



ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА



www.sciencejournals.ru

Журнал публикует статьи по следующей тематике:
элементарные физико-химические процессы • строение химических соединений, квантовая химия, спектроскопия • реакционная способность, кинетика химических реакций, катализ • влияние внешних факторов на физико-химические превращения • физико-химические процессы на поверхности • ударные волны • горение и взрыв • физические методы исследования химических реакций • химическая физика биологических процессов • динамика транспортных процессов • электрические и магнитные свойства материалов • химическая физика полимерных материалов • химия атмосферы и экология • химическая физика наноматериалов



СОДЕРЖАНИЕ

Том 42, номер 10, 2023

Элементарные физико-химические процессы

Голубков Г.В., Безуглов Н.Н., Ключарев А.Н., Голубков М.Г.

Резонансные и аномальные структуры спектров ассоциативной ионизации с участием ридберговских атомов 3

Басалаев А.А., Кузьмичев В.В., Панов М.Н., Симон К.В., Смирнов О.В.

Фрагментация молекул аденина при взаимодействии с ионами 16

Кинетика и механизм химических реакций, катализ

Морозов И.И., Васильев Е.С., Бутковская Н.И., Сыромятников А.Г., Хомякова П.С., Волков Н.Д., Морозова О.С., Савилов С.В.

Реакции галогензамещенных уксусной и пропионовой кислот с атомами фтора 26

Горение, взрыв и ударные волны

Быкова Н.Г., Забелинский И.Е., Козлов П.В., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю.

Излучение ударно-нагретого воздуха в вакуумно-ультрафиолетовой области спектра 34

Котов М.А., Козлов П.В., Осипенко К.Ю., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю., Быкова Н.Г., Забелинский И.Е.

Исследование ионизационных процессов перед сильной ударной волной 42

Химическая физика атмосферных явлений

Бахметьева Н.В., Жемяков И.Н., Григорьев Г.И., Калинина Е.Е.

Влияние природных факторов на температуру нижней термосферы 50

Голубков Г.В., Берлин А.А., Дьяков Ю.А., Карпов И.В., Лушников А.А., Степанов И.Г., Голубков М.Г.

Увеличение ошибок позиционирования с ростом мощности сигнала глобальных навигационных спутниковых систем 64

Кшевещкий С.П., Курдяева Ю.А., Гаврилов Н.М.

Связанная генерация акустических и гравитационных волн тропосферными тепловыми источниками 77

Поляков Д.Н., Шумова В.В., Василяк Л.М.

Поверхностное натяжение облака из заряженных микрочастиц в газоразрядной плазме 91

Родионов А.И., Родионов И.Д., Родионова И.П., Шестаков Д.В., Егоров В.В., Шаповалов В.Л., Калинин А.П.

Учет неоднородности трассы распространения ультрафиолетового излучения С-диапазона над морем 96

РЕЗОНАНСНЫЕ И АНОМАЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ СПЕКТРОВ АССОЦИАТИВНОЙ ИОНИЗАЦИИ С УЧАСТИЕМ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ

© 2023 г. Г. В. Голубков^{1,2}, Н. Н. Безуглов³, А. Н. Ключарев³, М. Г. Голубков^{1*}

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва, Россия

²Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

³Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: golubkov@chph.ras.ru

Поступила в редакцию 05.05.2023;

после доработки 16.05.2023;

принята в печать 22.05.2023

В рамках стохастического подхода выполнен анализ особенностей резонансной и аномальной структур спектров ассоциативной ионизации (АИ) для случая дипольно-дипольного взаимодействия ридберговских атомов. Использование такого подхода позволяет количественно описать реакцию АИ с образованием положительно заряженного молекулярного иона. Обнаружено, что эффективность несимметричных процессов ионизации для оже-переходов может на порядки превышать эффективность симметричных. Обсуждена важная роль этого явления для развития современных квантовых прикладных исследований и представлений о процессах ионизации, протекающих в ионосфере. Полученные результаты могут быть использованы для решения ряда принципиальных проблем физики плазмы ионосферы. Особенно это касается эффекта “временной задержки” сигналов глобальных навигационных спутниковых систем (ГНСС), что, в свою очередь, существенно влияет на устойчивость работы ГНСС и дистанционное зондирование поверхности Земли.

Ключевые слова: ридберговский атом, дипольно-дипольное взаимодействие, ассоциативная ионизация, свободные электроны и ионы, временная задержка сигналов ГНСС.

DOI: 10.31857/S0207401X23100060, EDN: SDBZXY

1. ВВЕДЕНИЕ

В начале 1990-х годов в литературе были опубликованы две обзорные работы, посвященные анализу динамики процессов образования молекулярных ионов при медленных столкновениях двух ридберговских атомов (РА) [1, 2]. Они являются весьма перспективным объектом исследования, так как обладают большими дипольными моментами, которые эффективно взаимодействуют друг с другом и легко поддаются управлению внешними полями [3]. Более того, высоковозбужденные РА представляют значительный интерес, поскольку столкновения с их участием протекают, как правило, через стадию образования промежуточного ридберговского комплекса и стимулируют процессы хемоионизации. Схема высоковозбужденного комплекса в системе координат, связанной с квазимолекулой $A^{**} + A^{**}$ представлена на рис. 1. Поведение каждого слабосвязанного ридберговского электрона (РЭ) с учетом обменного взаимодействия здесь можно представить как движение в двухцентровом куло-

новском потенциале, которое нарушается за счет рассеяния на каждом ионном остоле A^+ .

Впервые проведение подобных исследований было инициировано чл.-корр. АН СССР С.Э. Фришем [4]. Процессы хемиионизации рассматривались в рамках модели дипольной резонансной ионизации, индуцированной наличием переменного дипольного момента ионного комплекса $A^+ - A$, величина которого равна [5]

$$D = R \cos \left(\int_{-\infty}^t \Delta(R(\tau)) d\tau \right) / 2, \quad (1)$$

где R – межатомное расстояние. Существование дипольного момента приводит к возникновению микроволнового поля с частотой ω , равной величине обменного расщепления Δ между термами Σ_g^- и Σ_u^+ молекулярного иона. Ионизация происходит в области межатомных расстояний, где величина $\omega = \Delta(R)$ превышает энергию связи электрона

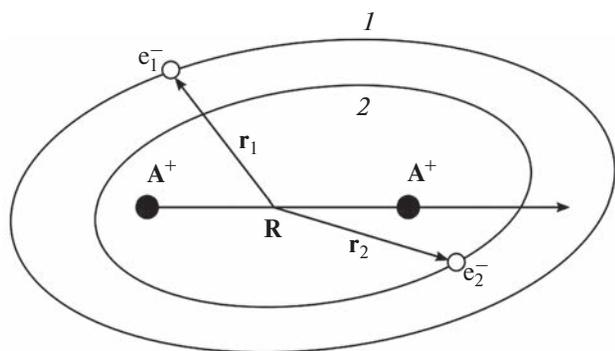


Рис. 1. Схема высоковозбужденного ридберговского комплекса $A^{**} + A^{**}$ в системе координат, связанной с квазимолекулой. Цифрами 1 и 2 обозначены орбиты движения электронов.

$$E_{\text{св}} = -\frac{1}{2n_1^2 \ell_1}, \quad (2)$$

начиная с пороговой точки квазипересечения потенциальных кривых R_0 (см. рис. 2). Величины n_1 и ℓ_1 , входящие в (2), представляют собой соответственно главное квантовое число и орбитальный момент РЭ первого атома. Отметим, что здесь и в дальнейшем используется атомная система единиц: $\hbar = m_e = e = 1$, где \hbar — постоянная Планка, m_e и e — масса и заряд электрона.

