlov@izmiran.ru

Поступила в редакцию 25.01.2010 г.

После доработки 19.08.2010 г.

Освещается современное состояние исследований содержания колебательно-возбужденных N₂ и O₂ в верхней атмосфере и механизмов их влияния на концентрацию и температуру электронов ионосферы и концентрации нейтральных компонентов верхней атмосферы.

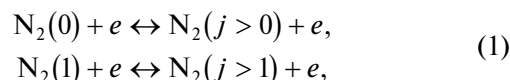
1. ВВЕДЕНИЕ

Исследованию распределений электронно возбужденных молекул азота и кислорода по колебательным уровням j на высотах верхней атмосферы и влиянию колебательно-возбужденных N₂($j > 0$) и O₂($j > 0$) на ионосферу и нейтральную атмосферу посвящены многочисленные работы, часть которых проанализирована в обзорах [Павлов и Намгаладзе, 1988; Torr and Torr, 1982; Pavlov, 1988]. За время, прошедшее после выхода в свет этих обзоров, получено большое количество новых данных о физико-химических процессах, определяющих [N₂(j)] и [O₂(j)] и их роль в ионосфере и нейтральной атмосфере, и опубликованы многочисленные исследования распределений N₂ и O₂ по колебательным уровням и влияния N₂($j > 0$) и O₂($j > 0$) на ионосферу и нейтральную атмосферу. В настоящем обзоре в свете этих новых данных обсуждаются физико-химические процессы, определяющие [N₂(j)] и [O₂(j)], методы расчета этих величин, характер распределений N₂ и O₂ по колебательным уровням и отличия этих распределений от больцмановского вида. Анализ влияния N₂($j > 0$) и O₂($j > 0$) на концентрацию N_e и температуру T_e электронов ионосферы и концентрации нейтральных компонентов верхней атмосферы проводится на основе многочисленных работ, опубликованных после выхода в свет обзоров [Павлов и Намгаладзе, 1988; Torr and Torr, 1982; Pavlov, 1988].

2. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ N₂ ПО КОЛЕБАТЕЛЬНЫМ УРОВНЯМ

Одним из источников образования колебательно-возбужденного азота N₂(j) в основном электронном состоянии $X^1\sum_g^+$ на колебательных уровнях $j > 0$ являются столкновения N₂ с электронами. В

условиях ионосферы концентрация $n_j = [N_2(j)]$ сильно уменьшается с ростом колебательного уровня N₂ (см. ниже). Поэтому можно ограничиться лишь учетом возбуждения электронным ударом колебательно не возбужденных молекул азота N₂(0) и колебательно-возбужденных молекул азота N₂(1), находящихся на первом колебательном уровне,



с соответствующими скоростями образования N₂($j > 0$):

$$\begin{aligned} q_0(j) &= \{n_0 - n_j \exp(E_j/T_e)\} \int_0^\infty \Phi(E) \sigma_{0j}(E) dE, \\ q_1(j) &= \{n_1 - n_j \exp[(E_j - E_1)/T_e]\} \int_0^\infty \Phi(E) \sigma_{1j}(E) dE, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\Phi(E)$ – поток электронов, σ_{0j} и σ_{1j} – сечения перехода с нулевого и первого колебательного уровня N₂ на колебательный уровень j , E_j – выраженная в градусах Кельвина энергия колебательного уровня j , $E_j = jE_1 - j(j-1)\Delta E$, $E_1 = 3353$ К и $\Delta E = 20.6$ К – выраженные в градусах Кельвина энергия первого колебательного уровня и ангармонизм N₂ [Радциг и Смирнов, 1980]. Величины $q_0(j) = q_0^+(j) + q_0^f(j)$ и $q_1(j) = q_1^+(j) + q_1^f(j)$, где $q_0^+(j)$ и $q_1^+(j)$ скорости образования N₂($j > 0$) за счет тепловых электронов, $q_0^f(j)$ и $q_1^f(j)$ – скорости образования N₂($j > 0$) потоком фотоэлектронов, $q_0^+(j)$ и $q_1^+(j)$ – скорости образования N₂($j > 0$), создаваемые потоком электронов, вторгающихся в атмосферу в области высоких широт.

Таблица 1. Коэффициенты для вычисления Q_{0j} при $300 \leq T_e \leq 1500$ К

j	A_{0j}	B_{0j}, K^{-1}	C_{0j}, K^{-2}	D_{0j}, K^{-3}	F_{0j}, K^{-4}
1	-6.462	3.151×10^{-2}	-4.075×10^{-5}	2.439×10^{-8}	-5.479×10^{-12}

Таблица 2. Коэффициенты для вычисления Q_{0j} при $1500 \leq T_e \leq 6000$ К

j	A_{0j}	B_{0j}, K^{-1}	C_{0j}, K^{-2}	D_{0j}, K^{-3}	F_{0j}, K^{-4}
1	2.025	8.782×10^{-4}	2.954×10^{-7}	-9.562×10^{-11}	7.252×10^{-15}
2	-7.066	1.001×10^{-2}	-3.066×10^{-6}	4.436×10^{-10}	-2.449×10^{-14}
3	-8.211	1.092×10^{-2}	-3.369×10^{-6}	4.891×10^{-10}	-2.706×10^{-14}
4	-9.713	1.204×10^{-2}	-3.732×10^{-6}	5.431×10^{-10}	-3.008×10^{-14}
5	-10.353	1.243×10^{-2}	-3.850×10^{-6}	5.600×10^{-10}	-3.100×10^{-14}
6	-10.819	1.244×10^{-2}	-3.771×10^{-6}	5.385×10^{-10}	-2.936×10^{-14}
7	-10.183	1.185×10^{-2}	-3.570×10^{-6}	5.086×10^{-10}	-2.769×10^{-14}
8	-12.698	1.309×10^{-2}	-3.952×10^{-6}	5.636×10^{-10}	-3.071×10^{-14}
9	-14.710	1.409×10^{-2}	-4.249×10^{-6}	6.058×10^{-10}	-3.300×10^{-14}
10	-17.538	1.600×10^{-2}	-4.916×10^{-6}	7.128×10^{-10}	-3.941×10^{-14}

В моделях ионосферы и плазмосферы, учитывающих влияние $N_2(j > 0)$ на параметры ионосферы и плазмосферы, можно не учитывать влияние фотоэлектронов на n_j [Павлов и Намгаладзе, 1988]. Расчеты [Newton et al., 1977], основанные на использовании известных в то время константах процессов, определяющих n_j , показали, что в области высоких широт вторгающиеся потоки электронов не приводят к существенным изменениям ионосферных параметров за счет изменений n_j . Предметом будущих исследований может быть проверка этого вывода на основе изложенных ниже современных представлений о процессах, определяющих n_j . Важным источником образования $N_2(j)$ на нижних колебательных уровнях, которые в значительной мере определяют влияние n_j на параметры ионосферы и плазмосферы, являются столкновения N_2 с тепловыми электронами [Pavlov, 1998a]:

$$q'_0(j) = \{n_0 - n_j \exp(E_j/T_e)\} N_e Q_{0j}/E_j, \quad (3)$$

$$q'_1(j) = \{n_1 - n_j \exp[(E_j - E_1)/T_e]\} N_e Q_{1j}/(E_j - E_1).$$

При вычислении Q_{0j} и Q_{1j} можно использовать аналитические выражения [Pavlov, 1998a]:

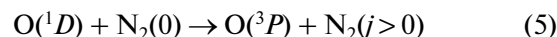
$$\lg Q_{0j} = A_{0j} + B_{0j}T_e + C_{0j}T_e^2 + D_{0j}T_e^3 + F_{0j}T_e^4 - 16, \quad (4)$$

$$\lg Q_{1j} = A_{1j} + B_{1j}T_e + C_{1j}T_e^2 + D_{1j}T_e^3 + F_{1j}T_e^4 - 16,$$

где величины A_{0j} , B_{0j} , C_{0j} , D_{0j} , F_{1j} , A_{1j} , B_{1j} , C_{1j} , D_{1j} , F_{1j} приведены в таблицах 1–3, единицы измерения Q_{0j} и Q_{1j} – эВ см³ с⁻¹, T_e выражено в градусах Кельвина.

При $300 \leq T_e \leq 1500$ К в расчетах можно не учитывать $q'_1(j)$ и $q'_0(j > 1)$.

Молекулы колебательно-возбужденного N_2 также образуются в реакции

**Таблица 3.** Коэффициенты для вычисления Q_{1j} при $1500 \leq T_e \leq 6000$ К

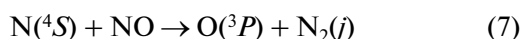
j	A_{1j}	B_{1j}, K^{-1}	C_{1j}, K^{-2}	D_{1j}, K^{-3}	F_{1j}, K^{-4}
2	-3.413	7.326×10^{-3}	-2.200×10^{-6}	3.128×10^{-10}	-1.702×10^{-14}
3	-4.160	7.803×10^{-3}	-2.352×10^{-6}	3.352×10^{-10}	-1.828×10^{-14}
4	-5.193	8.360×10^{-3}	-2.526×10^{-6}	3.606×10^{-10}	-1.968×10^{-14}
5	-5.939	8.807×10^{-3}	-2.669×10^{-6}	3.806×10^{-10}	-2.073×10^{-14}
6	-8.261	1.010×10^{-2}	-3.039×10^{-6}	4.318×10^{-10}	-2.347×10^{-14}
7	-8.185	1.010×10^{-2}	-3.039×10^{-6}	4.318×10^{-10}	-2.347×10^{-14}
8	-10.823	1.199×10^{-2}	-3.620×10^{-6}	5.159×10^{-10}	-2.810×10^{-14}
9	-11.273	1.283×10^{-2}	-3.879×10^{-6}	5.534×10^{-10}	-3.016×10^{-14}

со скоростью

$$q_2(j) = K_j[O(^1D)]n_0, \quad (6)$$

где $K_j/K = 0.293, 0.253, 0.212, 0.159, 0.083$ соответственно для $j = 1-5$, $K_j = 0$ для $j > 5$ и $K = 2 \times 10^{-11} \exp(107.8T_n^{-1}) \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$, где T_n – температура нейтральной атмосферы в градусах Кельвина (см. детальное обсуждение в обзоре [Павлов и Намгалдзе, 1988]).

Следует также учесть образование колебательно-возбужденного N₂ в реакции



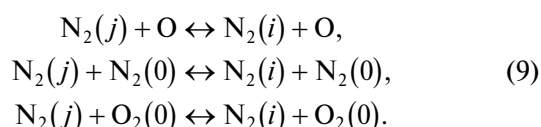
со скоростью

$$q_3(j) = K_j[N(^4S)][NO], \quad (8)$$

где согласно теоретическим расчетам [Gamallo et al., 2006] при $T_n = 1000 \text{ К}$ отношение $K_j/K = 0.04, 0.13, 0.21, 0.23, 0.18, 0.14, 0.04, 0.02, 0.01$ соответственно для $j = 0-8$ и $K_j = 0$ для $j > 8$, а результаты измерений и расчетов суммарного коэффициента скоростей этих реакций можно представить в виде $K = 4.35 \times 10^{-12} T_n^{0.28} \exp(130.68/T_n) \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$.

Величина отношения K_j/K слабо зависит от T_n [Gamallo et al., 2006]. Кроме того, образование N₂(j) в реакции N(^4S) с NO слабо влияет на ионосферные параметры. Поэтому представленные теоретические расчеты K_j/K при $T_n = 1000 \text{ К}$ можно использовать и при других значениях T_n .

Нейтральная атмосфера в основном состоит из O₂, N₂ и O на высотах ионосферы. Образующиеся молекулы колебательно-возбужденного азота сталкиваются с невозбужденными O₂, N₂ и O, что вызывает обмен энергией между колебательными и поступательными степенями свободы (νt -обмен):

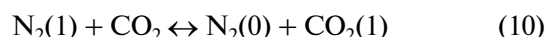


При $j = 1$ и $i = 0$ измерена зависимость от T_n коэффициента $K_{\nu t}^{(1)}$ скорости колебательно-поступательного обмена при столкновении N₂(1) с атомами кислорода при $T_n = 300, 463, 633, 723 \text{ К}$ [McNeal et al., 1974] и для T_n от примерно 1120 К до примерно 2540 К [Eckstrom, 1973], которую можно аппроксимировать формулой $K_{\nu t}^{(1)} = 1.04 \times 10^{-11} \times \exp(-38.07T_n^{-1/3} - 107.09T_n^{-2/3})$, где T_n выражена в градусах Кельвина, единицы измерения $K_{\nu t}^{(1)}$ – $\text{см}^3 \text{ с}^{-1}$. Теоретические расчеты [Billing, 1980] коэффициента $K_{\nu t}^{(2)}$ скорости колебательно-поступательного обмена энергии N₂(1)–N₂(0) в области $150 \leq T_n \leq 2000 \text{ К}$ можно аппроксимировать зависимостью $\lg K_{\nu t}^{(2)} = 2.322 - 318.5T_n^{-1/3} + 1391T_n^{-2/3} - 2410T_n^{-1}$, где

$K_{\nu t}^{(2)}$ выражено в единицах измерения $\text{см}^3 \text{ с}^{-1}$. Сравнительно $K_{\nu t}^{(1)}$ и $K_{\nu t}^{(2)}$ можно сделать вывод, что эффективность колебательно-поступательного обмена в столкновениях N₂(1) с атомами кислорода намного больше, чем в столкновениях с N₂(0).

Если использовать подход Ландау–Теллера, то коэффициент скорости колебательно-поступательного обмена молекулы сорта s и массы m_s , находящейся на первом колебательном уровне с не возбужденной молекулой сорта r и массы m_r , пропорционален $[m_s m_r / (m_s + m_r)]^{2.06}$ [Лосев и др., 1995]. Поэтому можно приближенно считать, что коэффициент $K_{\nu t}^{(3)}$ скорости колебательно-поступательного обмена энергии N₂(1)–O₂(0) примерно равен $1.14K_{\nu t}^{(2)}$. Таким образом, характерное время $\tau_{\nu t}$ колебательно-поступательного обмена молекул азота в атмосфере имеет вид $\tau_{\nu t} = \{K_{\nu t}^{(1)}[O] + K_{\nu t}^{(2)}[N_2] + K_{\nu t}^{(3)}[O_2]\}^{-1}$.

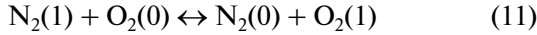
Молекулы углекислого газа, являющиеся малой примесью верхней атмосферы, имеют три колебательные моды [Смит и Томсон, 1981]: ν_1 (симметричная мода), ν_2 (двукратно вырожденная деформационная мода), ν_3 (асимметричная мода), и каждая колебательная мода имеет свою последовательность колебательных энергий. При столкновениях N₂ и CO₂ можно не учитывать моды ν_1 и ν_2 как источник или сток N₂(j) из-за малой величины концентрации углекислого газа и нерезонансного межмодового обмена колебательной энергией. Близость энергий (3353 К и 3380 К) первого колебательного уровня N₂ и асимметричной моды CO₂ приводит к почти резонансному межмодовому обмену колебательной энергией между колебательно-возбужденными N₂ и асимметричной модой CO₂. В этом случае для процесса



в монографии [Смит и Томсон, 1981] представлена аппроксимация измерений коэффициента скорости межмодового обмена колебательной энергией от N₂(1) к первому колебательному уровню асимметричной моды CO₂ (прямой процесс) в виде $K_m^{(1)} = 1.71 \times 10^{-6} \exp(-175T_n^{-1/3}) + 6.07 \times 10^{-14} \times \exp(-15.13T_n^{-1/3})$, где размерность $K_m^{(1)}$ – $\text{см}^3 \text{ с}^{-1}$. Характерное время передачи колебательной энергии от N₂(1) к первому колебательному уровню асимметричной моды CO₂ имеет вид $\tau_m^{(1)} = \{K_m^{(1)}[CO_2]\}^{-1}$.

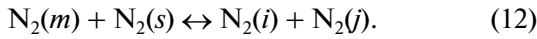
При рассмотрении межмодовых взаимодействий N₂ с молекулами атмосферы следует также изучить относительную роль взаимного обмена ко-

лебательной энергией при столкновениях молекул азота с молекулами кислорода. Для взаимодействий



коэффициент скорости передачи колебательной энергии от $\text{N}_2(1)$ к $\text{O}_2(1)$ (прямой процесс) имеет вид [Gilmore et al., 1969] $K_m^{(2)} = 3.6 \times 10^{-12} T_n^{0.5} \times \exp(-110T_n^{-1/3})$, где размерность $K_m^{(2)}$ – $\text{см}^3 \text{с}^{-1}$. Характерное время передачи колебательной энергии от $\text{N}_2(1)$ к $\text{O}_2(1)$ имеет вид $\tau_m^{(2)} = \{K_m^{(2)} [\text{O}_2]\}^{-1}$.

Столкновения молекул азота, находящихся на разных колебательных уровнях приводят к колебательно-колебательному ($\nu\nu$) обмену энергией



Зависимость от T_n коэффициента $K_{\nu\nu}$ скорости колебательно-колебательного $\text{N}_2(j=1) \rightarrow \text{N}_2(j=0)$ обмена, рассчитанная в работе [Casciatiore et al., 2005], согласуется с рядом измерений $K_{\nu\nu}$ (см. подробнее работу [Casciatiore et al., 2005]). При $250 \text{ К} \leq T_n \leq 2000 \text{ К}$ эту зависимость можно аппроксимировать выражением $K_{\nu\nu} = (1.404 + 1.055 \times 10^{-3} T_n + 2.588 \times 10^{-6} T_n^2 - 6.866 \times 10^{-10} T_n^3) \times 10^{-14}$, в то время как при $200 \text{ К} \leq T_n < 250 \text{ К}$ можно приближенно считать $K_{\nu\nu} = 1.82 \times 10^{-14}$, где единицы измерения $K_{\nu\nu}$ – $\text{см}^3 \text{с}^{-1}$. Характерное время колебательно-колебательного обмена N_2 имеет вид $\tau_{\nu\nu} = \{K_{\nu\nu} [\text{N}_2]\}^{-1}$.

Процессы диффузии вызывают перенос $\text{N}_2(j)$ в атмосфере, т.е. перенос колебательной энергии N_2 . Диффузионный поток $\text{N}_2(j)$ в вертикальном направлении

$$F_j = -D \left[\frac{\partial}{\partial z} n_j + n_j \left(\frac{1}{H} + \frac{1}{T_n} \frac{\partial}{\partial z} T_n \right) \right], \quad (13)$$

где D – коэффициент диффузии, z – высота, $H = kT_n / (mg)$, m – масса молекул азота, g – ускорение силы тяжести, k – постоянная Больцмана.

Характерное время диффузии колебательно-возбужденного молекулярного азота $\tau_d = H^2/D$.

До настоящего времени не проводились измерения влияния колебательного возбуждения на коэффициенты диффузии $\text{N}_2(j > 0)$ в бинарных смесях $\text{N}_2(j > 0) - \text{N}_2(0)$, $\text{N}_2(j > 0) - \text{O}_2$, $\text{N}_2(j > 0) - \text{O}$. Поэтому в расчетах принимается, что коэффициенты диффузии $\text{N}_2(j > 0)$ и $\text{N}_2(j = 0)$ совпадают, т.е. для атмосферы, состоящей в основном из O_2 , N_2 и O коэффициент диффузии $\text{N}_2(j > 0)$ имеет вид $D = Y \{ [\text{O}]/D(\text{N}_2, \text{O}) + [\text{N}_2]/D(\text{N}_2, \text{N}_2) + [\text{O}_2]/D(\text{N}_2, \text{O}_2) \}^{-1}$, где $Y = [\text{O}] + [\text{N}_2] + [\text{O}_2]$, $D(\text{N}_2, \text{O}) = 9.69 \times 10^{16} T_n^{0.774} Y^{-1}$ и $D(\text{N}_2, \text{O}_2) = 8.29 \times 10^{16} T_n^{0.724} Y^{-1}$ – бинарные коэффициенты молекулярной диффузии N_2 через O и O_2 [Павлов, 1981], единицы измерения

Y – см^{-3} , единицы измерения коэффициентов диффузии – $\text{см}^2 \text{с}^{-1}$. Величина D зависит также от коэффициента самодиффузии N_2 . Для его определения рассмотрим смесь двух нейтральных компонент s и r , бинарный коэффициент диффузии которых [Ферцигер и Капер, 1976]

$$D(s, r) = 3(2\pi m_{sr} k T_n)^{0.5} / (16 Y m_{sr} \pi \sigma_{sr}^2 \Omega_{sr}^{(1,1)*}), \quad (14)$$

где $m_{sr} = m_r m_s / (m_r + m_s)$, $\sigma_{sr} = 0.5(\sigma_s + \sigma_r)$, σ_r , σ_s и m_r , m_s – диаметры и массы сталкивающихся частиц.