При автоионизационном распаде квазимолекулярного терма выполнение принципа Франка—Кондона иллюстрируется сохранением разности ординат точек 1 и 2, 3 и 4 (см. рис. 2), т.е.

$$U(1) - U(2) = U(3) - U(4). \quad (3)$$

Если точка 3 расположена выше предела диссоциации молекулярного иона XY^+ , то канал ионизации пеннинговского типа с образованием атомарного иона и электрона становится предпочтительным. В противном случае образуется молекулярный ион в стабильном колебательно-возбужденном состоянии. При энергии $E < U(R_0)$ вероятность акта ионизации, определяемая проникаемостью потенциального барьера, невелика [5].

Дальнейшее развитие теории потребовало учета целой совокупности квазипересечений потенциальных кривых ридберговского комплекса на основе представлений о динамическом хаосе [6, 7]. Хаос возникает при рассмотрении трех типов движений. К первому типу относится поведение РА во внешнем электромагнитном поле. Второй тип включает столкновительные процессы в низкотемпературной плазме. Третий тип связан с наличием сильной неадиабатической связи электронного и ядерного движений в ридберговском комплексе в условиях ультрахолодной плазмы.

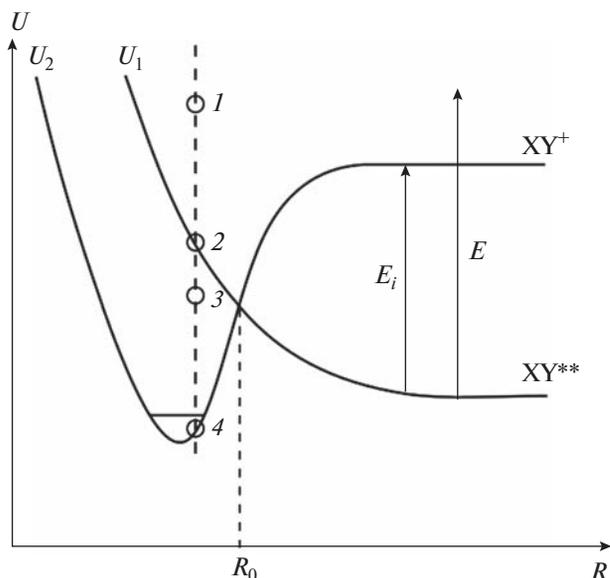


Рис. 2. Потенциальные кривые ридберговского комплекса XY^{**} и молекулярного иона XY^+ для случая, когда суммарная энергия партнеров меньше потенциалов ионизации атомов. Точки 1–4 отвечают соотношению (3).

Введение статистического описания движения РЭ в поле квазимонохроматической электромагнитной волны возможно, когда длина волны медленного электрона меньше амплитуды пространственных осцилляций траектории его движения, вызванных внешним полем [8]. Поскольку для формирования стохастичности требуется достаточно большое время, динамический хаос проявляется как для субтепловых, так и для холодных режимов столкновений возбужденных частиц.

Прогнозирование влияния на биосферу Земли микроволнового излучения нижней ионосферы, индуцированного геомагнитными возмущениями, невозможно проводить без учета процессов, протекающих с участием ридберговских состояний [9–14]. В этих условиях эффективно заселяются орбитально “вырожденные” состояния, в которых спектральные различия ридберговских атомов и молекул (без учета их вибронной связи) нивелируются [15]. Особенности спектра излучения земной атмосферы могут быть обусловлены также тем, что высоковозбужденные состояния в ионосферной плазме и верхнем слое атмосферы необратимо возмущаются (перемешиваются) нейтральными компонентами среды [16]. Оптические переходы в этом случае происходят между состояниями с $\Delta n \geq 0$, где n — главное квантовое число. Однако преимущественно излучение наблюдается в спектре ИК-излучения для переходов с $\Delta n = 1$, где $10 \leq n \leq 30$, что соответствует диапазону существования ридберговской квазимолекулы.

Успехи в развитии стохастической динамики газовых сред были достигнуты для теплового и субтеплового диапазонов энергии частиц [5–7]. Сегодня в связи с тем, что холодные среды начинают находить применение в новых технологиях, возникла проблема хаоса, например для ультрахолодной плазмы в магнитооптических системах. Ансамбль холодных РА представляет значительный интерес в связи с фундаментальными проблемами квантовой физики холодной плазмы и с перспективой использования подобных систем в прикладных задачах, превращая ультрахолодный газ в идеальный объект квантовых манипуляций при реализации на практике логических схем квантовой информатики [17]. Источником неустойчивости ридберговского газа служат процессы перемешивания ридберговских состояний, приводящие к стохастической миграции возбуждения в континуум энергии. В связи с этим становятся актуальными исследования случайных процессов, влияющих на развитие стохастического режима (например, сбой фазы) в динамике высоковозбужденных атомных систем.

Столкновение РА, обладающих большими значениями главных квантовых чисел, отвечает случаю диполь-дипольного взаимодействия между ними. При наличии резонанса Фёрстера (РФ), когда уровни ℓ -серии с орбитальным моментом ℓ расположены между соседними уровнями $(\ell - 1)$ - или $(\ell + 1)$ -серий, в “элементарном” акте процесса возможно проявление детерминированного динамического хаоса. Заметим, что введенная Ферми в работе [8] структура возбужденной квазимолекулы с успехом использовалась ранее для описания процессов уширения и сдвига спектральных линий [10, 11].

Цель данного исследования заключалась в установлении особенностей резонансной и аномальной структур спектров ассоциативной ионизации (АИ) в рамках стохастического подхода для случая дипольно-дипольного взаимодействия РА с образованием положительно заряженных молекулярных ионов.

Статья включает семь разделов. В разд. 2 и 3 дано описание дипольного резонансного механизма образования молекулярного иона и рассмотрена ионизационная неустойчивость ридберговского кластера при наличии дипольного взаимодействия, а также обсуждены особенности поведения РА в приближении стохастической динамики. Раздел 4 посвящен описанию эволюции орбитального момента высоковозбужденного ридберговского водородоподобного атома в микроволновом электрическом поле. Аномалии спектров РА в случае двухфотонного резонанса Штарка рассмотрены в разд. 5. Диполь-дипольные процессы на стадии образования холодной плазмы обсуждаются в разд. 6. Процессы искажения и времен-

ной задержки распространения навигационных спутниковых радиосигналов за счет многократного рассеяния на ридберговских квазимолекулах в низкотемпературной ионосферной плазме рассмотрены в заключительном разд. 7.

2. ДИПОЛЬНЫЙ РЕЗОНАНСНЫЙ МЕХАНИЗМ ОБРАЗОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ

Согласно работе Ферми [8], ридберговская квазимолекула водорода состоит из РЭ, валентного электрона атома-партнера и двух кулоновских центров, расположенных на расстояниях, меньших размеров орбиты РЭ (см. рис. 1). Обменное взаимодействие двух кулоновских центров приводит к возникновению переменного дипольного момента, осциллирующего с частотой, соответствующей расщеплению термов водородоподобного атома. В свою очередь, дипольный момент индуцирует возникновение микроволнового поля с частотой, зависящей от межъядерного расстояния R . При тепловых столкновениях РА с атомами, находящимися в основном состоянии, процесс образования молекулярного иона происходит в области квазипересечения молекулярного и ионного термов. Заметим, что в тепловом диапазоне энергии экспериментальные значения констант скорости АИ с участием РА в максимуме достигают величин порядка 10^{-9} – 10^{-8} $\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$. Величиной того же порядка могут оказаться константы несимметричных процессов [18].

3. РИДБЕРГОВСКИЙ АТОМ В ПРИБЛИЖЕНИИ СТОХАСТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ

Модель дипольного резонансного механизма (ДРМ) сыграла большую роль в развитии исследований процессов АИ с участием РА. Однако без обсуждения оставался вопрос о сохранении первичной селективности возбуждения РА в присутствии микроволнового поля. На это обстоятельство в свое время было обращено внимание в работах [10, 11].

В присутствии микроволнового поля можно ожидать миграции РЭ по уровням энергии РА, что следует из современных представлений о детерминизме и хаосе в атомных структурах [12]. Примером такого рода может служить ансамбль возбужденных атомов, энергия которых близка к одному из “резонансных” значений, приводящих к развитию ионизационной неустойчивости в микроволновом поле.

Обсуждение процессов стохастического типа блуждания РЭ по уровням высоковозбужденного атома водорода в микроволновом электрическом поле проведено в работах [17, 18]. Исследованием,

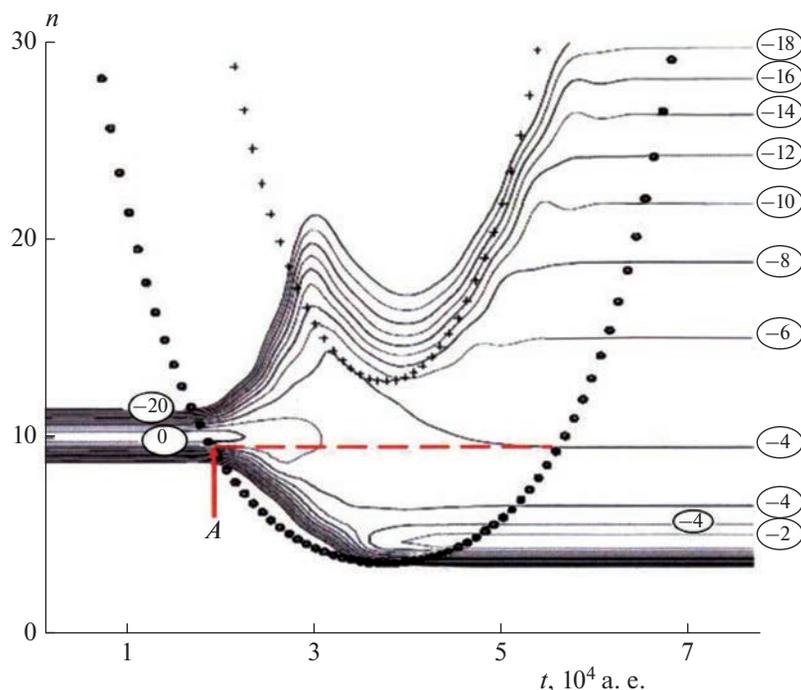


Рис. 3. Результаты численного анализа стохастического уравнения Фоккера–Планка–Колмогорова с переменными граничными условиями для диффузии РЭ с начальным селективным возбуждением состояния $n_0 = 10$ водородоподобного атома. Сплошные линии соответствуют значениям функции $\ln(p(n,t))$, расположенным у соответствующих кривых.

результаты которого не потеряли своего значения вплоть до настоящего времени, стала работа [19], где была обоснована применимость квазиклассического описания поведения оптического электрона высоковозбужденного атома в микроволновом электрическом поле. Кроме того, было найдено критическое значение поля для перехода РЭ в стохастический режим движения при перекрытии нелинейных резонансов. При этом в теории предполагалось выполнение условия сохранения орбитального момента ℓ у РЭ. Позднее в рамках численного эксперимента [20] был проведен анализ стохастического уравнения Фоккера–Планка–Колмогорова с переменными граничными условиями на примере диффузии РЭ при первичном селективном возбуждении $10n$ -состояния водородоподобного атома. Показано, что в диапазоне порядка времени взаимодействия $PA + A$ существует нижняя граница хаотического процесса и верхний ионизационный предел (см. рис. 3).

Перечислим основные положения модели диффузионной ионизации с образованием молекулярного иона при тепловых столкновениях ридберговских водородоподобных атомов. К ним относятся:

1) формулировка столкновительной динамики процесса взаимодействия, которая определяет его зависимость от времени;

2) понятие среднего эффективного времени диффузии, за которое РЭ, начиная с начального уровня n_0 , может достичь своего ионизационного предела, т.е.

$$\tau_{ef}(n_0) = \frac{\omega_L^{4/3}}{0.65F^2} n_0^2 \left(1 - \frac{n_c}{2n_0} \right) \quad (4)$$

(ω_L – начальное расщепление, F – напряженность “внутреннего” микроволнового поля, n_c – критическое значение n , соответствующее детерминированности траекторного движения РЭ для случая $n < n_c$), что позволяет проводить сравнение с экспериментом и упростить расчеты [17];

3) возмущение движения РЭ “внутренним” микроволновым полем должно превышать свою критическую величину, которую следует оценить, используя критерий перекрытия резонансов “по Чирикову” [21];

4) наличие верхнего предела возбужденных состояний, который связан с возможностью достижения РЭ ионизационного континуума по каналу фотоионизации;

5) перекрытие области стохастизации на нижнем пределе значений n_{ef} вследствие увеличения расстояния между соседними уровнями энергии PA (см. рис. 3, где приведены результаты расчета эволюции во времени функции распределения