Расчеты величины $\sigma_{ss}^2 \Omega_{ss}^{(1,1)*}$ [Stallcop et al., 2000] для столкновений $\text{N}_2 - \text{N}_2$ в приближении потенциала взаимодействия, близкого к реальному, можно аппроксимировать с погрешностью не более 2.3% при $200 \leq T_n \leq 2000 \text{ К}$: $\sigma_{ss}^2 \Omega_{ss}^{(1,1)*} = 3.71 \times 10^{-15} T_n^{-0.193}$, где размерность σ_{ss} – см . Поэтому $D(\text{N}_2, \text{N}_2) = 9.79 \times 10^{16} T_n^{0.693} Y^{-1}$, где единицы измерения коэффициента самодиффузии N_2 – $\text{см}^2 \text{с}^{-1}$, единицы измерения Y – см^{-3} .

Воспользуемся моделью NRLMSISE-00 [Picone et al., 2002] нейтрального состава и температуры атмосферы для расчета характерных времен процессов, определяющих $[\text{N}_2(j)]$ в невозмущенной атмосфере средних широт вблизи равноденствия (90-й день года) над радаром Millstone Hill. В модели NRLMSISE-00 температура и концентрации нейтральных компонентов зависят от солнечной активности посредством индексов $F10.7p$ и $\overline{F10.7}$, где $F10.7p$ – значение потока солнечного излучения на длине волны 10.7 см в единицах $10^{-22} \text{ Вт м}^{-2} \text{ Гц}^{-1}$ за 24-часовой период, предшествующий рассматриваемому 0–24 UT периоду; $\overline{F10.7}$ – среднеарифметическое значение потока солнечного излучения на длине волны 10.7 см в единицах $10^{-22} \text{ Вт м}^{-2} \text{ Гц}^{-1}$ за 81 день с центром усреднения в рассматриваемый 0–24 UT период.

Среднеширотные измерения $[\text{CO}_2]/Y$, суммированные в работе [Chabrillat et al., 2002], отличаются в разных экспериментах. Примем для расчетов максимальное значение измеренного отношения $[\text{CO}_2]/Y$ и покажем, что даже в этом случае ролью CO_2 можно пренебречь при расчетах $[\text{N}_2(j > 0)]$. Исходя из этого, при вычислении $\tau_m^{(2)}$ принимается $[\text{CO}_2]/Y = 0.0035$ на высоте 90 км и ниже, значения этого отношения считаются равными 0.0034, 0.0031, 0.0027, 0.0024, 0.0014, 0.00075 соответственно на высоте 95, 100, 105, 110, 115, 120 км. Выше 120 км $[\text{CO}_2]$ вычисляется в приближении диффузионного равновесия: $[\text{CO}_2] = [\text{CO}_2]_{120} \exp\{-(z - 120) \times gm_{\text{CO}_2} / (kT_n)\}$, где $[\text{CO}_2]_{120}$ – концентрация CO_2 на высоте 120 км, z – высота в километрах, m_{CO_2} – масса CO_2 газа.

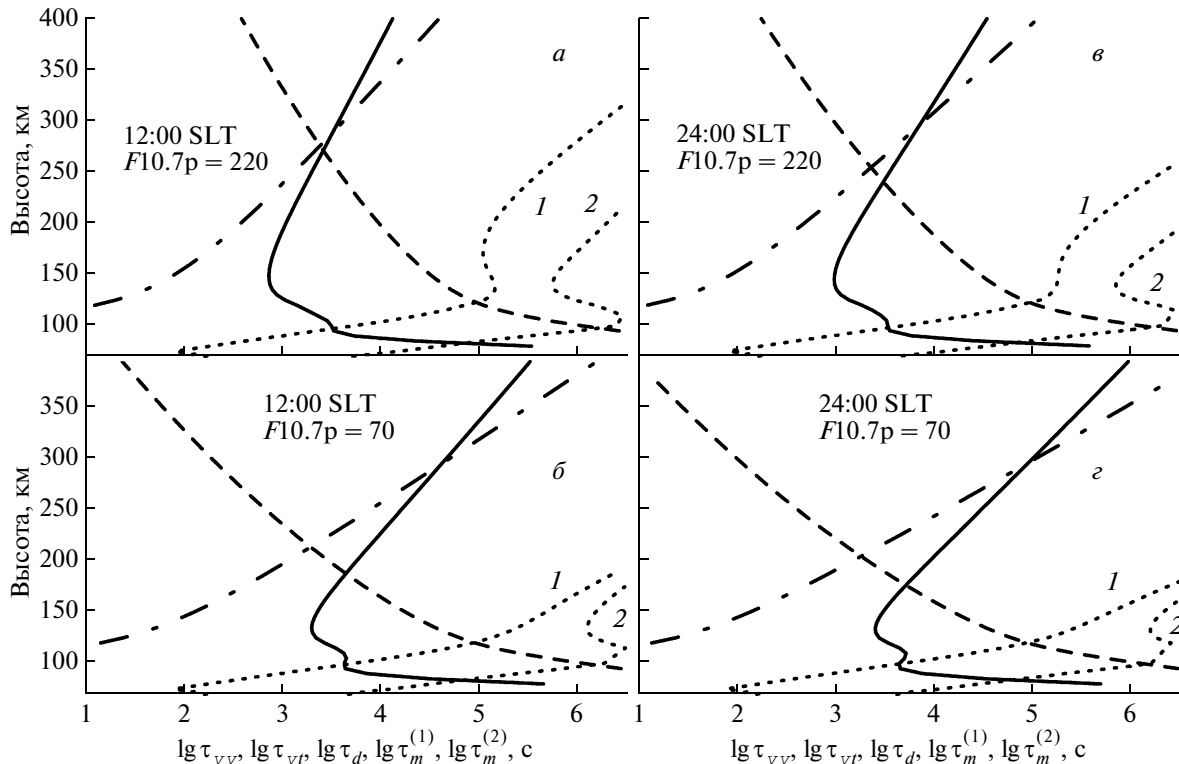


Рис. 1. Характерные времена колебательно-возбужденного N₂ над станцией некогерентного рассеяния радиоволн Millstone Hill в геомагнито-спокойных условиях вблизи равноденствия (90-й день года): τ_{vl} (сплошные кривые), τ_{vv} (штрих-пунктирные кривые), τ_d (штриховые кривые), $\tau_m^{(1)}$ (точечные кривые 1) и $\tau_m^{(2)}$ (точечные кривые 2). Рисунки *a*, *б* соответствуют 12:00 SLT, а кривые рисунков *в*, *г* относятся к 24:00 SLT, где SLT = UT + $\lambda/15$ – солнечное местное время, SLT и UT выражены в часах, географическая долгота λ измеряется в градусах. Расчеты проводились для условий максимума солнечной активности при индексах солнечной активности $F10.7p = F10.7 = 220$ (рисунки *a*, *в*) и минимума солнечной активности для $F10.7p = F10.7 = 70$ (рисунки *б*, *г*).

На рис. 1 показаны вычисленные характерные времена колебательно-поступательного обмена (сплошные кривые), колебательно-колебательного обмена (штрих-пунктирные кривые) и диффузии (штриховые кривые) N₂($j > 0$), обмена колебательной энергией от N₂(1) к первому колебательному уровню асимметричной моды ν_3 CO₂ (точечные кривые 1) и передачи колебательной энергии от N₂(1) к O₂(1) (точечные кривые 2) для геомагнито-спокойных условий вблизи равноденствия (90-й день года). Рисунки *1a*, *б* соответствуют 12:00 SLT, а кривые рис. *1в*, *г* относятся к 24:00 SLT. Расчеты проводились для условий максимума солнечной активности при $F10.7p = \overline{F10.7} = 220$ (рис. *1a*, *в*) и минимума солнечной активности для $F10.7p = \overline{F10.7} = 70$ (рис. *1б*, *г*). Сравнивая точечные кривые 2 с другими кривыми можно сделать вывод, что при вычислении n_j можно пренебречь обменом колебательной энергией в столкновениях N₂–O₂. Из рис. 1 видно, что выше 110–115 км можно пренебречь влиянием CO₂ на n_j . Сравнение штриховых кривых с другими кривыми позволяет сделать вывод, что при расчетах

n_j можно пренебречь влиянием диффузии N₂($j > 0$) ниже примерно 185 км при высокой солнечной активности и ниже примерно 145 км для условий низкой солнечной активности. Отметим, что выше примерно 80 км столкновения N₂($j > 0$)–O вносят основной вклад в характерное время колебательно-поступательного обмена энергии, т.е. неопределенности $K_{vl}^{(2)}$ и $K_{vl}^{(3)}$ не влияют на n_j на высотах областей *E*, *F* и внешней ионосферы. Рисунок 1 также показывает, что на всех высотах $\tau_{vv} \ll \tau_m^{(1)}$. Это означает, что при вычислении вида функции распределения N₂ по колебательным уровням можно не учитывать столкновения N₂–CO₂. Однако эти столкновения влияют на величину колебательной энергии N₂ ниже примерно 110–115 км.

Для описания потенциальной кривой двухатомной молекулы часто используют потенциал Морзе. В первом приближении радиальное относительное движение ядер двухатомной молекулы является гармоническим колебанием около положения равновесия. При столкновении молекул друг с другом и с

другими молекулами и атомами газа происходит колебательно-колебательный, колебательно-поступательный и межмодовый обмен энергией. В каждом из этих процессов скорость изменения во времени концентрации молекулы на рассматриваемом колебательном уровне будет определяться соответствующими вероятностями переходов между колебательными уровнями. Ввиду экспоненциального убывания этих вероятностей с ростом энергии соответствующих колебательных переходов, практически значимыми в большинстве приложений являются только переходы между соседними колебательными уровнями (одноквантовые колебательные переходы) [Гордиец и др., 1980].

Общий вид уравнений для определения концентраций колебательно-возбужденных молекул с учетом колебательно-колебательного, колебательно-поступательного и межмодового обмена колебательной энергией приведен в монографии [Гордиец и др., 1980]. Добавим в эти уравнения процессы диффузии и источники образования $N_2(j > 0)$ и пренебрежем влиянием межмодового обмена на n_j . После преобразований получим

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} n_j + \frac{\partial}{\partial z} F_j = q(j) + \\ & + (n^2 \tau_{vv})^{-1} \sum_i (i+1) \left[A(j, i) (n_i n_{j+1} - n_{i+1} n_j \mu^{j-i}) - \right. \\ & \quad \left. - A(j-1, i) (n_i n_j - n_{i+1} n_{j-1} \mu^{j-i-1}) \right] + \\ & + \xi^{i-1} \left\{ \xi(j+1) n_{j+1} - [(j+1)\Theta \mu^{j-1} + j] n_j + \right. \\ & \quad \left. + j\Theta \mu^{j-1} n_{j-1} \right\} (n \tau_{vt})^{-1}. \end{aligned} \quad (15)$$

В этом уравнении $n = \sum_{j=0}^{\infty} n_j$, $q(j) = q_0(j) + q_1(j) + q_2(j) + q_3(j)$, $\Theta = \exp(-E_1 T_n^{-1})$, $\mu = \exp(2\Delta E/T_n)$, $\xi = \exp(\delta_{VT})$, $A(j, i) = (j+1) \exp(-\delta_{VT} |j-i|) [1.5 - 0.5 \times \exp(-\delta_{VT} |j-i|)]$. После подстановки атомных констант безразмерные величины δ_{VT} и δ_{VT} можно представить для молекул азота в виде $\delta_{VT} = 14.73 T_n^{-0.5}$, $\delta_{VT} = 1.88 T_n^{-1/3}$ для $\varphi_j \geq 20$ и $\delta_{VT} = 5.48 T_n^{-0.5}$ при $\varphi_j < 20$, где $\varphi_j = 669 T_n^{-0.5} (1 - 0.01229j)$ и величина T_n выражена в градусах Кельвина.

В условиях верхней атмосферы ангармоничность N_2 слабо влияет на n_j для $j = 1-5$ [Павлов, 1989], которые в основном и определяют влияние $N_2(j > 0)$ на N_e и T_e . Поэтому для расчетов n_j можно использовать модель гармонического осциллятора. При расчетах можно не учитывать многоквантовых переходы между колебательными уровнями, так как в рассматриваемых условиях вероятности этих переходов малы в сравнении с вероятностью одно-

квантовых переходов. В этом случае величины n_j определяются из системы уравнений

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} n_j + \frac{\partial}{\partial z} F_j = q(j) + \\ & + \left\{ (j+1) n_{j+1} - [(j+1)\Theta + j] n_j + j\Theta n_{j-1} \right\} / \tau_{vt} + \\ & + \left\{ (j+1)(1+b) n_{j+1} - [(j+1)b + j(1+b)] n_j + \right. \\ & \quad \left. + jbn_{j-1} \right\} / \tau_{vv}, \\ & \frac{\partial}{\partial t} b - \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial z} \left(Dn \frac{\partial}{\partial z} b \right) = \\ & = \psi - (1-\Theta)(b-b_0) / \tau_{vt} - b_1 / \tau_m^{(1)}. \end{aligned} \quad (16)$$

В этой системе уравнений $b = \frac{1}{n} \sum_j j n_j$ – среднее число колебательных квантов на одну молекулу N_2 , $b_1 = b(1+\delta) - \delta(1+b) \exp(-27/T_n)$, $\delta = \sum_j j [CO_2(j)] / [CO_2]$ – среднее число колебательных квантов моды ν_3 на одну молекулу CO_2 , $b_0 = \Theta / (1 - \Theta)$ – равновесный колебательный квант N_2 , $\psi = \frac{1}{n} \sum_j j q(j)$ – средняя частота образования колебательных квантов N_2 .

Молекула азота симметрична. Поэтому наличие колебаний молекулы не приводит к образованию осциллирующего диполя и колебательные переходы являются квадрупольными. В этом случае коэффициент Эйнштейна для перехода с первого на нулевой колебательный уровень имеет вид [Радциг и Смирнов, 1980; Краснопольский, 1987]

$$A_{10} = 16\pi q_q / (5\hbar \lambda_{10}), \quad (18)$$

где \hbar – постоянная Планка, q_q и λ_{10} – квадрупольный момент и длина колебательного перехода с первого на нулевой колебательный уровень молекулы. Используя значения q_q и λ_{10} для N_2 [Радциг и Смирнов, 1980], находим, что $A_{10} = 1.5 \times 10^{-5} \text{ с}^{-1}$. Из рис. 1 следует, что в атмосфере можно пренебречь влиянием радиационных процессов на n_j в сравнении с намного более быстрыми процессами колебательно-колебательного обмена, колебательно-поступательного обмена и диффузии N_2 . Поэтому радиационные процессы не включены в уравнения (15)–(17).

Выше примерно 115–120 км межмодовый обмен между N_2 и CO_2 в основном сводится к стоку колебательной энергии от N_2 к CO_2 [Pavlov, 1988; Shved et al., 1998]. При этом $\delta \ll 1$. Поэтому на этих высотах можно считать, что в уравнении (17) $b_1 \approx b$ и для определения b не нужно вычислять δ . Кроме того, $\tau_m^{(1)} \gg \tau_{vt}$ выше 110–115 км, т.е. в уравнении (17) можно пренебречь членом $b_1 / \tau_m^{(1)}$.

Из вышеприведенных уравнений колебательной релаксации N_2 видно, что для вычисления n_j необ-

ходимо знать n_{j+1} . На фиксированной высоте величина n_j убывает с ростом колебательного уровня. Поэтому обычно предполагают, что $n_{j_0+1} = 0$ в уравнении для определения концентрации последнего исследуемого колебательного уровня j_0 . Эта неопределенность в выборе условия для верхнего колебательного уровня слабо влияет на ионосферные параметры, так как основной вклад в изменения ионосферных параметров вносят вариации n_j на его нулевом и нескольких первых колебательных уровнях. На нижней границе (110–130 км) можно пренебречь влиянием диффузии на величины n_j , b . На верхней границе (примерно 700 км и выше) принимается условие отсутствия потоков N₂($j > 0$): $F_j = 0$,

$$\frac{\partial}{\partial z} b = 0.$$

Вместо b можно использовать колебательную температуру

$$T_v = -E_1 / \ln [b(1+b)^{-1}]. \quad (19)$$

В этом случае n_j можно сравнивать с больцмановским распределением

$$n_j^B = n_0^B [b(1+b)^{-1}]^j = n_0^B \exp(-jE_1/T_v^{-1}). \quad (20)$$

Для больцмановского распределения

$$n = n_0(1+b) = n_0 [1 - \exp(-E_1/T_v)]^{-1}. \quad (21)$$

Образующиеся в атмосфере N₂($j > 0$) участвуют в процессах колебательно-колебательного и колебательно-поступательного обмена, в процессе диффузии и в процессах межмодового обмена колебательной энергией. Из рис. 1 видно, что на высотах области E ионосферы характерное время колебательно-колебательного обмена намного меньше всех других вышеуказанных характерных времен и характерное время колебательно-поступательного обмена намного меньше характерного времени диффузии. Поэтому на этих высотах ионосферы в результате процессов колебательно-колебательного обмена формируется квазиравновесное n_j , определяемое из уравнения (16), в котором можно не учитывать процессы колебательно-поступательного обмена и процессы диффузии. Это распределение зависит от величины среднего числа колебательных квантов, вычисляемого из уравнения (17), в котором можно пренебречь диффузионным членом. Характерное время колебательно-колебательного обмена возрастает с ростом высоты, и относительная роль этого процесса в формировании n_j уменьшается при переходе от низких к более высоким высотам, в то время как характерное время диффузии уменьшается с ростом высоты и относительная роль диффузии N₂($j > 0$) увеличивается по мере роста высоты. На высотах области F и внешней ионосферы при переходе от низких к более высоким высотам относительная роль процесса колебательно-поступательного обмена уменьшается, в то время как от-

носительная роль диффузии N₂($j > 0$) возрастает. Если $n_j = n_j^B$, то роль колебательно-поступательного обмена сводится к уменьшению отличия T_v от T_n , а роль диффузии — к уменьшению высотного градиента T_v . В результате процесса диффузии N₂($j > 0$) величина T_v слабо меняется с высотой вблизи и выше высоты $hmF2$ максимума слоя $F2$ ионосферы ($N_e = NmF2$ на высоте $hmF2$). Источники колебательного возбуждения N₂ и диффузия N₂($j > 0$) вызывают отличия n_j от n_j^B и T_v от T_n .