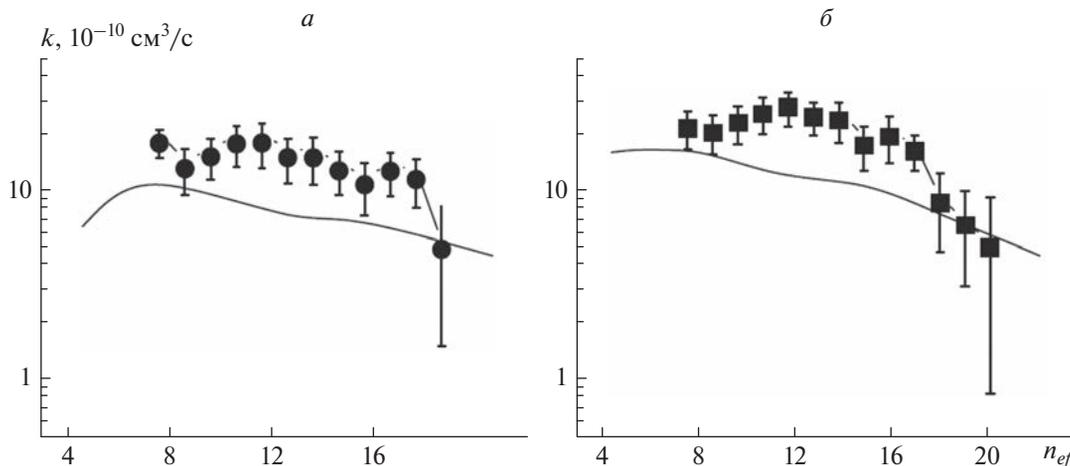


Рис. 4. Значения констант скоростей k (10^{-10} см³/с) реакции ассоциативной ионизации РА натрия: *a* – в nS -состояниях; *б* – в nD -состояниях. Символами обозначены результаты измерения для двух пересекающихся под углом 90° пучков, сплошная кривая – расчет в приближении Вайскопфа [23].

$\ln \rho(n, t)$ связанных состояний электрона по главному квантовому числу n для начального состояния $n_0 = 10$ [22]);

6) эффективное время развития диффузионной ионизации должно быть меньше характерного времени неупругих столкновений;

7) расчеты эффективности стохастических процессов ионизации ридберговских состояний проводился в рамках предложенной выше модели ДРМ.

Сплошными линиями на рис. 3 показана карта уровней и указаны значения $\ln(\rho(n, t))$, которые нанесены рядом с соответствующими кривыми. Положение минимумов граничных кривых определяется точкой поворота с минимальным сближением ядер. Видно, что пока начальное значение $n_0 = 10$ находится ниже $n_{min}(R(t))$ (временная область левее точки *A*), т.е. $n_0 = 10$ лежит в регулярной области, диффузии вдоль оси n не происходит. Она начинает развиваться после момента (точка *A*) входа начального значения $n_0 = 10$ в область стохастичности, лежащей выше кривой $n_{min}(R(t))$. В результате стохастической диффузии РЭ имеет конечную вероятность достичь границы ионизации и переходит в континуум энергий по каналу ионизации. В этом случае ионизация определяется как вероятность выхода электрона из области связанных состояний.

На рис. 4 приведены константы скоростей процессов АИ в столкновениях двух пересекающихся под углом 90° пучков атомов натрия, измеренные в работе [23] и рассчитанные в рамках диффузионного механизма ионизации с использованием приближения Вайскопфа в теории уширения и сдвига спектральных линий [24].

В теории детерминированного хаоса ширины динамических резонансов непосредственно связаны со значениями оператора возмущения. Это позволяет выразить коэффициент диффузии РЭ во внешнем микроволновом поле через его динамические характеристики.

Количественный анализ процессов с сильной стохастизацией траекторий частиц предполагает использование устойчивой “симплектической” схемы численного расчета параметров процесса в рамках техники Флоке [25, 26] и метода геометрического интегрирования [27].

4. ЭВОЛЮЦИЯ ОРБИТАЛЬНОГО МОМЕНТА РИДБЕРГОВСКОГО ВОДОРОДОПОДОБНОГО АТОМА В МИКРОВОЛНОВОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Понятие орбитального момента электрона ридберговского водородоподобного атома является одним из ключевых в теории атом-атомных столкновений. В квазиклассическом приближении орбитальный момент равен $L = \ell + 0.5$, где величина 0.5 – это поправка Лангера [28]. Заметим, что в работе [19], авторы которой во многом положили начало современным представлениям о квантовых параметрах электрона в микроволновом поле, этот вопрос не рассматривался.

В настоящее время процессы с участием РА широко используются в квантовых вариантах прикладных исследований. При этом возникают вопросы сохранения начальных параметров РЭ во внешнем микроволновом электрическом поле. В работах [25, 29] такая задача рассматривалась на примере орбитального момента РЭ в представлении глобального хаоса.

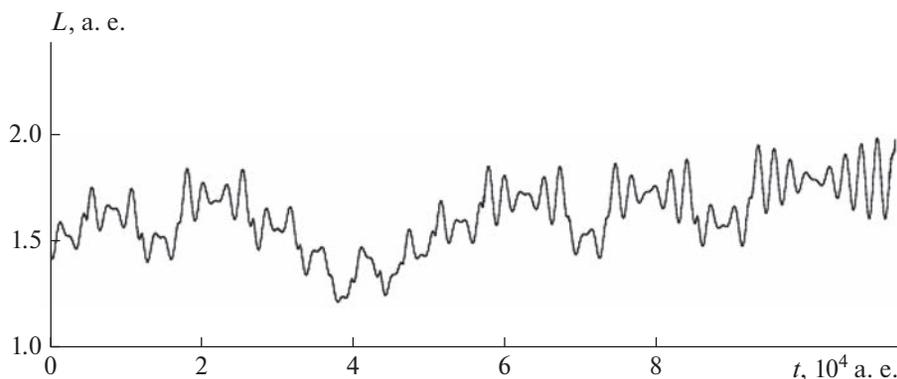


Рис. 5. Временная зависимость углового момента РЭ при параллельной взаимной ориентации вектора Рунге–Ленца–Лапласа A_0 и вектора поляризации поля E .

На рис. 5 приведен пример эволюции орбитального момента РЭ в микроволновом электрическом поле. На временах порядка времени развития диффузионной ионизации она практически не изменялась при конфигурации параметров $E \parallel A_0$. Здесь E – вектор напряженности микроволнового поля, A_0 – вектор Рунге–Ленца–Лапласа, регламентирующий параметры кеплеровской орбиты [28, 30].

На рис. 6 представлена зависимость углового момента L РЭ от времени развития глобального хаоса в 2D-атоме водорода, отвечающая начальной конфигурации с расположением вектора напряженности поля в плоскости орбиты электрона [25]. Для всех остальных возможных конфигураций орбитальный момент РЭ в микроволновом поле, как показано на рис. 6, может изменяться более существенно. Однако следует указать по крайней мере на две возможности ослабления влияния орбитального момента частицы на процесс диффузионной ионизации, когда выполняются следующие условия:

1) значение орбитального момента в эффективном процессе ионизации не достигает своего критического значения L_c , которое ограничивает сверху область развития глобального хаоса;

2) вследствие слабой зависимости критических значений напряженности микроволнового поля от L и соответствующего коэффициента диффузии в уравнениях типа Фоккера–Планка при $L < L_c$ характерное время диффузионной (стохастической) ионизации оказывается меньше времени существенного изменения L в рамках модели глобального хаоса.

Вопрос сохранения орбитального момента ℓ ридберговского атома приобретает новый смысл в ионосфере Земли (см., например, [3, 5]). В этом случае взаимодействие РА с нейтральными молекулами приводит к процессу l -перемешивания при сохранении значений главного квантового

числа в квазимолекуле, термы которой расщеплены на отдельные мультиплеты. Переходы между ними инициируют СВЧ-излучение дециметрового диапазона. При больших значениях полного углового момента квазимолекулы, когда квантовые различия между вырожденными состояниями квазимолекулы нивелируются, спектр излучения оказывается независимым от химического состава комплекса (РА + нейтральная частица среды) и радиационные переходы происходят без изменения главного квантового числа ($\Delta n = 0$). Случаю небольших изменений значения главного квантового числа $\Delta n \ll n$ соответствуют переходы микроволнового излучения [3].

5. АНОМАЛИИ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ В УСЛОВИЯХ ДВУХФОТОННОГО РЕЗОНАНСА ШТАРКА

Большие значения вероятностей дипольных переходов в водородоподобных атомах стимулируют их использование в квантовых прикладных исследованиях. В полной мере это относится к случаю двухфотонного резонанса Штарка (или РФ) [31] для структуры S -, P - и D -термов щелочных атомов, когда ℓ -терм расположен посередине между двумя соседними термами – $(\ell - 1)$ и $(\ell + 1)$. На рис. 7 представлено схематическое изображение структуры энергетических уровней для щелочных атомов, соответствующих реализации РФ.

В геокосмических условиях такому условию удовлетворяет естественная трехмерная структура атома Na, получившая в литературе название “трехмерного квантового осциллятора” [32], в котором “подавлены” длинноволновые переходы. По литературным данным условие резонанса Фёрстера достигается для атомов щелочных металлов в слабых электрических полях – порядка 2 В/см.

Выше были рассмотрены резонансные процессы образования молекулярных ионов в тепловом

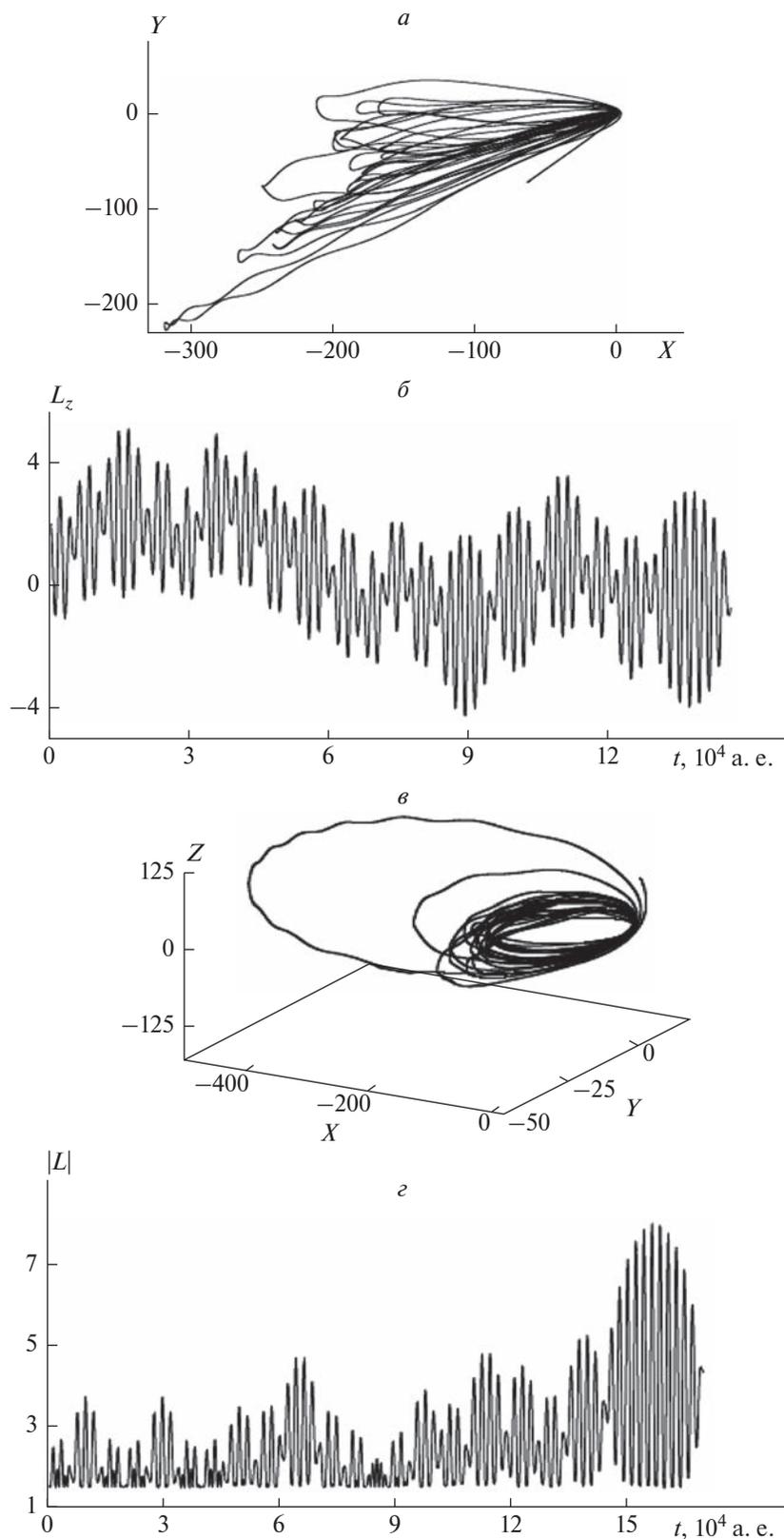


Рис. 6. Траектории РЭ и эволюция его углового момента \mathbf{L} для $10p$ -состояния атома водорода: *a* – случай 2D-движения РЭ в плоскости $\{XY\}$; *б* – эволюция проекции L_z его углового момента на ось Z , ортогональную плоскости движения $\{XY\}$; *в* – случай 3D-движения РЭ; *г* – эволюция $|\mathbf{L}|$. Критическое значение орбитального момента $L_c = 10$.

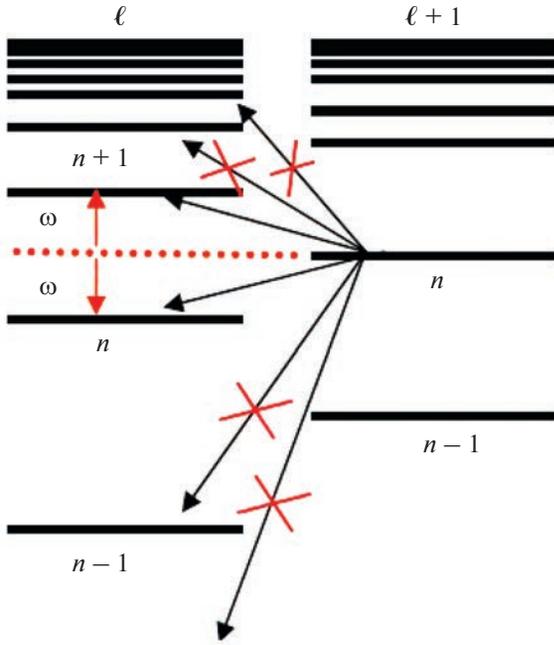


Рис. 7. Структура энергетических уровней для щелочных атомов, соответствующих реализации резонанса Фёстера между квантовыми состояниями $(\ell + 1)$ и ℓ атомных серий.