В работах [Павлов и др., 2005, 2008; Pavlov and Pavlova, 2005] проведено сравнение вычисленных и измеренных N_e и T_e над радаром Millstone Hill для геомагнитно-спокойных условий 6 января 1980 г. (высокая солнечная активность: $F10.7 = 221.1$; $10.7p = 207.7$; $\overline{F10.7} = 213$), 3 июня 1979 г. (высокая солнечная активность: $F10.7 = 216.1$; $F10.7p = 206.8$; $\overline{F10.7} = 181$), 16 января 1985 г. (низкая солнечная активность: $F10.7 = 74.7$; $F10.7p = 72.4$; $\overline{F10.7} = 72$) и 12 июля 1986 г. (низкая солнечная активность: $F10.7 = 73.5$; $F10.7p = 74.7$; $\overline{F10.7} = 71$), где $F10.7$ — средне-суточный поток солнечного излучения на длине волны 10.7 см в единицах 10^{-22} Вт м⁻² Гц⁻¹, индексы $F10.7p$ и $\overline{F10.7}$ определены ранее. При этом вычислялись не только ионосферные параметры, но и концентрация O(¹D), в то время как концентрации N и NO брались соответственно из эмпирических моделей NRLMSISE-00 [Picone et al., 2002] и [Titheridge, 1997]. Это позволило учесть источники N₂($j > 0$) в реакциях (5) и (7). Для рассматриваемых условий были решены уравнения (16)–(17) с учетом 10-ти колебательных уровней N₂ и на рис. 2–3 приведены результаты расчетов суточных вариаций отклонений n_j от n_j^B для $j = 1–5$, а также T_v и T_n на высоте $hmF2$. Из этих рисунков видно, что с ростом солнечной активности происходит увеличение T_n , что приводит к росту T_v . При примерно одинаковом уровне солнечной активности переход от зимних к летним дневным условиям вызывает увеличение ψ за счет повышения T_e и рост T_n , что обуславливает увеличение T_v и $T_v - T_n$. При переходе от высокой к низкой солнечной активности происходит увеличение отклонения n_j от n_j^B для второго и более высоких колебательных уровней N₂. Как при высокой, так и при низкой солнечной активности в зимних и летних условиях $n_1/n_1^B < 1$, а отклонение n_j от n_j^B максимально вблизи восхода Солнца для второго и более высоких колебательных уровней N₂.

На высотах области F и внешней ионосферы величина T_n слабо изменяется с высотой и приближенно можно считать, что N₂($j > 0$) в основном диффундируют через O. Учтем также, что $b_0 \ll 1$ и во

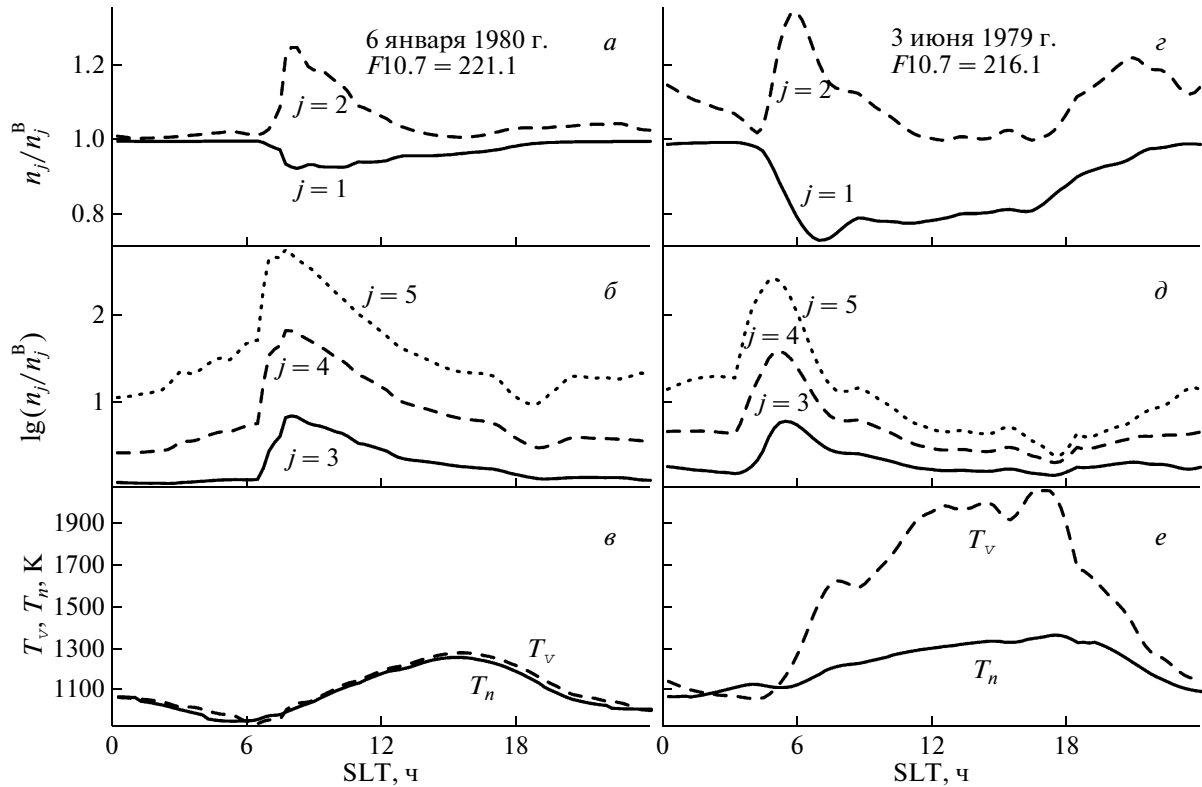


Рис. 2. Отклонение распределения n_j молекул азота по колебательным уровням от Больцмановского распределения n_j^B на высоте максимума слоя F2 ионосферы над станцией некогерентного рассеяния радиоволн Millstone Hill для геомагнитно-спокойных условий 6 января 1980 г. (левые панели а, б, в) и 3 июня 1979 г. (правые панели з, д, е) при высокой солнечной активности для первого (сплошные кривые рис. а, з), второго (штриховые кривые рис. а, з), третьего (сплошные кривые рис. б, д), четвертого (штриховые кривые рис. б, д) и пятого (точечные кривые рис. б, д) колебательных уровней, а также колебательная температура T_v молекул азота (штриховые кривые рис. в, е) и температура T_n нейтральной атмосферы (сплошные кривые рис. в, е).

многих геофизических ситуациях $b \ll 1$. При выполнении этих условий стационарное решение уравнения (17) имеет вид [Павлов, 1985; Павлов, 1988]

$$b = b_0 + (\tau_d \tau_{vt})^{0.5} w^{-1} \left[(e^w - e^{-w}) \int_0^\infty \psi(w) e^{-w} dw + e^{-w} \times \int_0^w \psi(w) e^w dw - e^w \int_0^w \psi(w) e^{-w} dw \right], \quad (22)$$

где $w = 2(\tau_d/\tau_{vt})^{0.5}$.

Из выражения (22) можно сделать вывод, что в области преобладания диффузии, когда $\tau_d \ll \tau_{vt}$, величина b достигает максимального значения $b_{\max} = b_0 + 2(\tau_d \tau_{vt})^{0.5} \int_0^\infty \psi(w) e^{-w} dw$, которое определяет максимальное значение T_v с помощью формулы (19). В области преобладания колебательно-поступательного обмена, когда $\tau_d \gg \tau_{vt}$, $b = b_0$ и $T_v = T_n$. Из (22) следует, что в верхней атмосфере $T_v \geq T_n$. В действительности, возможен случай $T_v < T_n$ при слабых ис-

точниках образования $N_2(j > 0)$ (см. [Pavlov, 1994a, 1996, 1997; Lobzin et al., 1999; Pavlov and Foster, 2001] и рис. 2–3). В этом случае колебательно-поступательный обмен энергией и диффузия $N_2(j > 0)$ определяют T_v . В области преобладания процесса колебательно-поступательного обмена энергией $T_v \approx T_n$. С ростом высоты происходит увеличение T_n и увеличивается влияние процесса диффузии $N_2(j > 0)$ на T_v . При преобладании процесса диффузии над процессом колебательно-поступательного обмена T_v не меняется с ростом высоты, несмотря на увеличение T_n с ростом высоты. Таким образом, условие постоянства T_n , используемое при выводе выражения (22) приводит к неточному заключению: $T_v \geq T_n$.

Результаты расчетов, представленные на рис. 2–3, получены в рамках теоретической модели ионосферы и плазмосферы средних широт [Павлов и др., 2005, 2008; Pavlov and Pavlova, 2005]. Из приведенных расчетов и предыдущих исследований [Павлов, 1985; Павлов и Намгаладзе, 1988; Павлов и др., 2005, 2008; Pavlov, 1988, 19986, 2003, 2006; Pavlov and Buonsanto, 1996; Pavlov et al.,

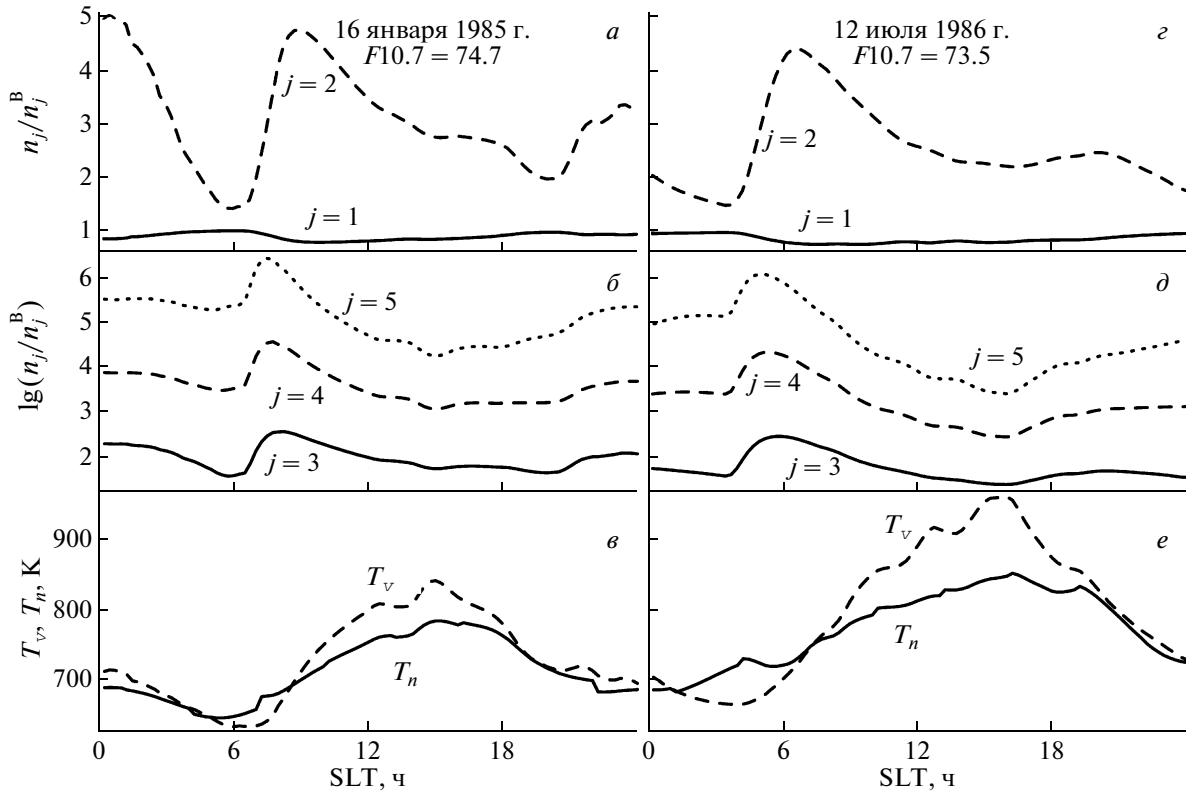


Рис. 3. Отклонение распределения n_j молекул азота по колебательным уровням от больцмановского распределения n_j^B на высоте максимума слоя F2 ионосферы над станцией некогерентного рассеяния радиоволн Millstone Hill для геомагнитно-спокойных условий 16 января 1985 г. (левые панели *a, б, в*) и 12 июля 1986 г. (правые панели *з, д, е*) при низкой солнечной активности для первого (сплошные кривые рис. *a, з*), второго (штриховые кривые рис. *a, з*), третьего (сплошные кривые рис. *б, д*), четвертого (штриховые кривые рис. *б, д*) и пятого (точечные кривые рис. *б, д*) колебательных уровней, а также колебательная температура T_v молекул азота (штриховые кривые рис. *в, е*) и температура T_n нейтральной атмосферы (сплошные кривые рис. *в, е*).

1999, 2000, 2001; Pavlov and Foster, 2001] следует, что столкновения тепловых электронов с молекулами азота при $T_e < 1500\text{--}1600$ К и реакции $O(^1D)$ с N_2 и N с NO не могут вызвать сильное отклонение T_v от T_n на средних и низких широтах. Поэтому неучет реакций $O(^1D)$ с N_2 и N с NO как источника колебательной энергии молекул азота при решении уравнения (17) или при использовании приближенного подхода (22) не приводит к сильному изменению T_v на средних и низких широтах. Сильное отклонение T_v от T_n вызывается столкновениями N_2 с тепловыми электронами при $T_e > 1700\text{--}1800$ К.

Из рис. 1 следует, что на высотах областей *D* и *E* и части области *F1* ионосферы $\tau_{vv} \ll \tau_{vb}, \tau_d, \tau_m^{(1)}, \tau_m^{(2)}$. В этом случае уравнение (16) упрощается:

$$\frac{\partial}{\partial t} n_j = q(j) + \{(j+1)(1+b)n_{j+1} - [(j+1)b + j - (1+b)]n_j + jbn_{j-1}\} / \tau_{vv}. \quad (23)$$

Характерное время изменения b намного больше τ_{vv} . Поэтому система уравнений (23) – система обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Общее решение такой системы уравнений выражается через полиномы Готтлиба [Montroll and Shuler, 1957; Каланов и др., 1981]. При $b \ll 1$ общее стационарное решение (23) имеет вид

$$n_j = n_0 b^j + \tau_{vv} \left[\sum_{i=1}^{j-1} \frac{1}{i} b^{i-j} q(i) + \frac{1}{j} \sum_{i=j}^{\infty} q(i) \right]. \quad (24)$$

Видно, что n_j состоит из больцмановского распределения и слагаемых, обусловленных источниками $N_2(j)$, относительная роль которых линейно увеличивается с ростом τ_{vv} .

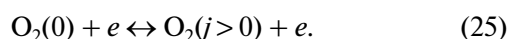
3. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ O₂ ПО КОЛЕБАТЕЛЬНЫМ УРОВНЯМ

Колебательно-возбужденный молекулярный кислород $O_2(j)$, находящийся в основном электрон-

Таблица 4. Результаты измерений [Allan, 1995] энергий E_i^* (в эВ) резонансных пиков $\sigma_{0j}(E)$ и интегральных сечений S_{ij} колебательного возбуждения $O_2(0)$ электронным ударом (S_{ij} – проинтегрированное по энергии значение $\sigma_{0j}(E)$ в окрестности резонансной энергии E_i^* в единицах 10^{-20} см² эВ)

i	E_i^*	S_{i1}	S_{i2}	S_{i3}	S_{i4}	S_{i5}	S_{i6}	S_{i7}
5	0.214	3						
6	0.338	153						
7	0.460	327	1.6					
8	0.579	334	40	–				
9	0.696	238	88	0.06				
10	0.812	138	95	5.6	0.31			
11	0.925	67	76	16	0.36	–		
12	1.036	30	47	21	0.35	0.35		
13	1.144	14	25	18	2.1	0.36	0.02	
14	1.251	6.4	12	12	3.3	–	0.21	
15	1.355	2.6	5.6	6.9	3.1	0.24	0.15	–
16	1.458	1.6	2.4	3.7	2.2	0.55	0.015	0.11
17	1.558		0.94	1.9	1.4	0.62	0.018	0.055
18	1.656		0.6	0.85	0.88	0.52	0.069	0.016
19	1.752			0.38	0.44	0.36	0.10	0.005
20	1.846			0.18	0.25	0.28	0.096	0.018
21	1.937			0.09	0.1	0.15	0.068	0.016
22	2.026				0.06	0.08	0.052	0.015
23	2.113					0.04	0.035	0.012
24	2.197						0.019	0.009

ном состоянии $X \sum_g^-$ на колебательных уровнях $j > 0$, образуется при столкновениях невозбужденных молекул кислорода с электронами



Скорость образования $O_2(j > 0)$ в этом процессе имеет вид

$$q(j) = \{n_0 - n_j \exp(E_j/T_e)\} \int_0^{\infty} \Phi(E) \sigma_{0j}(E) dE, \quad (26)$$

где $n_j = [O_2(j)]$, $\Phi(E)$ – поток электронов, σ_{0j} – сечение перехода с нулевого колебательного уровня O_2 на колебательный уровень j , E_j – выраженная в градусах Кельвина энергия колебательного уровня j , $E_j = jE_1 - j(j-1)\Delta E$, $E_1 = 2239$ К и $\Delta E = 17.3$ К – выраженные в градусах Кельвина энергия первого колебательного уровня и ангармонизм O_2 [Радциг и Смирнов, 1980]. Величина $q(j) = q^+(j) + q^l(j) + q^f(j)$, где $q^+(j)$, $q^l(j)$ и $q^f(j)$, – скорости образования $O_2(j > 0)$ за счет потока электронов, вторгающихся в атмосферу в области высоких широт, потока тепловых электронов и потока фотоэлектронов, соответственно.

При расчетах ионосферных параметров можно не учитывать влияние фотоэлектронов на n_j . До настоящего времени влияние вторгающихся потоков электронов высоких широт на n_j не исследовано. Столкновения $O_2(j > 0)$ с электронами, вторгающимися в атмосферу на высоких широтах, с тепловыми электронами и с фотоэлектронами также приводят к образованию $O_2(j)$ и к процессам девозбуждения этих молекул. Однако сечения этих процессов не известны, что не позволяет оценить их влияние на n_j .

Важным источником образования $O_2(j)$ на нижних колебательных уровнях, которые и определяют влияние $O_2(j > 0)$ на N_e и T_e , являются столкновения $O_2(0)$ с тепловыми электронами. Скорость образования $O_2(j > 0)$ в этих процессах имеет вид [Pavlov, 1998c]

$$q^l(j) = \{n_0 - n_j \exp(E_j/T_e)\} N_e Q_j / E_j, \quad (27)$$

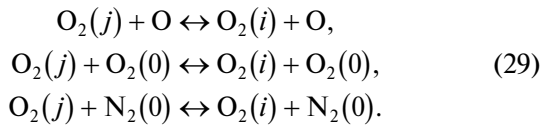
$$Q_j = E_j \sqrt{8} (kT_e \pi m_e)^{-0.5} \sum_{i=5}^{24} S_{ij} X_i \exp(-X_i), \quad (28)$$

где m_e – масса электронов, $X_i = E_i^* (kT_e)^{-1}$, значения E_i^* и S_{ij} представлены в табл. 4.

Ниже примерно 2.5 эВ сечения $\sigma_{0j}(E)$ колебательного возбуждения O₂ электронным ударом представляют собой последовательности очень узких пиков (²Π_g резонансы), причем ширина этих пиков меньше, чем погрешность измерений аппаратуры [Allan, 1995]. Погрешность измерений $\sigma_{0j}(E)$ достигает фактора 2 в области минимумов $\sigma_{0j}(E)$, а точность измерений интегрального сечения S_{ij} каждого пика составляет 35% [Allan, 1995]. Поэтому попытка улучшить точность вычислений Q_j и скорости охлаждения тепловых электронов (см. [Pavlov, 1998c] и п. 4) путем использования общего выражения (2) и измеренных сечений $\sigma_j(E)$ вместо формулы (28) может привести к ухудшению точности расчетов этих величин.

При $T_n = 297$ К в реакции O(¹D) с O₂ с вероятностью около 95% образуются O₂(b¹Σ_g⁺, $j = 0.1$) и только с вероятностью около 5% происходит образование O₂($j > 0$) [Green et al., 2000], т.е. эту реакцию можно не учитывать как источник образования O₂($j > 0$) в атмосфере.

На высотах ионосферы нейтральная атмосфера в основном состоит из O₂, N₂, O. Столкновения O₂(j) с O₂, N₂, O вызывают обмен энергией между колебательными и поступательными степенями свободы:

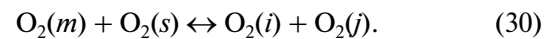


Коэффициент скорости колебательно-поступательного обмена в столкновениях O₂(1)–O измерен при $T_n = 315$ К [Kalogerakis et al., 2005a]: $K_{vt}^{(1)} = 3.2 \times 10^{-12}$ см³ с⁻¹. Согласно расчетам [Esposito and Capitelli, 2007], этот коэффициент сильно не изменяется при увеличении T_n от 315 до 1000 К. Поэтому это значение можно использовать при определении n_j в верхней атмосфере. Теоретические расчеты [Billing and Kolisnick, 1992] коэффициента $K_{vt}^{(2)}$ скорости колебательно-поступательного обмена O₂(1)–O₂(0) аппроксимированы зависимостью $K_{vt}^{(2)} = 1.64 \times 10^{-10} T_n \exp(-205T_n^{-1/3} + 295T_n^{-2/3})$ см³ с⁻¹ [Plönjes et al., 2000], которую можно использовать при вычислении n_j в верхней атмосфере. Если использовать подход Ландау–Теллера, то коэффициент скорости колебательно-поступательного обмена энергией молекулы сорта s и массы m_s , находящейся на первом колебательном уровне с не возбужденной молекулой сорта r и массы m_r , пропорционален $[m_s m_r / (m_s + m_r)]^{2.06}$ [Лосев и др., 1995]. Поэтому будем счи-

тать, что коэффициент $K_{vt}^{(3)}$ скорости колебательно-поступательного обмена энергии O₂(1)–N₂(0) примерно равен $0.87 K_{vt}^{(2)}$. Таким образом, характерное время колебательно-поступательного обмена энергией O₂ в атмосфере $\tau_{vt} = \{K_{vt}^{(1)}[O] + K_{vt}^{(2)}[N_2] + K_{vt}^{(3)}[O_2]\}^{-1}$.

Межмодовый обмен колебательной энергией между колебательно-возбужденными N₂ и O₂ может также оказывать влияние на n_j . Для взаимодействий (11) вид коэффициента $K_m^{(2)}$ скорости передачи колебательной энергии от N₂(1) к O₂(1) представлен в п. 2. Используя значения колебательных энергий первых колебательных уровней O₂ и N₂ и принцип детального равновесия, находим, что коэффициент скорости передачи колебательной энергии от O₂(1) к N₂(1) равен $K_m^{(2)} \exp(-1114/T_n)$. Поэтому характерное время передачи колебательной энергии от O₂(1) к N₂(1) имеет вид $\tau_m = \{K_m^{(2)}[N_2] \exp(-1114/T_n)\}^{-1}$.

Столкновения молекул кислорода, находящихся на разных колебательных уровнях приводят к колебательно-колебательному обмену энергией



Теоретические расчеты коэффициентов скоростей колебательно-колебательного обмена O₂(j) + O₂(0) → O₂($j - 1$) + O₂(1) представлены в работе [Coletti and Billing, 2002] для $j = 1, 2, \dots, 29$ при $T_n = 100, 300, 500, 700, 1000$ К. Из сравнения этих вычислений с результатами измерений коэффициента скорости вышеуказанного колебательно-колебательного обмена для $j = 2$ при $T_n = 330$ К [Kalogerakis et al., 2005b] и при $T_n = 300$ К [Ahn et al., 2006] следует, что результаты расчетов [Coletti and Billing, 2002] занижены примерно в 3 раза. На основании вышесказанного, можно рекомендовать использовать следующие выражения для коэффициента K_{vv} скорости колебательно-колебательного O₂(1)–O₂(0) обмена: $K_{vv} = (1.21 + 0.00255T_n) \times 10^{-13}$ при $T_n \geq 500$ К и $K_{vv} = 2.5 \times 10^{-13}$ для $300 \text{ К} \leq T_n < 500 \text{ К}$, где размерность K_{vv} – см³ с⁻¹. Величина K_{vv} определяет характерное время τ_{vv} колебательно-колебательного обмена O₂: $\tau_{vv} = \{K_{vv}[O_2]\}^{-1}$.

Диффузия O₂($j > 0$) влияет на n_j . Вертикальный поток диффузии O₂($j > 0$) определяется выражением (13), в котором $n_j = [O_2(j)]$, D – коэффициент диффузии O₂(j), $H = kT_n(\text{mg})^{-1}$, m – масса O₂. Характерное время диффузии O₂($j > 0$) имеет вид $\tau_d = H^2/D$. Влияние колебательного возбуждения на коэффициенты диффузии O₂($j > 0$) в бинарных смесях O₂($j > 0$)–O₂(0), O₂($j > 0$)–N₂, O₂($j > 0$)–O не изучено. Поэтому предполагается, что коэффициенты диффузии O₂($j > 0$) и O₂($j = 0$) совпадают, т.е. для атмосферы,

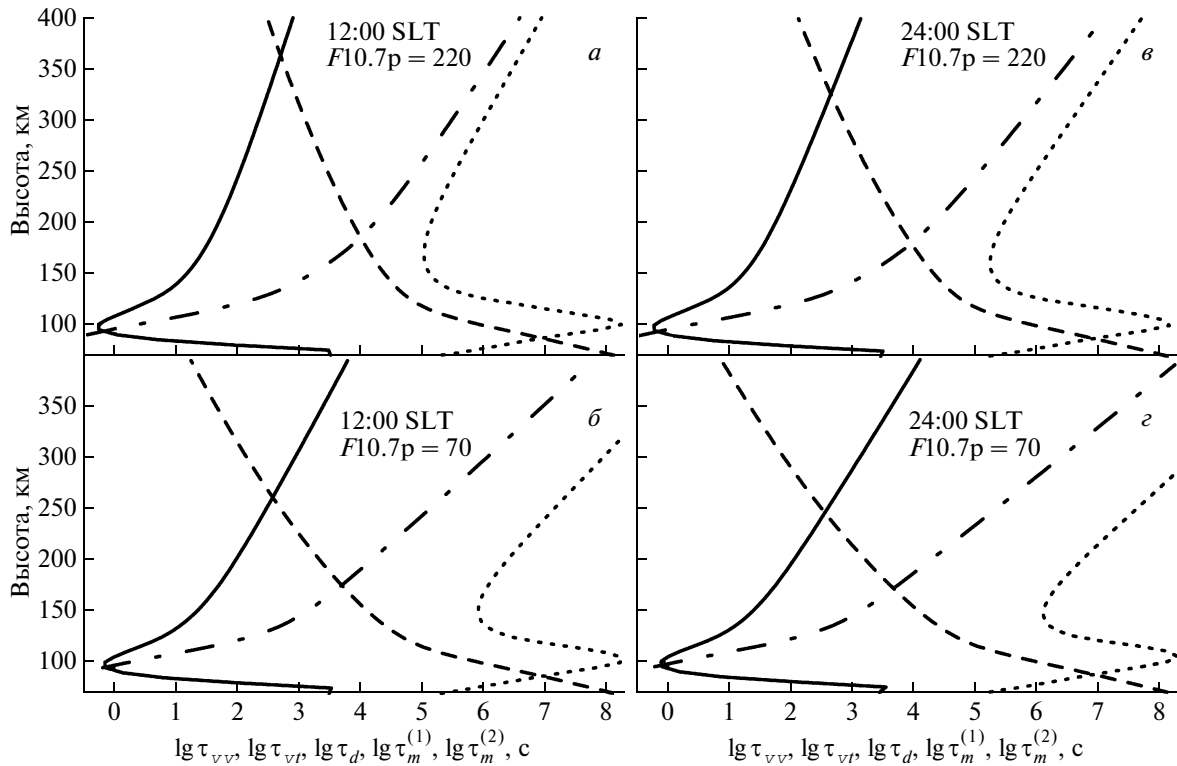


Рис. 4. Характерные времена колебательно-возбужденного O_2 над станцией некогерентного рассеяния радиоволн Millstone Hill в геомагнито-спокойных условиях равноденствия (90-й день года): τ_{vt} (сплошные кривые), τ_{vv} (штрих-пунктирные кривые), τ_d (штриховые кривые) и τ_m (точечные кривые). Рис. *a, б* соответствуют 12:00 SLT, а кривые рис. *в, г* относятся к 24:00 SLT. Расчеты проводились для условий максимума солнечной активности при индексах солнечной активности $F10.7p = \overline{F10.7} = 220$ (рис. *a, в*) и минимума солнечной активности для $F10.7p = \overline{F10.7} = 70$ (рис. *б, г*).

состоящей в основном из O_2 , N_2 и O , коэффициент диффузии $O_2(j > 0)$ имеет вид $D = Y\{[O](D(O_2, O))^{-1} + [N_2](D(O_2, N_2))^{-1} + [O_2](D(O_2, O_2))^{-1}\}^{-1}$, где $Y = [N_2] + [O_2] + [O]$; $D(O_2, O)$, $D(O_2, O_2)$, $D(O_2, N_2)$ – бинарные коэффициенты молекулярной диффузии. Вид $D(O_2, N_2)$ приведен в п. 2. Значение $D(O_2, O) = 9.69 \times 10^{16} T_n^{0.774} Y^{-1}$ [Павлов, 1981], где единицы измерения Y – $см^{-3}$, единицы измерения $D(O_2, O)$ – $см^2 с^{-1}$.

Для смеси двух нейтральных компонент s и r бинарный коэффициент диффузии определяется выражением (14). Для взаимодействия O_2-O_2 величина $\Omega_{ss}^{(1,1)*}$ рассчитана в работе [Abbaspour et al., 2006] для потенциала взаимодействия, близкого к реальному, как функция параметра $T_{ss}^* = kT_n/\epsilon_{ss}$, где $\epsilon_{ss}/k = 95.666$ К – минимальное значение потенциала взаимодействия O_2-O_2 . Расчеты показали, что при $2 \leq T_{ss}^* \leq 25.12$ с точностью до 2.9% численные расчеты [Abbaspour et al., 2006] можно аппроксимировать выражением $\Omega_{ss}^{(1,1)*} = 1.18(T_{ss}^*)^{-0.218}$ с погрешностью менее 1.7% при $2.5 \leq T_{ss}^* \leq 20$. Учтем, что диаметр

сталкивающихся частиц $\sigma_s = 3.526 \times 10^{-8}$ см для используемого потенциала взаимодействия [Abbaspour et al., 2006]. В этом случае $D(O_2, O_2) = 8.57 \times 10^{16} T_n^{0.718} Y^{-1}$, где единицы измерения Y – $см^{-3}$, единицы измерения $D(O_2, O_2)$ – $см^2 с^{-1}$.

На рис. 4 показаны вычисленные характерные времена колебательно-поступательного обмена (сплошные кривые), колебательно-колебательного обмена (штрих-пунктирные кривые) и диффузии (штриховые кривые) $O_2(j > 0)$ и передачи колебательной энергии от $O_2(1)$ к $N_2(1)$ (точечные кривые) для геомагнито-спокойных условий равноденствия (90-й день года). Рис. 4*a, б* соответствуют 12:00 SLT, а кривые рис. 4*в, г* относятся к 24:00 SLT. Расчеты проводились для условий максимума солнечной активности при $F10.7p = \overline{F10.7} = 220$ (рис. 4*a, в*) и минимума солнечной активности при $F10.7p = \overline{F10.7} = 70$ (рис. 4*б, г*). Сравнивая точечные кривые с другими кривыми можно сделать вывод, что выше примерно 65–70 км при вычислении n_j можно пренебречь обменом колебательной энергией в столкновениях $O_2(j > 0)$ с N_2 . Сравнение штриховых и сплошных кривых позволяет сделать вывод, что

при расчетах n_j можно пренебречь влиянием диффузии ниже примерно 260 км при высокой солнечной активности и ниже примерно 205 км при низкой солнечной активности. Отметим, что выше примерно 85 км столкновения O₂($j > 0$)—O вносят основной вклад в характерное время колебательно-поступательного обмена энергии O₂($j > 0$), т.е. возможные неопределенности $K_{vt}^{(2)}$ и $K_{vt}^{(3)}$ не влияют на n_j на этих высотах атмосферы.

В условиях верхней атмосферы влияние ангармоничности O₂ на n_j слабо выражено для $j = 1-5$, которые в основном и определяют влияние O₂($j > 0$) на N_e и T_e . Поэтому для расчетов n_j можно использовать модель гармонического осциллятора. В расчетах n_j можно не учитывать многоквантовых переходы между колебательными уровнями, так как в рассматриваемых условиях вероятности этих переходов малы в сравнении с вероятностью одноквантовых переходов. В этом случае величины n_j определяются из системы уравнений (16)–(17) без учета члена $b_1/\tau_m^{(1)}$ в уравнении (17). В системе уравнений (16)–(17), определяющей [O₂($j > 0$)], следует использовать E_1 , τ_{vt} , τ_{vv} и $q(j)$, приведенные в данном параграфе для O₂. В этой системе уравнений $b_0 = \Theta/(1 - \Theta)$ — равновесный колебательный квант O₂, $\Theta = \exp(-E_1 T_n^{-1})$, $b = \frac{1}{n} \sum_j j n_j$ — среднее число колебательных квантов на одну молекулу O₂, $n = \sum_{j=0}^{\infty} n_j$, $\psi = \frac{1}{n} \sum_j j q(j)$ — средняя частота образования колебательных квантов O₂. Колебательная температура и больцмановское распределение n_j^B по колебательным уровням O₂ определяются выражениями (19)–(20), в которых E_1 и b приведены в настоящем параграфе для O₂. Формула (20) позволяет вычислить $n = [O_2]$ при $n_j = n_j^B$.

Для вычисления n_j из системы уравнений (16)–(17) необходимо знать n_{j+1} . На фиксированной высоте величина n_j убывает с ростом j . Поэтому можно считать, что $n_{j_0+1} = 0$ в уравнении для последнего рассматриваемого колебательного уровня j_0 . Это условие слабо влияет на N_e и T_e , так как основной вклад в изменения N_e и T_e вносят вариации n_0 и n_j нескольких первых колебательных уровней O₂. На нижней границе (примерно 200 км и ниже) можно пренебречь влиянием диффузии на n_j и b . На верхней границе (примерно 700 км и выше) принимается условие отсутствия потоков O₂($j > 0$): $F_j = 0$, $\frac{\partial}{\partial z} b = 0$.

Колебания O₂ не приводит к образованию осциллирующего диполя из-за симметрии молекулы, т.е. эти колебательные переходы являются квадрупольными. В этом случае коэффициент Эйнштейна

для перехода с первого на нулевой колебательный уровень имеет вид (18), в котором q_q и λ_{10} — квадрупольный момент и длина колебательного перехода с первого на нулевой колебательный уровень O₂, приведенные в справочнике [Радциг и Смирнов, 1980]. Это позволяет вычислить $A_{10} = 1.3 \times 10^{-5} \text{ c}^{-1}$ для O₂. Исходя из этой величины A_{10} , из рис. 4 следует, что в атмосфере можно пренебречь влиянием радиационных процессов на n_j в сравнении с намного более быстрыми процессами, определяющими n_j в атмосфере (колебательно-колебательный обмен, колебательно-поступательный обмен и процесс диффузии O₂($j > 0$)). Поэтому радиационные процессы не включены в уравнения колебательной релаксации O₂(j).

После образования O₂(j) участвуют в процессах колебательно-колебательного и колебательно-поступательного обмена с характерными временами τ_{vv} и τ_{vt} и в процессе диффузии с характерным временем τ_d . Рисунок 4 показывает, что выше примерно 105 км при высокой солнечной активности и выше примерно 110 км при низкой солнечной активности (в отличие от N₂($j > 0$)) $\tau_{vv} \gg \tau_{vt}$. Это означает, что выше примерно 110 км в атмосфере вид n_j и T_v определяются процессами образования колебательно-возбужденных молекул кислорода, колебательно-поступательного обмена и диффузией. Колебательно-колебательный обмен не является наиболее быстрым процессом обмена энергией для O₂(j) и о колебательной температуре O₂ можно говорить лишь как о мере колебательной энергии O₂. Под действием колебательно-поступательного обмена происходит уменьшение отличия T_v от T_n , а процессы диффузии O₂($j > 0$) уменьшают высотный градиент T_v . Поэтому в результате процесса диффузии O₂($j > 0$) величина T_v слабо меняется с высотой вблизи и выше $hmF2$.

Из рис. 4 следует, что на высотах 110–200 км при низкой солнечной активности и в области высот 110–250 км при высокой солнечной активности $\tau_{vt} \ll \tau_{vv}$, τ_d , τ_m ; т.е. колебательно-поступательный обмен энергией и источники O₂($j > 0$) определяют n_j . В этом случае при $\Theta \ll 1$ общее стационарное решение уравнения (16) имеет вид

$$n_j = n_0 \Theta^j + \tau_{vt} \left[\sum_{i=1}^{j-1} \frac{1}{i} \Theta^{i-j} q(i) + \frac{1}{j} \sum_{i=j}^{\infty} q(i) \right]. \quad (31)$$

Видно, что n_j состоит из n_j^B с $T_v = T_n$ и слагаемых, обусловленных источниками O₂(j), относительная роль которых линейно увеличивается с ростом τ_{vt} .

В работах [Павлов и др., 2005, 2008; Pavlov and Pavlova, 2005] проведено сравнение вычисленных и измеренных N_e и T_e над радаром Millstone Hill для геомагнито-спокойных условий 6 января 1980 г. и

3 июня 1979 г. при высокой солнечной активности, а также 16 января 1985 г. и 12 июля 1986 г. при низкой солнечной активности. Для рассматриваемых условий были решены уравнения (16)–(17) с учетом 10-ти колебательных уровней O_2 и на рис. 5–6 приведены результаты расчетов суточных вариаций отклонений n_j от n_j^B при $j = 1–5$, а также T_v и T_n на высоте $hmF2$. Видно, что с ростом солнечной активности происходит увеличение T_n , что приводит к росту T_v . При примерно одинаковом уровне солнечной активности переход от зимних к летним дневным условиям вызывает рост T_n и увеличение ψ за счет повышения T_e , что и обуславливает увеличение T_v и $T_v - T_n$.

На высотах области F и внешней ионосферы T_n слабо изменяется с высотой и приближенно можно считать, что $O_2(j > 0)$ в основном диффундируют через O . Учтем также, что $b_0 \ll 1$ и во многих геофизических ситуациях $b \ll 1$. В этом случае решение (22) уравнения (17) определяет стационарное значение b для O_2 . В области преобладания процесса диффузии, когда $\tau_d \ll \tau_{vb}$, величина b достигает максимального значения b_{max} (см. п. 2), определяя максимальное значение T_v (см. выражение (19)). В области преобладания процесса колебательно-поступательного обмена, когда $\tau_d \gg \tau_{vb}$, $b = b_0$ и $T_v = T_n$. Из полученного приближенного аналитического решения (22) следует, что в верхней атмосфере $T_v \geq T_n$. Однако рис. 5–6 показывают, что возможны ситуации, когда $T_v < T_n$. Это – следствие малой величины ψ . В этом случае колебательно-поступательный обмен энергией и процесс диффузии $O_2(j > 0)$ определяют величину T_v . Из-за малой величины ψ в области преобладания процесса колебательно-поступательного обмена энергией $T_v \approx T_n$. С ростом высоты происходит увеличение T_n и усиление влияния диффузии $O_2(j > 0)$ на T_v . Влияние диффузии $O_2(j > 0)$ на T_v вызывает уменьшение высотного градиента T_v и при преобладании диффузии над процессом колебательно-поступательного обмена значение T_v не меняется с ростом высоты, несмотря на увеличение T_n с ростом высоты. Таким образом, условие постоянства T_n , используемое при выводе выражения (22), приводит к неточности T_v .

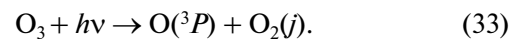
На высотах области D ионосферы, где столкновения O_2 с электронами практически не влияют на n_j , $O_2(j > 0)$ образуются в реакции



где при $M = O_2, N_2$ с вероятностью около 92% образуются электронно-возбужденные молекулы кислорода, а с вероятностью около 8% формируется $O_2(j > 0)$ [Smith, 1984].

Авторы работы [Brasseur and Solomon, 2005] рекомендуют значение $4.7 \times 10^{-33} (T_n/300)^2 \text{ см}^6 \text{ с}^{-1}$ для полного коэффициента скорости реакции (32) при $M = O_2, N_2$, в то время как измерения [Rejaković et al., 2009] дают величину $2.7 \times 10^{-33} \text{ см}^6 \text{ с}^{-1}$ для этого коэффициента при $M = N_2$ для $T_n = 300 \text{ К}$. Отметим, что функция распределения O_2 по колебательным уровням не измерена и не рассчитывалась теоретически для реакции (32).