диапазоне энергии в микроволновом электрическом поле. Ниже приведены результаты селективного возбуждения атомов в слабом микроволновом поле, представляющие интерес для квантовых методов управления движением отдельных атомов в рамках структуры трехквантового осциллятора. Такие задачи удобно решать в рамках строения возбужденного атома по Зоммерфельду [33], отличающегося от чисто кулоновского наличием слагаемого центростремительного типа:

$$U_{\alpha}(r) = -\frac{1}{r} + \frac{\alpha}{2r^2}. \quad (5)$$

Анализ, проведенный в работе [34], показал, что в этом случае реализация условий РФ происходит для двух значений параметра α : $\alpha_1 = 2.82$ (для p - s -переходов) и $\alpha_2 = 11.8$ (для d - p -переходов).

На рис. 8 приведены результаты расчетов полной вероятности $A_{n\ell}$ спонтанных переходов из возбужденных S - и P -состояний в модельном атоме Зоммерфельда при варьировании значений параметра α , где величина $\alpha = 0$ отвечает случаю атома водорода. Результаты расчета позволяют оценить роль РФ в подавлении значений дипольных матричных переходов, т.е. получить представление о влиянии внешних электрических полей на динамику процессов диффузионной ионизации.

В квазиклассическом приближении удобной характеристикой времени ионизации может слу-

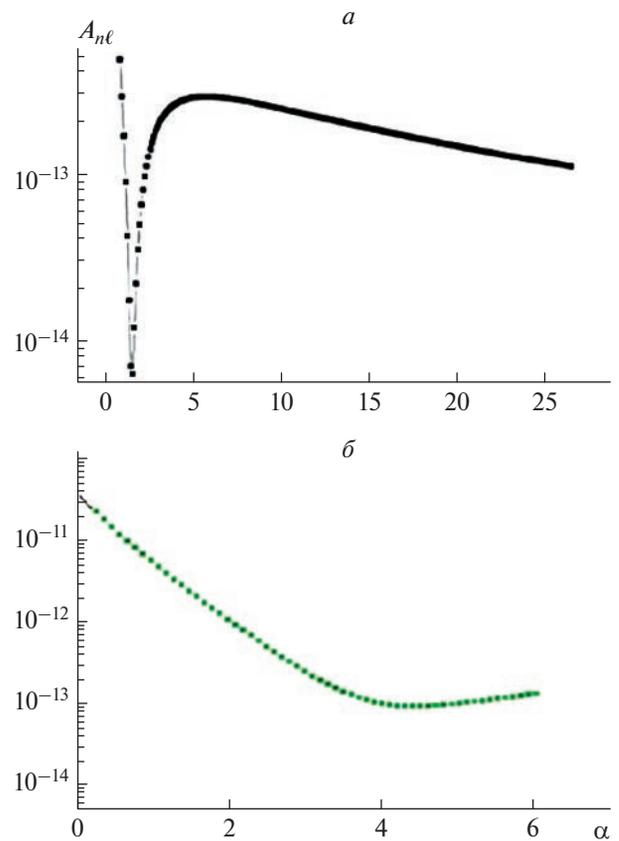


Рис. 8. Зависимость полной вероятности $A_{n\ell}$ (а.е.) спонтанных переходов из ридберговских состояний от параметра α атома Зоммерфельда: a – s -серия ($\ell = 0$), $n = 30$; b – p -серия ($\ell = 1$), $n = 25$.

жить число оборотов N ридберговского электрона вокруг атомного центра по кеплеровской орбите до его ухода в ионизационный континуум. Рост N говорит о затягивании времени, т.е. о частичной блокировке глобальной стохастизации, в то время как его уменьшение – о росте ее интенсивности. На рис. 9 приведена зависимость N от значений параметра α . Видно, что вблизи значений $\alpha = 2.81$ число оборотов увеличивается, что связано с подавлением эффективности дипольных переходов в окрестности РФ.

6. ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ НА СТАДИИ ФОРМИРОВАНИЯ ХОЛОДНОЙ ПЛАЗМЫ

В физике атомных столкновений принято различать процессы по величине энергии атомов-партнеров на тепловые и субтепловые ($10^{-3} \leq E \leq 10^{-1}$ эВ), холодные ($10^{-6} \leq E \leq 10^{-3}$ эВ) и ультрахолодные ($10^{-9} \leq E \leq 10^{-6}$ эВ). В случаях, когда время столкновения и время индуцированного им процесса оказываются величинами одного порядка, они носят название фотоассоциированно-

го процесса. Для случая “холодных” атомов в световом поле масштабы длины, времени и ширины спектральных линий отличаются от своих классических вариантов.

Исследования, начатые в конце 1980-х, показали, что свет может быть использован для эффективного охлаждения атомов. В свою очередь, это привело к новым понятиям в атомной физике: атомная интерферометрия, оптические решетки для управления движением атомов и др. Эти понятия входят в содержание новой “оптической” физики, в которой одну из центральных ролей играют холодные атомные взаимодействия. Температурный интервал столкновений 1 мК – 1 мК может быть реализован методами внутридиплеровской спектроскопии. Более низкие температуры, получаемые в магнитных оптических ловушках, привели к реализации идеи бозе-эйнштейновского конденсата. При этом масштаб межатомных взаимодействий становится сравнимым с длиной волны де-Бройля частиц, что позволяет, в частности, наблюдать эффекты волновых взаимодействий типа интерференции.

Рассмотренные выше процессы ионизации с участием ридберговских частиц в тепловом диапазоне могут играть заметную роль в низкотемпературной плазме. В то же время их вклад становится определяющим в холодной плазме, например в качестве квантового вентиля либо управления движением отдельных атомов. Время жизни ансамбля холодных частиц, необходимого для развития ультрахолодной плазмы, по существующим данным составляет величину порядка 10^2 нс [35]. На таких временах дальнедействующее диполь-дипольное взаимодействие холодных ридберговских атомов наряду с ван-дер-ваальсовским взаимодействием и наличием процесса фотоионизации обеспечивает начальную стадию самоорганизации ультрахолодных ридберговских частиц в ультрахолодной плазме.