При фотодиссоциации озона солнечным излучением Хартли полосы (200–310 нм) с вероятностью около 90% идут реакции с образованием электронно-возбужденных молекул кислорода, а с вероятностью около 10% формируется $O_2(j > 0)$ [Slanger and Copeland, 2003]



Квантовый выход $O_2(j > 0)$ может быть выше 10% при $\lambda > 310 \text{ нм}$. Однако максимум сечения поглощения озона формируется около 250–260 нм с резким уменьшением этого сечения выше и ниже 250–260 нм [Brasseur and Solomon, 2005], т.е. рассматриваемый процесс малоэффективен при $\lambda > 310 \text{ нм}$. Функция распределения по колебательным уровням O_2 , образующихся в этой реакции, зависит от λ , причем наибольшее число O_2 формируется на высоких колебательных уровнях [Slanger and Copeland, 2003]. Например, при $\lambda = 226 \text{ нм}$ эта функция распределения имеет первый широкий пик около $j = 14–15$ (максимум) и второй пик около $j = 27–28$ [Miller et al., 1994]. Данная функция распределения, измеренная для $j = 18–22$ на длине волны 266 нм [Hickson et al., 1998], отличается от измерений [Miller et al., 1994].

Источником $O_2(j > 0)$ на рассматриваемых высотах может быть реакция [Allen, 1986]



коэффициент скорости которой аппроксимирован выражением $8 \times 10^{-12} \exp(-2060/T_n) \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$ [Wine et al., 1983]. В этой реакции в основном образуются O_2 в основном электронном состоянии и измеренное распределение O_2 по колебательным уровням имеет максимум на 13-м колебательном уровне [Mask et al., 1996].

Для изучения влияния $O_2(j > 0)$ на концентрации ионов и нейтральных компонентов области D ионосферы необходимо рассчитывать n_j для высоких колебательных уровней (см. п. 4), т.е. необходимо учитывать ангармонизм O_2 . На высотах области D величина n_j в приближении модели ангармонического осциллятора находится из уравнение (15) без учета диффузионного члена с ниже перечисленными заменами. В уравнении (15) следует использовать $E_1, \Delta E, \tau_{vb}, \tau_{vv}$ и $q(j)$, приведенные в настоящем параграфе, и считать $n_j = [O_2(j)]$, $n = \sum_{j=0}^{\infty} n_j \equiv [O_2]$; $\Theta =$

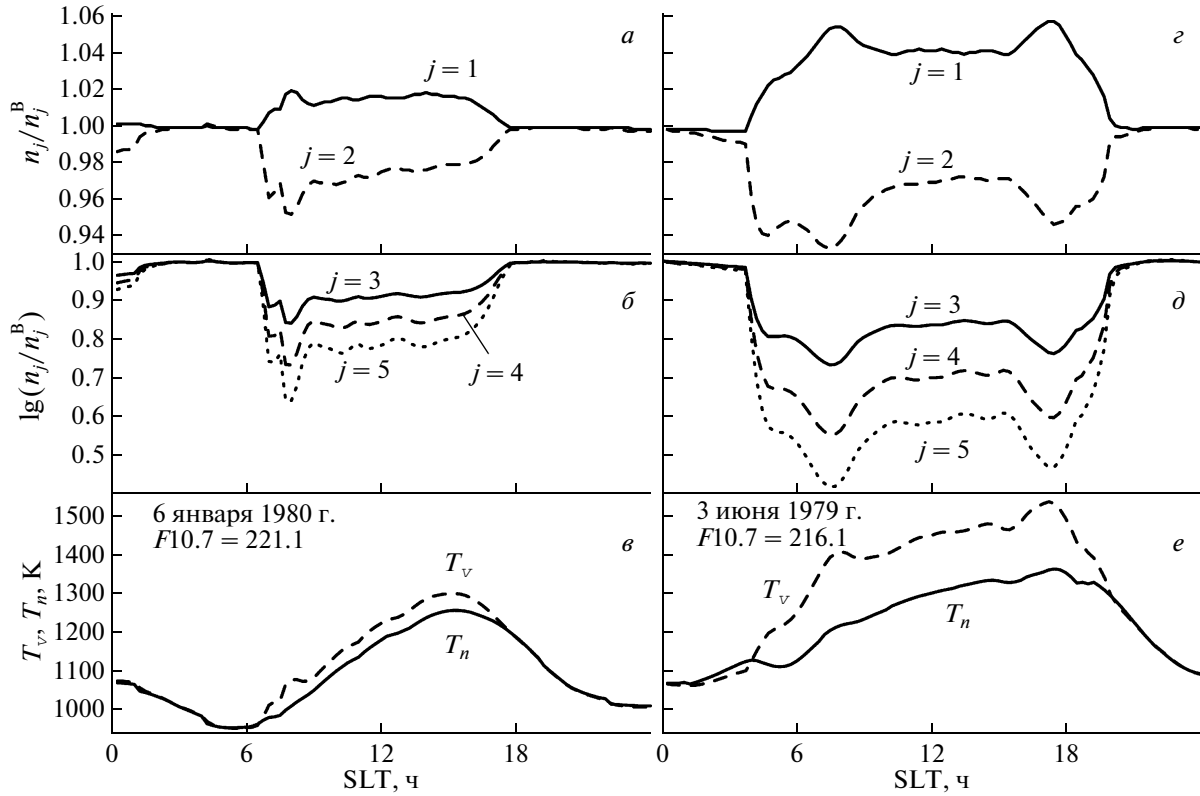


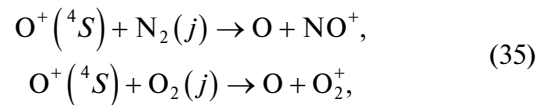
Рис. 5. Отклонение распределения n_j молекул кислорода по колебательным уровням от больцмановского распределения n_j^B на высоте максимума слоя F2 ионосферы над станцией некогерентного рассеяния радиоволн Millstone Hill для геомагнито-спокойных условий 6 января 1980 г. (левые панели *a*, *b*, *e*) и 3 июня 1979 г. (правые панели *c*, *d*, *e*) при высокой солнечной активности для первого (сплошные кривые рис. *a*, *c*), второго (штриховые кривые рис. *a*, *c*), третьего (сплошные кривые рис. *b*, *d*), четвертого (штриховые кривые рис. *b*, *d*) и пятого (точечные кривые рис. *b*, *d*) колебательных уровней, а также колебательная температура T_v молекул азота (штриховые кривые рис. *e*, *e*) и температура T_n нейтральной атмосферы (сплошные кривые рис. *e*, *e*).

$= \exp(-E_1 T_n^{-1})$, $\mu = \exp(2\Delta E/T_n)$. Величины δ_{vV} и δ_{vT} определяют $A(j, i) = (j + 1)\exp(-\delta_{vV}j - i)[1.5 - 0.5 \times \exp(-\delta_{vV}j - i)]$ и $\xi = \exp(\delta_{vT})$, входящие в уравнение (15). После подстановки атомных констант получим для O₂: $\delta_{vV} = 10.37T_n^{-0.5}$, $\delta_{vT} = 3.1 T_n^{-1/3}$ для $\phi_j \geq 20$ и $\delta_{vT} = 10.4T_n^{-0.5}$ при $\phi_j < 20$, где $\phi_j = 1006T_n^{-0.5}(1 - 0.01545j)$.

4. ВЛИЯНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВОЗБУЖДЕННЫХ N₂ И O₂ НА КОНЦЕНТРАЦИЮ И ТЕМПЕРАТУРУ ЭЛЕКТРОНОВ И КОНЦЕНТРАЦИИ НЕЙТРАЛЬНЫХ КОМПОНЕНТОВ

Ионосфера в окрестности *hmF2* и часть внешней ионосферы в основном состоит из ионов O⁺(⁴S), которые образуются в ионосфере при ионизации O(³P) и в химических реакциях электронно-возбужденных

ионов O⁺ (см., например, [Pavlov and Pavlova, 2005]), а исчезают в реакциях



со скоростью рекомбинации

$$L(O^+) = \sum_j ([N_2(j)]\beta_j + [O_2(j)]\gamma_j), \quad (36)$$

где β_j и γ_j — коэффициенты скоростей реакций ионов O⁺(⁴S) с N₂(*j*) и O₂(*j*), $j = 0, 1, 2, \dots$; методы расчетов [N₂(*j*)] и [O₂(*j*)] приведены в п. 2 и 3, соответственно.

Введем эффективные коэффициенты рекомбинации $\beta = \sum_j [N_2(j)]\beta_j/[N_2]$, $\gamma = \sum_j [O_2(j)]\gamma_j/[O_2]$, где $[N_2] = \sum_j [N_2(j)]$, $[O_2] = \sum_j [O_2(j)]$. В этом случае

$$L(O^+) = \beta[N_2] + \gamma[O_2]. \quad (37)$$

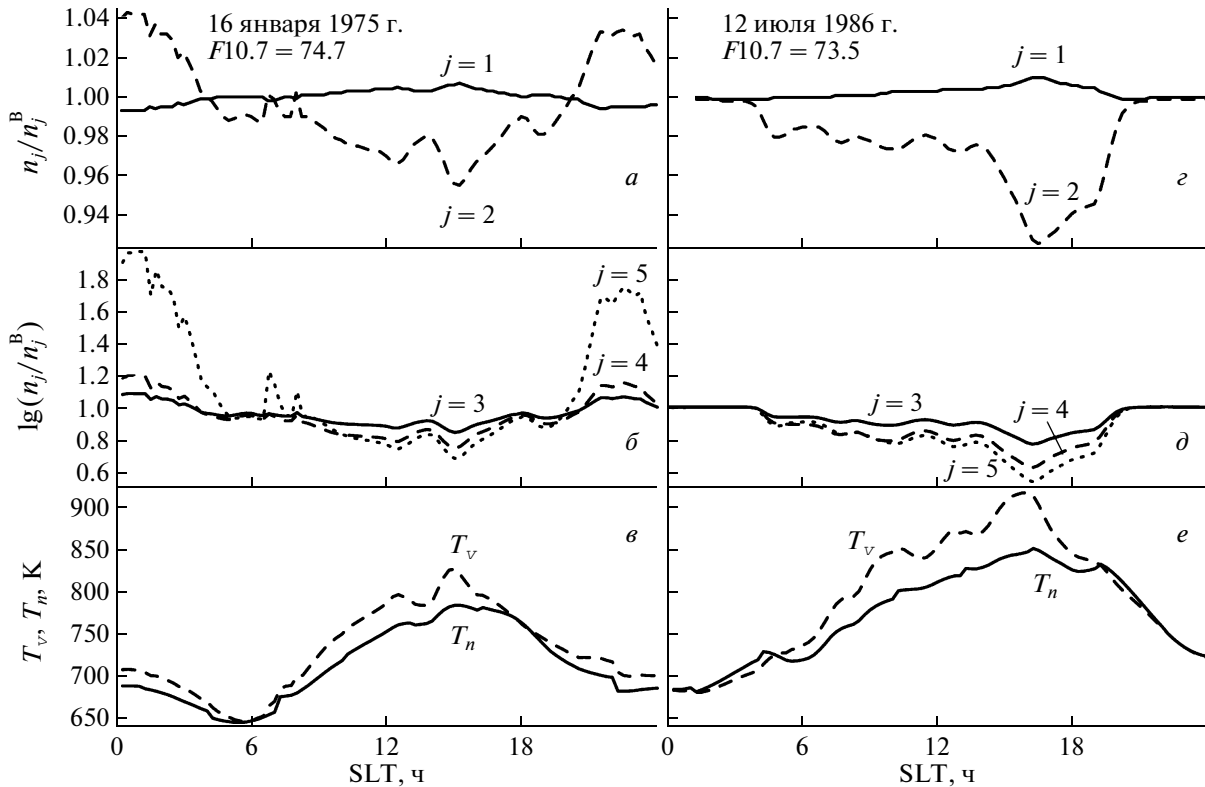


Рис. 6. Отклонение распределения n_j молекул кислорода по колебательным уровням от больцмановского распределения n_j^B на высоте максимума слоя $F2$ ионосферы над станцией некогерентного рассеяния радиоволн Millstone Hill для геомагнито-спокойных условий 16 января 1985 г. (левые панели $a, б, в$) и 12 июля 1986 г. (правые панели $с, д, е$) при низкой солнечной активности для первого (сплошные кривые рис. $a, с$), второго (штриховые кривые рис. $a, с$), третьего (сплошные кривые рис. $б, д$), четвертого (штриховые кривые рис. $б, д$) и пятого (точечные кривые рис. $б, д$) колебательных уровней, а также колебательная температура T_v молекул кислорода (штриховые кривые рис. $в, е$) и температура T_n нейтральной атмосферы (сплошные кривые рис. $в, е$).

Изучению влияния $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на N_e посвящены многочисленные исследования (см., например, обзор [Павлов и Намгаладзе, 1988] и ссылки в работах [Pavlov, 1998b; Павлов и др., 2005]). Из численных расчетов следует, что при вычислении $[O^+(^4S)]$ и N_e можно не учитывать реакции (35) при $j > 5$.

В работах [McFarland et al., 1973; Albritton et al., 1977] приведены результаты измерений β и γ на установках с дрейфовыми трубами при $T_n = 300$ К и 300 К $\leq T_i \leq 6000$ К, когда температура T_i ионов изменялась за счет изменений скорости дрейфа ионов $O^+(^4S)$. В этих экспериментах отсутствовали источники колебательного возбуждения N_2 и O_2 . Пренебрегая влиянием слабого ангармонизма N_2 и O_2 (см. п. 2 и 3) можно считать, что для нижних колебательных уровней $j = 1-5$ справедливы больцмановские распределения $[N_2(j)]$ и $[O_2(j)]$. В этом случае в экспериментах [McFarland et al., 1973; Albritton et al., 1977] колебательные температуры N_2 и O_2 совпадают с T_n . Поэтому при $T_n = 300$ К значения $[N_2(j > 0)] \ll$

$\ll [N_2(0)]$, $[O_2(j > 0)] \ll [O_2(0)]$, $[N_2] \approx [N_2(0)]$, $[O_2] \approx [O_2(0)]$. Учитывая результаты измерений β_j и γ_j [Schmeltekopf et al., 1968; Hierl et al., 1997] для $j > 0$, которые обсуждаются ниже, можно сделать вывод, что $\sum_{j \geq 1} [N_2(j)] \beta_j \ll [N_2(0)] \beta_0$, $\sum_{j \geq 1} [O_2(j)] \beta_j \ll [O_2(0)] \gamma_0$. Поэтому можно считать, что в экспериментах [McFarland et al., 1973; Albritton et al., 1977] измерялись $\beta_0 \approx \beta$ и $\gamma_0 \approx \gamma$.

Измерения β_0 и γ_0 [McFarland et al., 1973] проводились в буферном газе Ag, в то время как экспериментальные данные [Albritton et al., 1977] получены в установке с буферным газом He. В работе [Viehland and Mason, 1977] показано, что именно с выбором буферного газа связано сильное отличие результатов измерений β_0 и γ_0 [McFarland et al., 1973] и [Albritton et al., 1977]. Высокие значения скоростей дрейфа ионов $O^+(^4S)$ приводят к немаксвелловской функции распределения ионов по скоростям в установке с дрейфовыми трубами. При использовании буферного газа Ag отличие функции распределения от максвелловского вида велико в области энергий,

влияющих на β_0 и γ_0 . Поэтому в работе [McFarland et al., 1973] измерены не тепловые β_0 и γ_0 [Viehland and Mason, 1977; St.-Maurice and Torr, 1978], т.е. результаты измерений [McFarland et al., 1973] нельзя использовать в ионосферных исследованиях. В установке с буферным газом He высокие значения скоростей дрейфа ионов O⁺(⁴S) слабо влияют на функцию распределения ионов O⁺(⁴S) по скоростям в областях энергий, влияющих на β_0 и γ_0 . Таким образом, в работе [Albritton et al., 1977] измерены β_0 и γ_0 , более близкие к тепловым коэффициентам β_0 и γ_0 [Viehland and Mason, 1977; St.-Maurice and Torr, 1978], которые необходимы для ионосферных исследований. На основании измерений [Albritton et al., 1977] можно определить тепловые коэффициенты β_0 и γ_0 [Viehland and Mason, 1977; St.-Maurice and Torr, 1978], которые были аппроксимированы в работах [St.-Maurice and Torr, 1978; Hierl et al., 1997; St.-Maurice and Laneville, 1998]. Согласно исследованию [St.-Maurice and Laneville, 1998], тепловой коэффициент β_0 , данный в единицах измерения см³с⁻¹, имеет вид

$$\beta_0(T) = 1.71676 \times 10^{-12} - 7.19934 \times 10^{-13}(T/300) + 1.33276 \times 10^{-13}(T/300)^2 - 9.28213 \times 10^{-15} \times (T/300)^3 + 6.39557 \times 10^{-16}(T/300)^4, \quad (38)$$

300 ≤ T ≤ 3725 K

$$\beta_0(T) = -1.52489 \times 10^{-11} + 7.67112 \times 10^{-13}(T/300) + 1.19064 \times 10^{-13}(T/300)^2 - 1.30858 \times 10^{-15} \times (T/300)^3 + 4.67756 \times 10^{-18}(T/300)^4, \quad (39)$$

3725 ≤ T ≤ 30000 K.

Входящая в это выражение эффективная температура

$$T = (m_i T_n + m_n T_i)(m_i + m_n)^{-1} + m_i m_n V_d^2 (m_i + m_n)^{-1} (3k)^{-1}, \quad (40)$$

где m_i — масса иона, m_n — масса нейтрального компонента, V_d — скорость дрейфа ионов.

Тепловой коэффициент γ_0 , найденный из измерений в дрейфовых трубах, согласуется с более точными измерениями теплового γ_0 [Hierl et al., 1997] при реальном нагреве газа в пределах погрешности измерений этих экспериментальных данных. Авторы работы [Hierl et al., 1997] нормировали тепловой коэффициент γ_0 , найденный из измерений в дрейфовых трубах, и рекомендуют использовать аппроксимацию

$$\gamma_0(T) = 1.6 \times 10^{-11} (300/T)^{0.52} + 5.5 \times 10^{-11} \exp(-6832/T), \quad (41)$$

где T определяется выражением (40), в котором m_n — масса O₂; размерность γ_0 — см³с⁻¹. Точность измерений [Hierl et al., 1997] этого коэффициента выше, чем в измерениях в дрейфовых трубах. Поэтому выражение (41) можно рекомендовать для использования в ионосферных исследованиях вместо формул [St.-Maurice and Laneville, 1998].

В работах [Viehland and Mason, 1977; St.-Maurice and Torr, 1978] доказано, что β_0 и γ_0 зависят от T_n , T_i и V_d только через эффективную температуру T . Поэтому вышеприведенные аналитические аппроксимации для тепловых коэффициентов β_0 и γ_0 могут быть использованы в ионосферных исследованиях не только при $T_n = T_i = 300$ K, но и при произвольных значениях T_n и T_i в рассматриваемых промежутках изменения T .

Отношение нетеплового β_0 [McFarland et al., 1973] к тепловому β_0 составляет около 1.5, 2, 2.5, 2.9 соответственно при $T = 950, 1100, 1250, 1500$ K. К сожалению, в ряде опубликованных работ не тепловой коэффициент [McFarland et al., 1973] использовался при моделировании ионосферы, что могло привести к неверным выводам.

На рис. 5 работы [Schmeltekopf et al., 1968] представлены результаты измерений эффективного коэффициента β при изменении колебательной температуры N₂ от 300 K до 6000 K для $T_i = T_n = 300$ K, а на рис. 6 этой работы приведены найденные значения β_j для $j = 0-11$. Согласно измерениям [Schmeltekopf et al., 1968] при $T_i = T_n = 300$ K для $j = 1-5$

$$\beta_1 = \beta_0, \quad \beta_2 = 38\beta_0, \quad \beta_3 = 85\beta_0, \quad \beta_4 = 183\beta_0, \quad \beta_5 = 262\beta_0. \quad (42)$$

Видно, что с ростом колебательного уровня N₂ происходит сильное увеличение β_j . Согласно измерениям [Schmeltekopf et al., 1968] эффективный коэффициент β увеличивается от 1.3×10^{-12} см³с⁻¹ до 6×10^{-11} см³с⁻¹ при изменении колебательной температуры N₂ от 300 K до 6000 K. Отметим, что согласно работе [Ferguson et al., 1984] перед измерением коэффициентов скоростей колебательного обмена между N₂($j = 1$) и невозбужденными ионами O₂⁺ и NO⁺ проводилось тестирование экспериментальной установки на измерении зависимости β от колебательной температуры N₂. Эти повторные измерения β полностью подтвердили результаты работы [Schmeltekopf et al., 1968].

Эффективный коэффициент β скорости реакции O⁺(⁴S) с N₂ был измерен в работе [Hierl et al., 1997] при равенстве T_n , T_i и колебательной температуры N₂ для $300 \text{ K} \leq T_n \leq 1600 \text{ K}$. Измерения [Hierl et al., 1997] впервые показали, что найденные в работе [Schmeltekopf et al., 1968] отношения β_j/β_0 не зависят от T_n и T_i . Таким образом, выражения (38),

(39), (42) позволяют вычислить скорость рекомбинации $O^+(^4S)$ с N_2 , если рассчитаны $[N_2(j) = 0, 1, \dots, 5]$.

Иногда в ионосферных исследованиях для оценочных расчетов принимается равенство T, T_n, T_i и колебательной температуры N_2 . В этом случае результаты измерений β [Hierl et al., 1997] в установке с нагревом газа можно аппроксимировать формулой

$$\beta = (2.019 - 4.264 \times 10^{-3}T + 6.208 \times 10^{-6}T^2 - 4.898 \times 10^{-9}T^3 + 1.620 \times 10^{-12}T^4) \times 10^{-12}, \quad (43)$$

где размерность $\beta - \text{см}^3 \text{с}^{-1}$, $300 \text{ K} \leq T \leq 1600 \text{ K}$.

Эффективный коэффициент γ скорости реакции $O^+(^4S)$ с O_2 был измерен в работе [Hierl et al., 1997] в установке с нагревом газа при равенстве T, T_n, T_i и колебательной температуры O_2 для $300 \text{ K} \leq T_n \leq 1800 \text{ K}$. Из этих измерений в приближении Больцмановского распределения $O_2(j)$ по колебательным уровням можно определить [Hierl et al., 1997; Pavlov, 1998b; Pavlov et al., 1999]

$$\gamma_1(T) = \gamma_0(T), \quad \gamma_2(T) = 5\gamma_0(T), \quad \gamma_3(T) = 50\gamma_0(T), \quad (44)$$

$$\gamma_4(T) = 50\gamma_0(T), \quad \gamma_5(T) = 50\gamma_0(T).$$

Таким образом, выражения (40), (41), (44) позволяют вычислить скорость рекомбинации $O^+(^4S)$ с O_2 , если рассчитаны концентрации $O_2(j=0, 1, \dots, 5)$. Если в расчетах принимается равенство T_n, T_i и колебательной температуры O_2 , то результаты измерений γ в установке с нагревом газа можно аппроксимировать формулой [Hierl et al., 1997]

$$\gamma = 1.7 \times 10^{-11} (300/T)^{0.77} + 8.54 \times 10^{-11} \exp(-3464/T), \quad (45)$$

где размерность $\gamma - \text{см}^3 \text{с}^{-1}$, $300 \text{ K} \leq T \leq 1800 \text{ K}$.

Изменения $[N_2(j)]$ и $[O_2(j)]$, входящие в $L(O^+)$, оказывают влияние на $[O^+(^4S)]$ и N_e , что в свою очередь служит источником вариаций T_e . Кроме того, скорости охлаждения тепловых электронов в процессах (1) и (25) зависят от $[N_2(j)]$ и $[O_2(j)]$ [Pavlov, 1998a, c]:

$$L(e, N_2) = N_e \sum_{j>0} Q_{0j} \{ [N_2(0)] - [N_2(j)] \exp(E_j T_e^{-1}) \} + N_e \sum_{j>1} Q_{1j} \{ [N_2(1)] - [N_2(j)] \exp[(E_j - E_1) T_e^{-1}] \}, \quad (46)$$

$$L(e, O_2) = N_e \sum_{j>0} Q_j \{ [O_2(0)] - [O_2(j)] \exp(E'_j T_e^{-1}) \},$$

где Q_{0j}, Q_{1j} и Q_j определены выражениями (4) и (28), $E_j = 3353j - 20.6j(j-1)$ и $E'_j = 2239j - 17.3j(j-1)$ — энергии колебательных уровней N_2 и O_2 , соответственно [Радциг и Смирнов, 1980]. Поэтому часть

зависимости T_e от $[N_2(j)]$ и $[O_2(j)]$ связана с изменениями $L(e, N_2)$ и $L(e, O_2)$.

Отклонение $[N_2(j)]$ от Больцмановского вида (20) не меняет кардинально вывод о степени влияния $N_2(j)$ на $[O^+(^4S_1)]$ и N_e . С другой стороны, существующая неопределенность коэффициентов скоростей процессов, определяющих $[N_2(j)]$ (см. п. 2), может привести к заметной погрешности теоретических расчетов отклонения $[N_2(j)]$ от Больцмановского вида (20). Поэтому при вычислении ионосферных параметров можно ограничиться решением одного уравнения (17) для определения среднего числа колебательных квантов N_2 и принять Больцмановское распределение (20) для N_2 . При расчетах параметров ионосферы и плазмосферы средних и низких широт, не требующих высокой точности, можно использовать приближенный подход (22) [Pavlov and Buonsanto, 1996].

Из рис. 4 видно, что $\tau_{vi} \ll \tau_{vv}$ для O_2 выше примерно 110 км и о колебательной температуре O_2 можно говорить лишь как о мере колебательной энергии. Несмотря на то, что Больцмановское распределение по колебательным уровням с колебательной температурой не формируется, использование такого эффективного Больцмановского распределения вместо приведенных на рис. 5–6 сложных расчетов $[O_2(j)]$ может упростить расчеты ионосферных параметров. Как показывают расчеты, отклонение $[O_2(j)]$ от Больцмановского вида (20) слабо влияет на $[O^+(^4S)]$, N_e и T_e в ионосфере средних и низких широт. Поэтому достаточно решить лишь одно уравнение (17) или использовать приближение (22) для определения среднего числа колебательных квантов O_2 и его колебательной температуры. При расчетах параметров ионосферы средних и низких широт, не требующих повышенной точности можно использовать Больцмановское распределение (20) с колебательной температурой O_2 , равной T_n при вычислении $[O_2(j)]$. Не высокие погрешности вычислений ионосферных параметров при использовании этих приближений можно объяснить тем, что на высотах области F вклад реакций $O^+(^4S)$ с $N_2(j \geq 0)$ и $O_2(0)$ в $L(O^+)$ заметно больше, чем вклад реакций $O^+(^4S)$ с $O_2(j > 0)$.

При столкновениях N_2 с тепловыми электронами часть колебательной энергии N_2 переходит в тепловую энергию электронов. На средних и низких широтах $L(e, N_2)$ слабо зависит от второго слагаемого, обусловленного возбуждением $N_2(1)$ электронным ударом. Поэтому теоретически в результате процессов колебательного возбуждения N_2 тепловыми электронами и девозбуждения N_2 , теп-

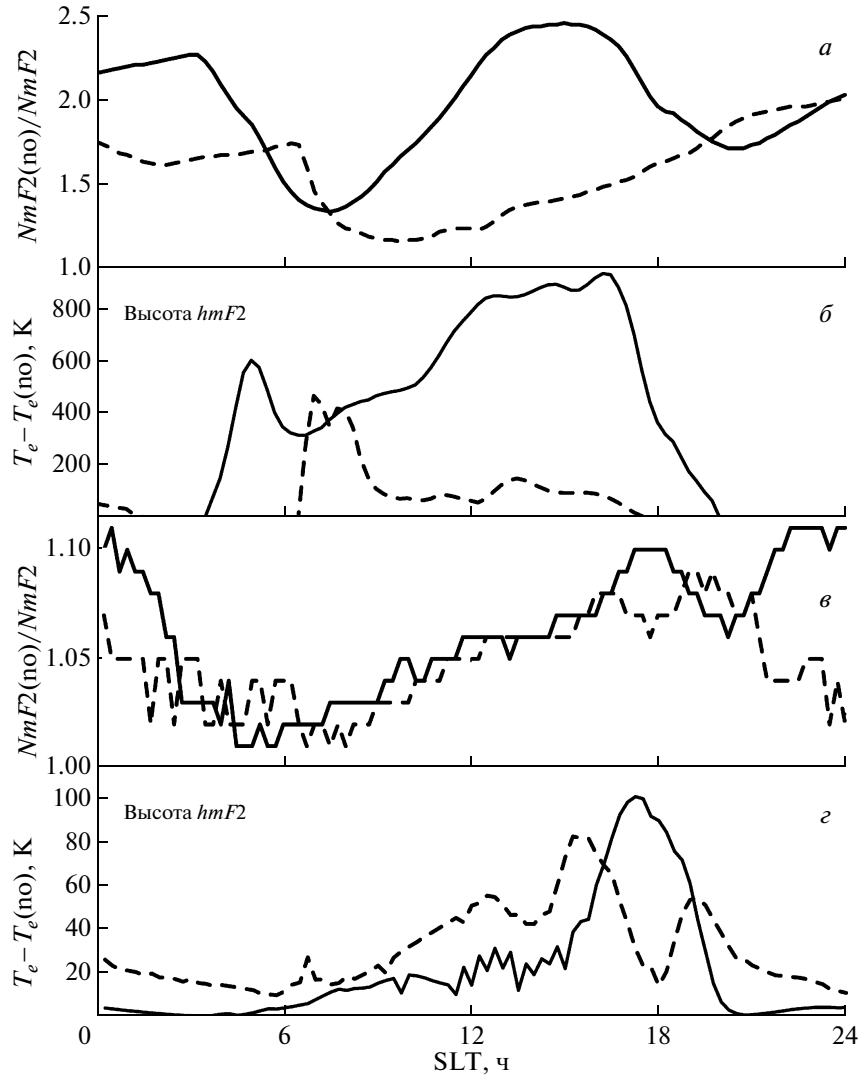


Рис. 7. Сравнение $NmF2(no)$ и $T_e(no)$ (T_e на высоте $hmF2$), рассчитанных без учета $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в $L(O^+)$, с $NmF2$ и T_e на высоте $hmF2$, вычисленных с учетом $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в $L(O^+)$, над станцией некогерентного рассеяния радиоволн Millstone Hill для геомагнито-спокойных условий 3 июня 1979 г. (сплошные кривые рис. а, б), 6 января 1980 г. (штриховые кривые рис. а, б), 12 июля 1986 г. (сплошные кривые рис. в, г) и 16 января 1985 г. (штриховые кривые рис. в, г).

ловые электроны могут не охлаждаться, а нагреваться, если

$$\sum_{j>0} Q_{0j} \{ [N_2(0)] - [N_2(j)] \exp(jE_1 T_e^{-1}) \} < 0. \quad (47)$$

Такой гипотетический нагрев электронов, связанный с $N_2(j > 0)$, привлекался для интерпретации зондовых измерений T_e области E ионосферы [Oyama, 2000; Kurihara et al., 2003], где измеренная T_e была заметно больше T_n . Однако теоретические расчеты [Pavlov, 1994b], основанные на решении уравнения теплопроводности электронов с учетом распределения (24) для $[N_2(j)]$ показывают, что формирование $N_2(j > 0)$ в реакциях (5) и (6) очень слабо влияет на T_e ионосферы средних широт на высотах

от 100 км до 140 км и $T_e \approx T_n$. Таким образом, заметное отличие T_e от T_n , зарегистрированное в ряде зондовых измерений на высотах области E ионосферы средних широт не связано с $N_2(j > 0)$.

Результаты расчетов концентраций и температур ионов и электронов над радаром Millstone Hill для геомагнито-спокойных условий 6 января 1980 г. (высокая солнечная активность), 3 июня 1979 г. (высокая солнечная активность), 16 января 1985 г. (низкая солнечная активность) и 12 июля 1986 г. (низкая солнечная активность) [Павлов и др., 2005, 2008] можно использовать для иллюстрации влияния $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на $NmF2$ и T_e на высоте $hmF2$. На рис. 7 приведено сравнение $NmF2(no)$ и $T_e(no)$ (T_e на высоте $hmF2$), рассчитанных без учета $N_2(j > 0)$ и

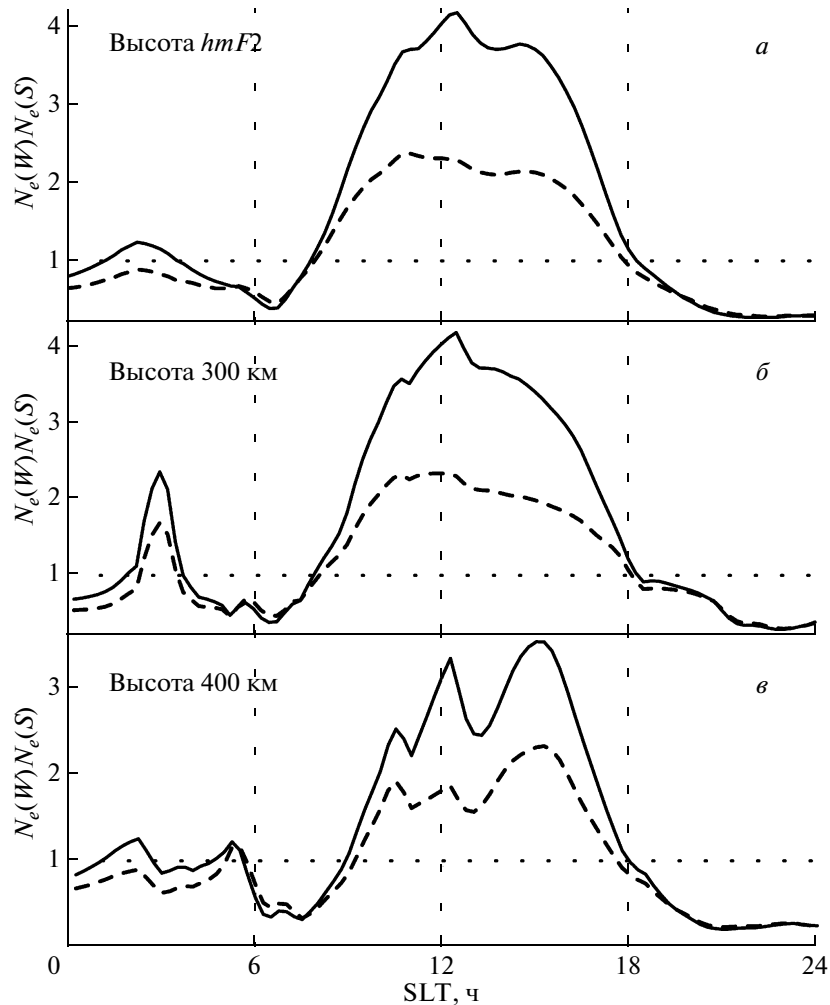


Рис. 8. Зависимость отношения $N_e(W)/N_e(S)$ от солнечного местного времени, где $N_e(W)$ и $N_e(S)$ – концентрации электронов соответственно 6 января 1980 г. и 3 июня 1979 г. на высоте $hmF2$ (а), 300 (б), 400 км (в) над радаром Millstone Hill. Сплошные и штриховые кривые соответствуют модели ионосферы и плазмосферы с учетом и без учета $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в скорости рекомбинации ионов O^+ (4S).

$O_2(j > 0)$ в $L(O^+)$, с $NmF2$ и T_e на высоте $hmF2$, вычисленных с учетом $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в $L(O^+)$, над радаром Millstone Hill для этих условий. Во всех расчетах скорость дрейфа плазмы, обусловленная ветром, выбиралась из условия согласования вычисленных и измеренных $hmF2$ на каждом шаге по времени, т.е. в каждый момент времени значения $hmF2$ близки в расчетах с учетом и без учета $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в $L(O^+)$. Поэтому результаты расчетов [Павлов и др., 2005, 2008] не позволяют изучить влияние $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на $hmF2$. Согласно этим расчетам, $1.16 \leq NmF2(\text{no})/NmF2 \leq 2.47$ и $0 < T_e - T_e(\text{no}) < 942$ К при высокой солнечной активности, в то время как при низкой солнечной активности $1.01 \leq NmF2(\text{no})/NmF2 \leq 1.11$ и $0 < T_e - T_e(\text{no}) < 102$ К. Таким образом, $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ сильно влияют на N_e и T_e в условиях высокой солнечной ак-

тивности и это влияние мало при низкой солнечной активности. Рис. 7а, б показывают, что, за исключением коротких промежутков времени, влияние $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на $NmF2$ и T_e на высоте $hmF2$ усиливается при переходе от 6 января 1980 г. к 3 июня 1979 г. Это связано с увеличением T_n и T_e при переходе от зимних к летним дневным геомагнито-спокойным условиям на высотах области F ионосферы для данного SLT при примерно одной и той же солнечной активности.

Введем отношение $N_e(W)/N_e(S)$, где $N_e(W)$ и $N_e(S)$ – концентрации электронов на одной и той же высоте над радаром Millstone Hill соответственно 6 января 1980 и 3 июня 1979 г. На рис. 8 приведены результаты расчетов $N_e(W)/N_e(S)$ на высоте $hmF2$ (а), 300 км (б), 400 км (в). Сплошные и штриховые кривые соответствуют модели с учетом и без учета $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в $L(O^+)$. Из этого рисунка и рас-

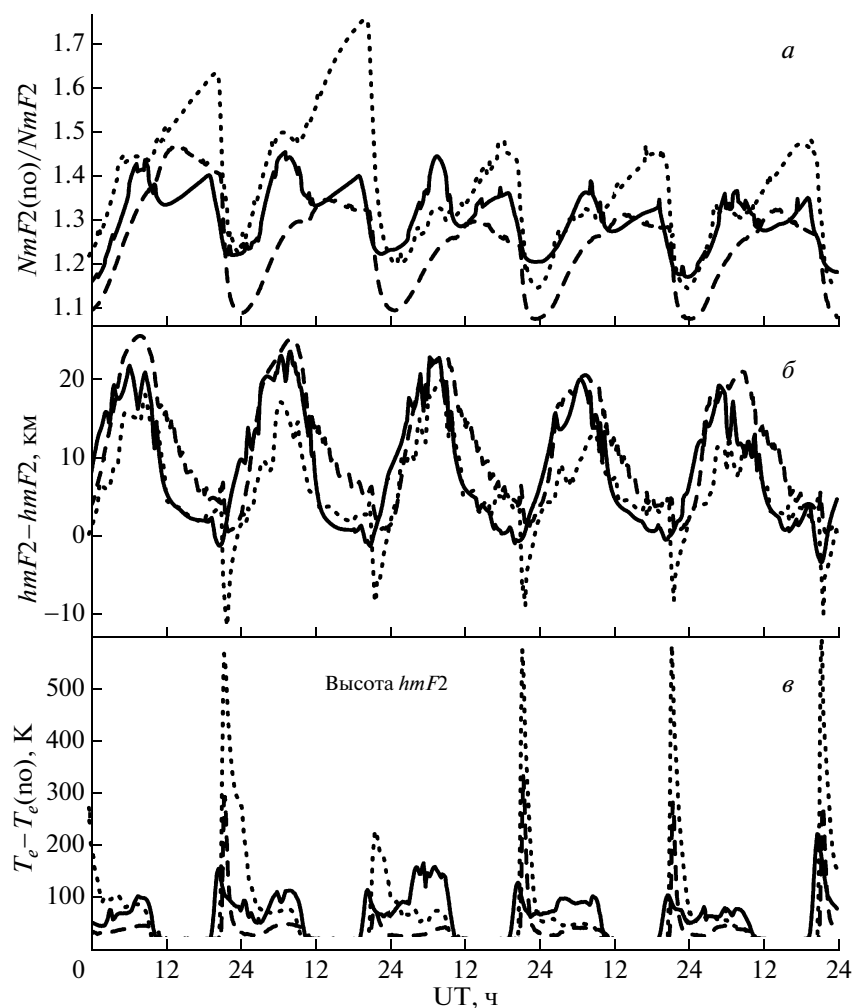


Рис. 9. Сравнение $NmF2(no)$, $hmF2(no)$ и $T_e(no)$ (T_e на высоте $hmF2$), рассчитанных без учета $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в $L(O^+)$ с $NmF2$, $hmF2$ и T_e на высоте $hmF2$, вычисленных с учетом $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в $L(O^+)$, над японским радаром (сплошные кривые) и ионозондами Manila (штриховые кривые) и Darwin (точечные кривые) 22–26 апреля 1990 г. Значения $SLT-UT = 09:04, 08:04$ и $08:44$ соответственно для японского радара и ионозондов Manila и Darwin.