В работах [36, 37] проведен анализ вклада процессов пеннинговской ионизации (ПИ) и фотоионизации (ФИ) в создание первичных заряженных частиц в холодных ридберговских средах. Поскольку в ультрахолодных условиях на характерных временах наблюдения межатомное расстояние R не успевает существенно измениться (“замороженный” газ), константы скоростей ПИ определяются автоионизационными ширинами $\Gamma_N = \tilde{\Gamma}_N / R^6$ для квазимолекул, составленных из пар ридберговских атомов, т.е. $\Gamma_N = \{n_d \ell_d, n_i \ell_i\}$. Авторы работ [36, 37] в рамках модифицированной модели Смирнова–Фирсова–Катцууры [38, 39] и квазиклассического приближения [40] разработали эффективную схему расчета приведенных ширин ПИ как результат оже-процесса с участием атомов водорода [36] и ридберговских атомов щелочных металлов [37, 41]

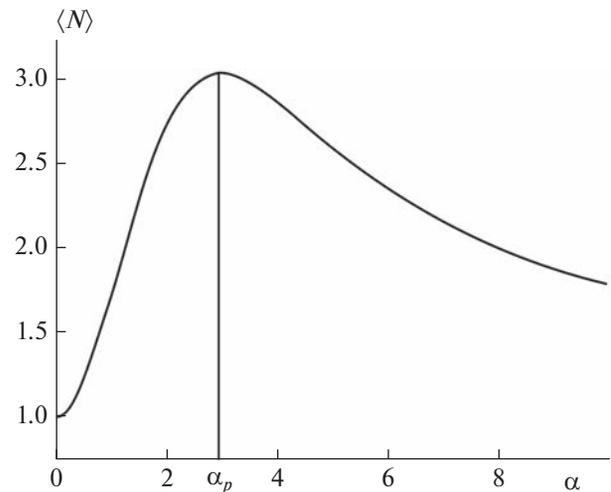


Рис. 9. Зависимость среднего числа периодов N от параметра α в случае развития диффузионной ионизации модельного атома Зоммерфельда в микроволновом поле. Величина N нормирована на единицу для атома водорода ($\alpha = 0$), $\alpha_p = 2.81$.

для симметричных и несимметричных случаев (см. рис. 10). В результате диполь-дипольного взаимодействия атом A_d^{**} передает атому A_i^{**} энергию $\hbar\omega_d$, переводя его в континуум при условии $\hbar\omega_d \geq \epsilon_{0i}$. В случае несимметричных пар энергии связи $\epsilon_{0(i,d)}$ ридберговских электронов в атомах различаются.

В случае атома водорода автоионизационную ширину $\tilde{\Gamma}_N$ удастся описать в явном аналитическом виде:

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_N &= R^6 \Gamma_N = \\ &= \frac{9}{68(\pi n_i n_d)^3} \left(\frac{2^{2/3} \Gamma(2/3)}{3^{1/3}} \right) \left(\frac{1}{2\tilde{n}_d^2} - \frac{1}{2n_d^2} \right)^{-17/3}, \end{aligned} \quad (6)$$

где R – межатомное расстояние взаимодействующих ридберговских атомов, \tilde{n}_d – главное квантовое число реального уровня, расположенного ближе к уровню с n_d . На рис. 11 для случая атомов водорода изображена осцилляционная структура приведенных ширин $\tilde{\Gamma}_N$ при изменении n_d , обусловленная [40] нелинейной зависимостью параметров оптических переходов, изображенных на рис. 10, от квантовых чисел атомных пар. Заметим, что при компьютерном моделировании автоионизационная ширина практически совпадает с результатом аналитического решения, в котором возможно проявление оптических переходов, запрещенных в классическом варианте. Обращает на себя внимание значительное (на порядок величины) увеличение значений $\tilde{\Gamma}_N$ при схлопывании

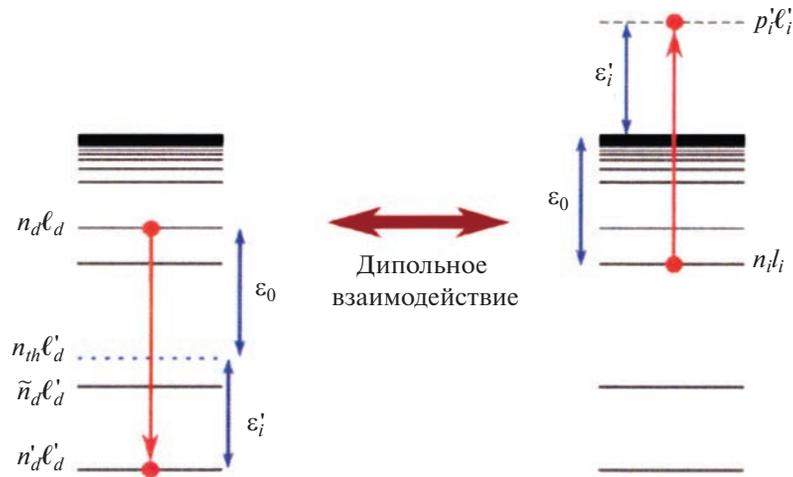


Рис. 10. Схематическое изображение резонансного взаимодействия ридберговской атомарной пары $A_i^{**} - A_d^{**}$ с континуумом посредством оже-процесса; n_{th} — теоретически рассчитанное значение.

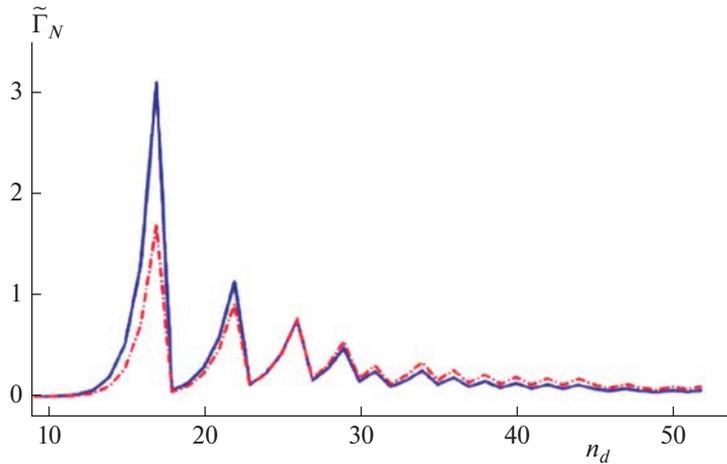


Рис. 11. Приведенная автоионизационная ширина $\tilde{\Gamma}_N$ несимметричной квазимолекулы $(H_d^{**} + H_i^{**})$ при фиксированном межатомном расстоянии R . Сплошная синяя кривая получена в результате численного расчета, штриховая красная кривая — на основе аналитической формулы (6).

размеров ($\sim n_d^2$) девозбуждающегося d -атома по сравнению с симметричным случаем, т.е. $n_d = n_i$ для различных орбитальных конфигураций пар атомов. В случае каждого вида атома щелочного металла существует оптимальное значение $n_d^{(opt)}(n_i)$, для которого возникает максимальный (оптимальный) пик $\tilde{\Gamma}_N^{(opt)}$ величины приведенной автоионизационной ширины взаимодействующей пары.