четов [Павлов и др., 2008] для других высот следует, что в дневных условиях во внешней ионосфере с ростом высоты происходит уменьшение амплитуды и промежутка времени существования зимней аномалии N_e и уменьшение влияния $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на характеристики явления зимней аномалии. Отличия между влиянием $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на N_e в зимних и летних условиях обуславливает заметное влияние $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на явление зимней аномалии N_e при высокой солнечной активности. Из рис. 8 можно сделать вывод, что модель без учета $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ не может корректно описать явление зимней аномалии N_e при высокой солнечной активности. Этот вывод подтверждается результатами работы [Rishbeth et al., 2000], показывающими, что теоретическая модель без учета $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ не способна описать наблюдаемые сезонные вариации N_e . При низкой солнечной активнос-

сти $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ практически не влияют на параметры зимней аномалии N_e .

В работе [Pavlov and Fukao, 2007] проведено сравнение вычисленных и измеренных $NmF2$, $hmF2$ для низкоширотных ионозондов Kokubunji, Yamagawa, Okinawa, Manila, Vanimo, Darwin и японского радара на Shigaraki в геомагнито-спокойных условиях 22 апреля 1990 г. и во время 4-х геомагнитных бурь 23–26 апреля 1990 г. при высокой солнечной активности ($F10.7 = 189-233$). Для этих условий на рис. 9 приведено сравнение $NmF2(no)$, $hmF2$ и $T_e(no)$, рассчитанных без учета $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в $L(O^+)$ с $NmF2$, $hmF2$ и T_e , вычисленных с учетом $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в $L(O^+)$, над японским радаром (сплошные кривые) и ионозондами Manila (штриховые кривые) и Darwin (точечные кривые), расположенных на $34.5, 14.6$ и -12.5° географической широты и $136.1, 121.1$ и 131.0° географической долготы, соот-

ветственно. С учетом отличий географических и геомагнитных полюсов и различных местоположений центров Земли и геомагнитного диполя для 1990 г. геомагнитные широты японского радара и ионозондов Manila и Darwin равны 25.8, 3.3 и -25.3° , а геомагнитные долготы составляют 203.6, 189.9 и 202.4° , соответственно. Используемая в модели скорость дрейфа плазмы, обусловленная ветром, не зависит от учета или не учета $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в $L(O^+)$. Поэтому результаты модельных расчетов позволяют изучить влияние $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на $hmF2$. При учете влияния $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на параметры ионосферы использовалось больцмановское распределение $N_2(j)$ и $O_2(j)$ по колебательным уровням. Среднее число колебательных квантов N_2 вычислялось путем решения уравнения (17), а колебательная температура O_2 принималась равной T_n .

Согласно расчетам, $1.15 < NmF2(\text{no})/NmF2 < 1.46$, $-4 < hmF2 - hmF2(\text{no}) < 24$ км и $0 < T_e - T_e(\text{no}) < 202$ К над японским радаром, $1.07 < NmF2(\text{no})/NmF2 < 1.47$, $0 < hmF2 - hmF2(\text{no}) < 26$ км и $0 < T_e - T_e(\text{no}) < 314$ К над ионозондом Manila и $1.14 < NmF2(\text{no})/NmF2 < 1.76$, $-11 < hmF2 - hmF2(\text{no}) < 21$ км и $0 \leq T_e - T_e(\text{no}) < 600$ К над ионозондом Darwin. Отличие колебательной температуры N_2 от T_n на высоте $hmF2$ находится в пределах от -59 до 100 К (радар), от -35 до 142 К (Manila) и от -42 до 417 К (Darwin). Можно сделать вывод, что $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ заметно влияют на N_e области F ионосферы низких широт в условиях высокой солнечной активности. Усиление этого влияния над ионозондом Darwin в основном обусловлено увеличением колебательной температуры N_2 за счет увеличения T_e в области высот, где $\tau_d \sim \tau_{vt}$ для N_2 (см. п. 2). Наиболее сильное влияние $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на T_e происходит в дневных условиях вблизи восхода Солнца в окрестности локального максимума в суточном изменении T_e .

Следует отметить, что в уравнение для определения скорости ветра входит член, зависящий от концентраций основных ионов NO^+ , O_2^+ и $O^+(^4S)$ областей E и F ионосферы [Брюнелли и Намгаладзе, 1988]. Зависимость скорости ветра от $[O^+(^4S)]$ приводит к влиянию $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на скорость дрейфа плазмы вдоль магнитного поля, обусловленную ветром, через механизм зависимости $[O^+(^4S)]$ от $[N_2(j > 0)]$ и $[O_2(j > 0)]$, включающий в себя вариации $[N_2(j > 0)]$, $[O_2(j > 0)]$, $[O^+(^4S)]$ и T_e . Результаты расчетов влияния $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на параметры ионосферы, приведенные на рис. 7–9, не учитывают этих изменений скорости дрейфа плазмы вдоль магнитного поля. Рассматриваемые вариации скорости дрейфа плазмы вдоль магнитного поля, обусловленные воздействием $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на $[O^+(^4S)]$ и T_e , могут изменить параметры ионосферы, и необходимо провести численные расчеты, чтобы исследовать относительную роль этого влия-

ния и его зависимости от широты, сезона, местного времени и уровней солнечной и геомагнитной активности.

После выхода в свет обзоров [Павлов и Намгаладзе, 1988; Torr and Torr, 1982; Pavlov, 1988] опубликованы многочисленные исследования влияния $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на N_e , T_e ионосферы низких и средних широт (см., например, [Павлов и др., 2005, 2008; Pavlov, 1994a, 1998b, 2005, 2006; Pavlov and Buonsanto, 1996; Pavlov and Foster, 2001; Pröls and Werner, 2002; Jenkins et al., 1997; Pavlov and Pavlova, 2004, 2005; Pavlov et al., 1999, 2000, 2001, 2004, 2006]). Влияние $N_2(j > 0)$ или $O_2(j > 0)$ на N_e и T_e области F ионосферы усиливается с ростом T_n и T_e на высотах, где $\tau_d \sim \tau_{vt}$ для N_2 или O_2 , соответственно. Это влияние сильно изменяет N_e и T_e области F ионосферы (например, уменьшая $NmF2$ до 2–3 раз) в максимуме солнечной активности и слабо выражено в условиях низкой солнечной активности. При переходе от геомагнито-спокойным к возмущенным условиям происходят изменения концентраций нейтральных компонентов и T_n , что в ряде случаев приводит к уменьшению N_e (отрицательное возмущение N_e во время геомагнитной бури) и увеличению T_e [Брюнелли и Намгаладзе, 1988]. В результате этого увеличения T_e усиливается влияние $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на N_e и T_e области F ионосферы, уменьшая N_e и увеличивая T_e . Таким образом, как впервые показано в работе [Pavlov, 1994a], часть отрицательных возмущений N_e области F ионосферы обусловлена усилением влияния $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на N_e и T_e в геомагнито-возмущенных условиях. Увеличение N_e (положительное возмущение N_e во время геомагнитной бури, возникающее, например, при изменении скорости дрейфа плазмы) и соответствующее уменьшение T_e на высотах, где $\tau_d \sim \tau_{vt}$ для N_2 или O_2 , может привести к ослаблению влияния $N_2(j > 0)$ или $O_2(j > 0)$ на N_e и T_e области F ионосферы, увеличивая N_e и уменьшая T_e . Поэтому часть положительных возмущений N_e области F ионосферы может быть связана с ослаблением влияния $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на N_e и T_e в геомагнито-возмущенных условиях.

Повышенная интенсивность свечения субавроральной атмосферы на длине волны 630 нм (устойчивые красные дуги) обусловлена повышенной T_e на высотах области F и части внешней ионосферы за счет потока тепла из плазмосферы (увеличение образования $O(^1D)$ в столкновениях $O(^3P)$ с тепловыми электронами) [Брюнелли и Намгаладзе, 1988; Kozyra et al., 1997]. Этот рост T_e вызывает усиление влияния $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на N_e и T_e , уменьшая N_e и увеличивая T_e области F и внешней ионосферы, т.е. рассматриваемое увеличение $[N_2(j > 0)]$ и $[O_2(j > 0)]$ приводит к усилению интенсивностей свечения устойчивых красных дуг. Расчеты [Павлов, 1989; Pavlov, 1996, 1997; Lobzin et al., 1999] показыва-

Таблица 5. Коэффициенты для вычисления скоростей реакций N₂(*j*) + O → NO + N

<i>j</i>	A _{NO} (<i>j</i>)	B _{NO} (<i>j</i>)	C _{NO} (<i>j</i>)	D _{NO} (<i>j</i>)
10	-10.553	-3.5785	0.10993	0
11	-10.761	-2.1786	0.065508	0
12	-10.546	-2.0185	0.63923	-0.086991
13	-10.496	-1.3926	0.49675	-0.068906
14	-10.413	-1.0020	0.35965	-0.050763
15	-10.299	-0.79517	0.29601	-0.043939
16	-10.211	-0.55626	0.16353	-0.021204
17	-10.099	-0.47656	0.15306	-0.023201
18	-9.9925	-0.47058	0.20699	-0.038499
19	-9.9557	-0.26060	0.072218	-0.014709
20	-9.9303	-0.088046	-0.057985	0.010343

ют, что учет N₂(*j* > 0) в модели ионосферы вызывает существенное увеличение *T_e* и уменьшение *N_e* на высотах области *F* и части внешней ионосферы, где в основном возникает свечение устойчивых красных дуг.

На средних и высоких широтах увеличение широты вызывает рост *T_e* на высоте около 350 км в северном и южном полушариях около равноденствия и в северном полушарии вблизи летнего солнцестояния [Tuhlik et al., 2009]. По данным приборов спутника АЕ-С на высоте около 300 км в ночное время область главного ионосферного провала *N_e* характеризуется повышенными *T_e* [Brinton et al., 1976]. Результирующий рост [N₂(*j* > 0)] и [O₂(*j* > 0)] уменьшает *N_e*, углубляя главный ионосферный провал *N_e*. Очень высокие *T_e* ≥ 5000 К были измерены на высоте 500 км в авроральной зоне в дневное время [Wickwar and Kofman, 1984]. По данным приборов спутника DE 2 значение *T_e* достигало 8000–10000 К в области каспа на высоте 800 км [Curtis et al., 1985]. В работе [Pitout and Blelly, 2003] отмечается, что согласно радарным наблюдениям область *F* каспа может быть зоной пониженных *N_e* несмотря на повышенную ионизацию атмосферы вторгающимися электронами, причем *T_e* сильно увеличена на этих высотах. Часть этого понижения *N_e* может быть связана с увеличением *L*(O⁺) за счет роста [N₂(*j* > 0)] и [O₂(*j* > 0)]. Однако усиление влияния N₂(*j* > 0) или O₂(*j* > 0) на *N_e* и *T_e* области *F* ионосферы, вызванное этими увеличениями *T_e*, не изучено.

Оксид азота может образоваться в атмосфере в реакции [Гордиец, 1977]



Теоретические расчеты коэффициента K_{NO}(*j*, *T_n*) скорости этой реакции представлены в работе [Дмитриева и Зеневич, 1984] при *T_n* = 300, 500, 1000, 3000 К. Оцифровка этих теоретических расчетов

позволила аппроксимировать рассматриваемые коэффициенты выражением

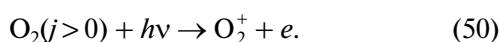
$$\lg K_{NO}(j, T_n) = A_{NO}(j) + B_{NO}(j)X + C_{NO}(j)X^2 + D_{NO}(j)X^3, \quad (49)$$

где *X* = 1000/*T_n*, температура *T_n* выражена в градусах Кельвина, размерность K_{NO} – см³ с⁻¹, коэффициенты A_{NO}(*j*), B_{NO}(*j*), C_{NO}(*j*) и D_{NO}(*j*) представлены в табл. 5 для *j* = 10–20.

В работе [Мишин и др., 1989] выполнены расчеты концентраций N₂(*j* = 1–50) в приближении ангармонических осцилляторов совместно с решением одномерного уравнения для определения *T_n* для авроральных условий ракетного эксперимента [Zipf et al., 1970] в приближении K_{NO}(*j* > 11, *T_n*) = = 10⁻¹¹ см³ с⁻¹. В качестве подгоночных параметров использовались скорость нагрева нейтрального газа в химических реакциях и скорости возбуждения N₂ электронным ударом в авроральной зоне. Реакция (48) использовалась для вычисления скорости исчезновения N₂(*j*) и как источник образования NO. Согласно этим расчетам, за время ~500–700 с значение [NO] достигает величины, измеренной в эксперименте [Zipf et al., 1970], а *T_n* увеличивается до ~2000 К за время ~800 с от начала включения источников N₂(*j*) и нагрева термосферы. Однако до настоящего времени отсутствуют экспериментальные данные, подтверждающие существование столь аномально высоких *T_n* в авроральных условиях на высоте около 120 км. Согласно измерений приборов спутника SNOE [Barth et al., 2003], в условиях высокой авроральной активности максимум [NO] находится около 110 км и изменяется в среднем от примерно 1.8 × 10⁸ см⁻³ при низкой солнечной активности до примерно 3.8 × 10⁸ см⁻³ при высокой солнечной активности, что намного меньше [NO] = = 3.8 × 10¹⁰ см⁻³, измеренной на высоте 120 км в ракетном эксперименте [Zipf et al., 1970]. Неясно, в

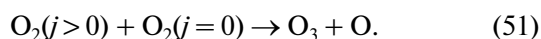
чем заключаются отличия авроральных условий, исследованных в работе [Zipf et al., 1970], от других авроральных условий, где не наблюдаются такие аномально высокие [NO].

Фотоионизация NO излучением L_α ($\lambda = 121.6$ нм) — один из основных источников формирования дневной области D ионосферы, а фотоионизация $O_2(^1\Delta_g)$ излучением от 102.7 нм (порог ионизации $O_2(0)$) до 111.8 нм (порог ионизации $O_2(^1\Delta_g)$) — один из источников образования O_2^+ на высотах области D [Брюнелли и Намгаладзе, 1988; Brasseur and Solomon, 2005]. Поэтому можно предположить, что фотоионизация $O_2(j > 0)$ излучением с $\lambda > 102.7$ нм может быть дополнительным источником электронов и ионов O_2^+ области D ионосферы:



Сечение поглощения O_2 имеет ярко выраженный минимум (уменьшение более чем на порядок величины) около 110.82 нм [Huffman et al., 1971]. Поэтому можно ожидать, что фотоионизация $O_2(j = 4, 5)$ может давать некоторый вклад в образование электронов и ионов O_2^+ области D ионосферы. Кроме того, фотоионизация высоколежащих колебательных уровней O_2 излучением L_α может быть дополнительным источником электронов и ионов O_2^+ области D ионосферы [Inn, 1961; Hudson and Mahle, 1972]. С учетом ангармонизма O_2 , излучение L_α может ионизовать $O_2(j)$, начиная с 11-го колебательного уровня. Однако до настоящего времени расчеты [$O_2(j)$] не проводились с учетом ангармонизма O_2 при корректных значениях τ_{vi} и τ_{vv} (см. п. 3), что не позволяет сделать вывод об эффективности образования электронов и ионов O_2^+ области D ионосферы за счет фотоионизации $O_2(j)$. Неопределенности скоростей образования $O_2(j)$ (см. п. 3) также вносят неопределенность в решение этой задачи.

В работе [Allen, 1986] была высказано предположение, что $O_2(j)$ могут быть источником озона в верхней атмосфере:



Кроме того, образование O в реакции



может влиять на концентрации O и O_3 [Pattern et al., 1994]. Учет процесса (33), реакции (51) при $j \geq 26$ и реакции (52) показал, что концентрация озона увеличивается лишь до 0.3% на высотах верхней стратосферы [Pattern et al., 1994]. Использование схемы расчетов [$O_2(j > 0)$], приведенной в п. 3 с более корректными, чем в работе [Pattern et al., 1994] значениями τ_{vi} и τ_{vv} , возможно, может уточнить выводы [Pattern et al., 1994] для условий стратосферы и оце-

нить влияние $O_2(j)$ на концентрации O и O_3 в мезосфере.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В обзоре представлены современные данные о коэффициентах колебательно-колебательного, колебательно-поступательного и межмодового обмена энергией, коэффициентах диффузии и скоростях образования $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в условиях верхней атмосферы. Обсуждаются уравнения, определяющие [$N_2(j)$] и [$O_2(j)$] в приближении моделей гармонических и ангармонических осцилляторов, и даны рекомендации по использованию различных приближений в зависимости от области рассматриваемых высот и типа решаемой задачи. Детально рассмотрены отличия распределений $N_2(j)$ и $O_2(j)$ по колебательным уровням от Больцмановского вида для $j = 1-5$ на высотах областей E и F ионосферы средних широт. Анализ влияния $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ на N_e , T_e , [NO] и [O_3] проводится на основе многочисленных работ, опубликованных после выхода в свет обзоров [Павлов и Намгаладзе, 1988; Torr and Torr, 1982; Pavlov, 1988], и детального анализа механизмов этого влияния. Отмечено, что нерешенные задачи в основном связаны с изучением роли $N_2(j > 0)$ и $O_2(j > 0)$ в ионосфере высоких широт. Необходимо также проверить ряд ранее опубликованных результатов (влияние вторгающихся в атмосферу электронов на [$N_2(j > 0)$] и изучение изменений N_e и T_e за счет этих вариаций [$N_2(j > 0)$], роль $N_2(j > 0)$ в образовании NO, влияние $O_2(j > 0)$ на [O_3] и изменение [O_2^+] области D ионосферы при фотоионизации $O_2(j > 0)$), используя корректный набор физико-химических процессов и их коэффициентов, определяющих [$N_2(j > 0)$] и [$O_2(j > 0)$] и их влияние на [NO], [O_3], N_e , T_e и [O_2^+].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Брюнелли Б.Е., Намгаладзе А.А. Физика ионосферы. М.: Наука, 527 с. 1988.
- Гордиец Б.Ф. Колебательная релаксация ангармонических молекул N_2 и концентраций окиси азота в возмущенной термосфере // Геомагнетизм и аэронавигация. Т. 18. № 5. С. 871–878. 1977.
- Гордиец Б.Ф., Осипов А.И., Шелепин Л.А. Кинетические процессы в газах и молекулярные лазеры. М.: Наука, 512 с. 1980.
- Дмитриева И.К., Зеневич В.А. Влияние колебательного возбуждения азота на константу скорости реакции $N_2(v) + O \rightarrow NO + N$. Теоретико-информационное приближение // Хим. физика. Т. 3. № 8. С. 1075–1080. 1984.
- Каланов Т.З., Осипов А.И., Панченко В.Я., Хабибулаев П.К. Колебательная релаксация в газовых системах с источниками колебательно-возбужденных молекул. Ташкент: ФАН, 110 с. 1981.

- Краснопольский В.А. Физика свечения атмосфер планет и комет. М.: Наука, 303 с. 1987.
- Лосев С.А., Уманский С.Я., Якубов И.Т. Физико-химические процессы в газовой динамике. Справочник. Том 1. Динамика физико-химических процессов в газе и плазме. М.: изд. МГУ, 349 с. 1995.
- Мишин Е.В., Ружин Ю.Я., Телегин В.А. Взаимодействие электронных потоков с ионосферной плазмой. Л.: Гидрометеоздат, 264 с. 1989.
- Павлов А.В. Метод учета влияния колебательно-возбужденного азота на состав ионосферы. Препринт № 76 (609). М.: ИЗМИРАН, 24 с. 1985.
- Павлов А.В. Бинарные коэффициенты молекулярной диффузии нейтральных компонентов верхних атмосфер Земли, Марса и Венеры // Космич. исслед. Т. 19. № 1. С. 82–86. 1981.
- Павлов А.В. О роли колебательно-возбужденного азота в области устойчивых субавроральных красных дуг // Геомагнетизм и аэронаука. Т. 29. № 6. С. 948–953. 1989.
- Павлов А.В., Намгалдзе А.А. Колебательно-возбужденный азот в верхней атмосфере // Геомагнетизм и аэронаука. Т. 28. № 5. С. 705–721. 1988.
- Павлов А.В., Павлова Н.М., Макаренко С.Ф. Сравнение вычисленных и измеренных температур и концентраций электронов ионосферы и плазмосферы средних широт с 13 по 15 ноября 1991 г. // Геомагнетизм и аэронаука. Т. 45. № 5. С. 629–641. 2005.
- Павлов А.В., Павлова Н.М., Макаренко С.Ф., Шубин В.Н. Аномальные вариации структуры области F₂ ионосферы средних геомагнитных широт южного и северного полушарий при переходе от летних к зимним условиям при высокой солнечной активности // Геомагнетизм и аэронаука. Т. 48. № 1. С. 79–92. 2008.
- Радциг А.А., Смирнов Б.В. Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 240 с. 1980.
- Смит К., Томсон Р. Численное моделирование газовых лазеров. М.: Мир, 515 с. 1981.
- Фердигер Дж., Канер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. М.: Мир, 556 с. 1976.
- Abbaspour M., Goharshadi E., Emampour J. Determination of potential energy functions and calculation transport properties of oxygen and nitric oxide via the inversion of reduced viscosity collision integrals at zero pressure // Chem. Phys. V. 326. № 2–3. P. 620–630. 2006.
- Ahn T., Adamovich I., Lempert W.R. Stimulated Raman scattering measurements of V–V transfer in oxygen // Chem. Phys. V. 323. № 2–3. P. 532–544. 2006.
- Albritton D.L., Dotan I., Lindinger W., McFarland M., Tellinghuisen J., Fehsenfeld F.C. Effects of ion speed distributions in flow-drift tube studies on ion-neutral reactions // J. Chem. Phys. V. 66. № 2. P. 410–421. 1977.
- Allan M. Measurement of absolute differential cross sections for vibrational excitation of O₂ by electron impact // J. Phys. B. V. 28. № 23. P. 5163–5175. 1995.
- Allen M. Modelling the atmospheric response to doubled CO₂ and depleted stratospheric ozone using a stratosphere-resolving coupled // J. Geophys. Res. V. 91. № 2. P. 2844–2848. 1986.
- Barth C.A., Mankoff K. D., Bailey S.M., Solomon S.C. Global observations of nitric oxide in the thermosphere // J. Geophys. Res. V. 108. № 1. P. 1027. DOI: 10.1029/2002JA009458. 2003.
- Billing G. Semiclassical calculation of the rate constant for the process N₂(v=1) + N₂(v=0) → 2N₂(v=0) + 2330.7 cm⁻¹ at low temperatures // Chem. Phys. Lett. V. 76. № 1. P. 178–182. 1980.
- Billing G.D., Kolesnick R.E. Vibrational relaxation of oxygen. State to state rate constants // Chem. Phys. Lett. V. 200. № 4. P. 382–386. 1992.
- Brasseur G.P., Solomon S. Aeronomy of the Middle Atmosphere: Chemistry and Physics of the Stratosphere and Mesosphere. Berlin: Springer, 644 p. 2005.
- Brinton H.C., Grebowsky J.M., Brace L.H. The high-latitude winter F region at 300 km – Thermal plasma observations from AE-C // J. Geophys. Res. V. 83. № 10. P. 4767–4776. 1978.
- Cacciatore M., Kurnosov A., Napartovich A. Vibrational energy transfer in N₂–N₂ collisions: A new semiclassical study // J. Chem. Phys. V. 123. P. 174315. DOI: 10.1063/1.2101445. 2005.
- Chabrilat S., Kockarts G., Fonteyn D., Brasseur G. Impact of molecular diffusion on the CO₂ distribution and the temperature in the mesosphere // Geophys. Res. Lett. V. 29. № 15. P. 1729 (1–4). DOI:10.1029/2002GL015309. 2002.
- Coletti C., Billing G.D. Vibrational energy transfer in molecular oxygen collisions // Chem. Phys. Lett. V. 356. № 1–2. P. 14–22. 2002.
- Curtis S.A., Hoegy W.R., Brace L.H., Winningham J.D. Cusp altitudinal electron temperature gradient: Dynamics Explorer 2 implications for heating mechanisms // J. Geophys. Res. V. 90. № 5. P. 4415–4419. 1985.
- Eckstrom D.J. Vibrational relaxation of shock-heated N₂ by atomic oxygen using the IR tracer method // J. Chem. Phys. V. 59. № 6. P. 2787–2795. 1973.
- Esposito F., Capitelli M. The relaxation of vibrationally excited O₂ molecules by atomic oxygen // Chem. Phys. V. 443. № 4–6. P. 222–226. 2007.
- Ferguson E.E., Adams N.G., Smith D., Alge E. Rate coefficients at 300 K for the vibrational energy transfer reactions from N₂(v=1) to O₂⁺(v=0) and NO⁺(v=0) // J. Chem. Phys. V. 80. № 12. P. 6095–6098. 1984.
- Gamallo G., Sayós R., González M., Petrongolo C., Defazio P. Quantum real wave-packet dynamics of the N(⁴S) + NO($\bar{X}^2\Pi$) → N₂($\bar{X}^1\Sigma_g^+$) + O(³P) reaction on the ground and first excited triplet potential energy surfaces: rate constants, cross sections, and product distributions // J. Chem. Phys. V. 124. № 17. P. 174303. DOI: 10.1063/1.2186643. 2006.
- Gilmore F.R., Bauer E., McGowan J.W. A review of atomic and molecular excitation mechanisms in nonequilibrium gases up to 20000 K // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. V. 9. № 2. P. 157–183. 1969.
- Green J.G., Shi J., Barker J.R. Photochemical kinetics of vibrationally excited ozone produced in the 248-nm photolysis of O₂/O₃ mixtures // J. Phys. Chem. A. V. 104. № 26. P. 6218–6226. 2000.

- *Hickson K.M., Sharkey P., Smith I.W.M., Symonds A.C., Tuckett R.P., Ward G.N.J.* Formation and relaxation of $O_2(X^3\Sigma_g^-)$ in high vibrational levels ($18 \leq v \leq 23$) in the photolysis of at 266 nm // *Chem. Soc., Faraday Trans. V. 94. № 4. P. 533–540. 1998.*
- *Hierl P.M., Dotan I., Seeley J.V., Van Doren J.M., Morris R.A., Viggiano A.A.* Rate constants for the reactions of O^+ with N_2 and O_2 as a function of temperature (300–1800 K) // *J. Chem. Phys. V. 106. № 9. P. 3540–3444. 1997.*
- *Huffman R.E., Paulsen D.E., Larrabee J.C., Cairns R.B.* Decrease in D-region $O_2(^1\Delta_g)$ photo-ionization rates resulting from CO_2 absorption // *J. Geophys. Res. V. 76. № 4. P. 1028–1038. 1971.*
- *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. № 11. P. 1422–1428. 1997.*
- *Kalogerakis K.S., Copeland R.A., Slanger T.G.* Vibrational energy transfer in $O_2(X^3\Sigma_g^-, v = 2, 3) + O_2$ collisions at 330 K // *J. Chem. Phys. V. 123. № 4. P. 44309. DOI: 10.1063/1.1982788. 2005 a.*
- *Kalogerakis K.S., Copeland R.A., Slanger T.G.* Measurement of the rate coefficient for collisional removal of $O_2(X^3\Sigma_g^-, v = 1)$ by $O(^3P)$ // *J. Chem. Phys. V. 123. № 19. P. 194303. DOI: 10.1067/1.2110227. 2005 b.*
- *Kurihara J., Oyama K.-I., Suzuki K., Iwagami N.* Vibrational rotational temperature measurement of N_2 in the lower thermosphere by the rocket experiment // *Adv. Space Res. V. 32. № 5. P. 725–729. 2003.*
- *Kozyra J.U., Nagy A.F., Slater D.W.* High-altitude energy source(s) for stable auroral red arcs // *Rev. Geophys. V. 35. № 2. P. 155–190. 1997.*
- *Lobzin V.V., Pavlov A.V., Pavlova N.M.* An anomalous subauroral red arc on 4 August 1972: comparison of ISIS-2 satellite data with numerical calculations // *Ann. Geophysicae. V. 17. № 11. P. 1411–1425. 1999.*
- *Mack J.A., Huang Y., Wodtke A.M., Schatz G.C.* The product vibrational, rotational, and translational energy distribution for the reaction $O(^3P_J) + O_3 \rightarrow 2O_2$: Breakdown of the spectator bond mechanism // *J. Chem. Phys. V. 105. № 17. P. 7495–7503. 1996.*
- *Miller R.L., Suits A.G., Houston P.L., Toumi R., Mack J.A., Wodtke A.M.* The “Ozone Deficit” Problem: $O_2(X, v \geq 26) + O(^3P)$ from 226-nm Ozone Photodissociation // *Science. V. 265. № 5180. P. 1831–1838. 1994.*
- *Montroll E.W., Shuler K.E.* Studies in Nonequilibrium Rate Processes. I. The Relaxation of a System of Harmonic Oscillators // *J. Chem. Phys. V. 26. № 3. P. 454–464. 1957.*
- *McFarland M., Albritton D.L., Fehsenfeld F.C., Ferguson E.E., Schmeltekopf A.L.* Flow-drift technique for ion mobility and ion-molecule reaction rate constant measurements, II, Positive ion reactions of N^+ , O^+ , and H_2^+ with O_2 and O^+ with N_2 from thermal to $\sim 2eV$ // *J. Chem. Phys. V. 59. № 12. P. 6620–6635. 1973.*
- *McNeal R.G., Whitson M.E., Cook G.R.* Temperature dependence of the quenching of vibrationally excited nitrogen by atomic oxygen // *J. Geophys. Res. V. 79. № 10. P. 1527–1531. 1974.*
- *Newton G.P., Walker J.C.G., Mantas G.P.* Effects of soft electron precipitation on the distribution of vibrational energy of N_2 // *J. Geophys. Res. V. 82. № 1. P. 187–190. 1977.*
- *Oyama K.-I.* In situ measurements of T_e in the lower ionosphere – A review // *Adv. Space Res. V. 26. № 8. P. 1231–1240. 2000.*
- *Patten K.O., Connell P.S., Kinnison D.E., Wuebbles D.J., Slanger T.G., Froidevaux L.* Effect of vibrationally excited oxygen on ozone production in the stratosphere // *J. Geophys. Res. V. 99. № 1. P. 1211–1224. 1994.*
- *Pavlov A.V.* The role of vibrationally excited nitrogen in the ionosphere // *Pure App. Geophys. V. 127. № 2/3. P. 529–544. 1988.*
- *Pavlov A.V.* The role of vibrationally excited nitrogen in the formation of the mid-latitude negative ionospheric storms // *Ann. Geophysicae. V. 12. № 6. P. 554–564. 1994 a.*
- *Pavlov A.V.* The role of vibrationally excited oxygen and nitrogen in the D and E regions of the ionosphere // *Ann. Geophysicae. V. 12. № 10. P. 1085–1090. 1994b.*
- *Pavlov A.V.* Mechanisms of the electron density depletion in the SAR arc region // *Ann. Geophysicae. V. 14. № 2. P. 211–221. 1996.*
- *Pavlov A.V.* Subauroral red arcs as a conjugate phenomenon: comparison of OV1-10 satellite data with numerical calculations // *Ann. Geophysicae. V. 15. № 8. P. 984–998. 1997.*
- *Pavlov A.V.* New electron energy transfer rates for vibrational excitation of N_2 // *Ann. Geophysicae. V. 16. № 2. P. 176–182. 1998a.*
- *Pavlov A.V.* The role of vibrationally excited oxygen and nitrogen in the ionosphere during the undisturbed and geomagnetic storm period of 6–12 April 1990 // *Ann. Geophysicae. V. 16. № 5. P. 589–601. 1998b.*
- *Pavlov A.V.* New electron energy transfer and cooling rates by excitation of O_2 // *Ann. Geophysicae. V. 16. № 8. P. 1007–1013. 1998 c.*
- *Pavlov A.V.* New method in computer simulations of electron and ion densities and temperatures in the plasmasphere and low-latitude ionosphere // *Ann. Geophysicae. V. 21. № 7. P. 1601–1628. 2003.*
- *Pavlov A.V.* The role of the zonal \mathbf{ExB} plasma drift in the low latitude ionosphere at high solar activity near equinox from a new three-dimensional theoretical model // *Ann. Geophysicae. V. 24. № 10. P. 2553–2572. 2006.*
- *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. № 12. P. 26941–26945. 1996.*
- *Pavlov A.V., Buonsanto M.J., Schlesier A.C., Richards P.G.* Comparison of models and data at Millstone Hill during the June 5–11, 1991, storm // *J. Atmos. Solar-Terr. Phys. V. 61. № 3/4. P. 263–279. 1999.*
- *Pavlov A.V., Abe T., Oyama K.-I.* Comparison of the measured and modelled electron densities and temperatures in the ionosphere and plasmasphere during 20–30 January 1993 // *Ann. Geophysicae. V. 18. № 10. P. 1257–1272. 2000.*
- *Pavlov A.V., Abe T., Oyama K.-I.* Comparison of the measured and modeled electron densities and temper-

- atures in the ionosphere and plasmasphere during the period of 25–29 June 1990 // *J. Atmos. Solar-Terr. Phys.* V. 63. № 6. P. 605–616. 2001.
- Pavlov A.V., Foster J.C. Model/data comparison of *F* region ionospheric perturbation over Millstone Hill during the severe geomagnetic storm of 15–16 July, 2000 // *J. Geophys. Res.* V. 106. № 12. P. 29051–29070. 2001.
- Pavlov A.V., Fukao S., Kawamura S. *F* region ionospheric perturbations in the low-latitude ionosphere during the geomagnetic storm of 25–27 August 1987 // *Ann. Geophysicae.* V. 22. № 10. P. 3479–3501. 2004.
- Pavlov A.V., Fukao S., Kawamura S. A modeling study of ionospheric *F2*-region storm effects at low geomagnetic latitudes during 19–22 March 1990 // *Ann. Geophysicae.* V. 24. № 3. P. 915–940. 2006.
- Pavlov A.V., Pavlova N.M. Comparison of the measured and modeled electron densities and temperatures in the ionosphere and plasmasphere during 14–16 May 1991 // *J. Atmos. Solar-Terr. Phys.* V. 66. № 1. P. 89–104. 2004.
- Pavlov A.V., Pavlova N.M. Causes of the mid-latitude *NmF2* winter anomaly at solar maximum // *J. Atmos. Solar-Terr. Phys.* V. 67. № 10. P. 862–877. 2005.
- Pavlov A.V., Fukao S. The ionospheric *F2*-region at low geomagnetic latitudes during the geomagnetic storms of 22–26 April 1990: Comparison of observed and modeled response // *J. Atmos. Solar-Terr. Phys.* V. 69. № 7. P. 835–859. 2007.
- Pejakovi D.A., Kalogerakis K.S., Copeland R.A., Huestis D.L. Laboratory determination of the rate coefficient for three-body recombination of oxygen atoms in nitrogen // *J. Geophys. Res.* V. 113. № 4. P. A04303 (1–11). DOI: 10.1029/2007JA012694. 2009.
- 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. № 12. P. 1468. DOI: 10.1029/2002JA009430. 2002.
- Pitout F., Blelly P.-L. Electron density in the cusp ionosphere: increase or depletion? // *Geophys. Res. Lett.* V. 30. № 14. P. SSC 2-1. CiteID 1726. DOI: 10.1029/2003GL017151. 2003.
- Plönjes E., Palm P., Lee W., Chidley M.D., Adamovich I.V., Lempert W.R., Rich J.W. Vibrational energy storage in high pressure mixtures of diatomic molecules // *Chem. Phys.* V. 260. № 3. P. 353–366. 2000.
- Prölss G.W., Werner S. Vibrationally excited nitrogen and oxygen and the origin of negative ionospheric storms // *J. Geophys. Res.* V. 107. № 2. P. 1–6, CiteID 1016, DOI: 10.1029/2001JA900126. 2002.
- Rishbeth H., Muller-Wodarg I.C.F., Zou L., Fuller-Rowell T.J., Millward G.H., Moffett R.J., Idenden D.W., Aylward A.D. Annual and semiannual variations in the ionospheric *F2*-layer: II. Physical discussion // *Ann. Geophysicae.* V. 18. № 7. P. 945–956. 2000.
- Schmeltekopf A.L., Ferguson E.E., Fehsenfeld F.C. Afterglow studies of the reactions He⁺, He(2³S), and O⁺ with vibrationally excited N₂ // *J. Chem. Phys.* V. 48. № 7. P. 2966–2973. 1968.
- Shved G.M., Kutepov A.A., Ogibalov V.P. Input data and populations of the v₃ mode manifold states // *J. Atmos. Solar-Terr. Phys.* V. 60. № 3. P. 289–314. 1998.
- Slanger T.G., Copeland R.A. Energetic Oxygen in the Upper Atmosphere and the Laboratory // *Chem. Rev.* V. 103. № 12. P. 4731–4765. 2003.
- Smith I.W.M. The role of electronically excited states in recombination reactions // *Int. J. Chem. Kinetics.* V. 16. № 4. P. 423–443. 1984.
- Stallcop J.R., Partridge H., Levin E. Effective potential energies and transport cross sections for interactions of hydrogen and nitrogen // *Phys. Rev. A.* V. 62. № 6. P. 1–15. DOI: 062709. 2000.
- St.-Maurice J.-P., Laneville P.J. Reaction rate of O⁺ with O₂, N₂, and NO under highly disturbed auroral conditions // *J. Geophys. Res.* V. 103. № 8. P. 175109–17521. 1998.
- St.-Maurice J.-P., Torr O.G. Nonthermal rate coefficients in the ionosphere: The reaction of O⁺ with N₂, O₂ and NO // *J. Geophys. Res.* V. 83. № 3. P. 969–977. 1978.
- Titheridge J.E. Model results for the ionospheric E region: solar and seasonal changes // *Ann. Geophysicae.* V. 15. № 1. P. 63–78. 1997.
- Torr M.R., Torr D.G. The role of metastable species in the thermosphere // *Rev. Geophys. Space Phys.* V. 20. № 1. P. 91–144. 1982.
- Truhlik V., Triskova L., Bilitza D., Podolska K. Variations of daytime and nighttime electron temperature and heat flux in the upper ionosphere, topside ionosphere and lower plasmasphere for low and high solar activity // *J. Atmos. Solar-Terr. Phys.* V. 71. № 17/18. P. 2055–2063. 2009.
- Viehland L.A., Mason E.A. Statistical – mechanical theory of gaseous ion – molecule reaction in an electrostatic field // *J. Chem. Phys.* V. 66. № 2. P. 422–434. 1977.
- Wickwar V.B., Kofman W. Dayside red auroras at very high latitudes: The importance of thermal excitation // *Geophys. Res. Lett.* V. 11. № 9. P. 923–926. 1984.
- Wine H., Nicovich J.M., Thompson R.J., Ravishankara A.R. Kinetics of O(³P_J) reactions with H₂O₂ and O₃ // *J. Phys. Chem.* V. 87. № 20. P. 3948–3954. 1983.
- Zipf E.C., Borst M.X., Donahue T.M. A mass spectrometer observation of NO in an auroral arc // *J. Geophys. Res.* V. 75. № 31. P. 6371–6377. 1970.