При этом диполь-дипольные взаимодействия возбужденных атомов в рамках квазиклассических представлений пропорциональны n^2 , что стимулирует развитие ионизационных процессов в ансамбле возбужденных атомов и приводит к развитию ультрахолодной плазмы. На временах

порядка 10^2 нс эта плазма образуется с энергией порядка 10^{-9} эВ. В первую очередь речь здесь идет о процессе пеннинговской ионизации и ее роли на начальной стадии самоорганизации низкотемпературной плазмы. Помимо оже-процесса источником первичной ионизации ансамбля ридберговских атомов могут служить тепловое излучение и взаимодействие Ван-дер-Ваальса [37].

Начальный этап развития холодной плазмы обсуждался в работах [38, 39], где были рассмотрены оже-процессы с участием ридберговских щелочных атомов и атома водорода для симметричных и несимметричных случаев. Результаты со стопроцентной вероятностью свидетельствуют о подавляющем преимуществе (на несколько порядков величины) несимметричных процессов, в

которых особый интерес представляет канал образования холодных частиц [40, 41].

Вторым нетривиальным результатом, отмечавшимся в ранней работе [42], является определение структуры поверхностей потенциальных энергий (ППЭ) квазимолекул, т.е. партнеров по взаимодействию. В итоге становится возможным экспериментальное наблюдение электронных спектров, отсутствующих в первом приближении.

7. РИДБЕРГОВСКИЕ СОСОЯНИЯ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ В ИОНОСФЕРЕ ЗЕМЛИ

В периоды повышения солнечной активности и формирования геомагнитных возмущений в ионосфере Земли происходят неконтролируемые спорадические нарушения спутниковых сигналов глобальных навигационных спутниковых систем (ГНСС), что обусловлено фазовыми сбоями и групповой задержкой при распространении электромагнитного СВЧ-излучения через резонансную квантовую среду. Поиск путей, обеспечивающих устойчивость работы ГНСС, является фундаментальной научно-технической проблемой. В эти периоды на высотах E- и D-слоев ионосферы Земли формируется сверхфоновое некогерентное высокочастотное СВЧ-излучение с длинами волн в диапазоне от дециметровых до миллиметровых значений. Это излучение обусловлено оптическими переходами между орбитально вырожденными ридберговскими состояниями атомов и молекул атмосферных газов, которые возбуждаются электронами в ионосферной плазме и находятся в окружении нейтральных частиц среды [3, 43, 44].

Заметим, что достоверная информация о мощности потока СВЧ-излучения в указанном диапазоне длин волн в настоящее время отсутствует. Ответ на этот вопрос целиком зависит от знания динамики ударного и радиационного тушения ридберговских состояний и кинетики их заселения в нижней ионосфере, т.е. от резонансных оптических квантовых свойств возмущенной среды [43].

Анализ существующих экспериментальных данных показал, что СВЧ-излучение формируется в атмосферном слое, расположенном на высотах 80–110 км [45]. При прохождении этого слоя физический механизм задержки спутникового сигнала в дециметровом диапазоне обусловлен каскадом резонансного рассеяния фотонов сигнала ГНСС на совокупности ридберговских состояний. Наиболее перспективным подходом к исследованию его оптических свойств может служить одновременный анализ образующегося сверхфонового шума и времени задержки распространения сигнала ГНСС, определяющего ошибки позиционирования [46].

Использование стандартных методов измерения шума не позволяет обнаружить ряд физико-химических процессов, ответственных за формирование и влияющих на ошибки позиционирования. Для решения задачи уровень фонового шума удобно привязать к измеряемому сигналу ГНСС, задержки распространения которого обусловлены проявлением одного из важнейших атмосферных столкновительных процессов – орбитально-го вырождения высоковозбужденных состояний. С этой целью целесообразно перейти к параметру сигнал/шум, где под сигналом следует понимать уровень выделенного приемником сигнала ГНСС, а под шумом – величину его флуктуации.

Пути дальнейшего развития современной теории связаны с разработкой более строгих методов описания воздействия нейтральных частиц среды на динамику ударного и радиационного тушения. Причем в первую очередь здесь следует ориентироваться на элементарные процессы с участием молекул азота и кислорода. Показано, что для количественных оценок влияния возбужденных частиц на спектр некогерентного СВЧ-излучения атмосферы необходимы проведение предварительных расчетов динамики неадиабатических переходов между ППЭ ридберговских комплексов [47], построение соответствующих электронных волновых функций, включая расчеты дипольных моментов разрешенных переходов, и определение формы линии излучения [48]. Полученные результаты должны быть включены в общую кинетическую схему, которая устанавливает зависимость СВЧ-излучения от плотности и температуры нижней ионосферы. Тогда данные спутникового мониторинга инфракрасного излучения, сопровождающего СВЧ-излучение, могут быть непосредственно использованы для детектирования ридберговских состояний и диагностики параметров ионосферной плазмы [49–51].

Следующим важным объектом исследования является эффект “временной задержки” спутниковых сигналов. Ионосферные задержки сигналов спутниковой навигации и связанные с ними ошибки позиционирования определяются распределением электронной концентрации на трассе спутник–приемник [52, 53]. Длительные исследования вертикальной структуры ионосферы с применением ионозондов позволили накопить обширный экспериментальный материал по распределению электронной концентрации ниже максимума F₂-слоя ионосферы (ниже 400 км от поверхности Земли). Распределение электронов выше этого максимума ионосферы известно значительно хуже. Отдельные данные о структуре ионосферы выше 400 км были получены в экспериментах по зондированию ионосферы со спутников. Однако этих данных вследствие отсутствия регулярных наблюдений оказалось недостаточно для эмпирического моделирования

химической физики верхней ионосферы [54]. В настоящее время активно проводятся наблюдения, позволяющие восстановить структуру верхней ионосферы по сигналам GPS, принимаемых как на спутниках, находящихся на околоземных орбитах, так и на наземных станциях. Так, например, в работе [55] была рассмотрена задача о восстановлении профиля электронной концентрации в ионосфере по наблюдениям сигналов GPS, которая решалась методами томографии.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе рассмотрены процессы ионизации с участием ридберговских атомов водорода и водородоподобных атомов. В том числе рассмотрен канал ионизации с образованием молекулярных ионов, который реализуется при взаимодействии атомов щелочных металлов с участием атомов в нижних (резонансных) состояниях и приводит к эффективному формированию фотоионизационной плазмы [56], а также при “кооперативной люминесценции”, когда суммарная энергия при парных столкновениях передается одному из атомов-партнеров.

Наряду с классическими методами теории привлечены сравнительно новые подходы, основанные на концепции динамического хаоса при столкновении частиц с участием высоковозбужденных (ридберговских) атомных и молекулярных состояний. Описаны квазиклассические модели образования и распада системы столкновительного казимолекулярного комплекса и продемонстрирована адекватность использования детерминированного и стохастического подходов к описанию динамики развития ионизационных процессов в физике атомных столкновений. Проанализирован ряд реакций, протекающих в нижней ионосфере Земли и влияющих на устойчивость функционирования глобальных навигационных спутниковых систем.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 122040500060—4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Klucharev A.N., Vujnović V. // Phys. Rep. 1990. V. 185. № 2. P. 55; [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(90\)90112-F](https://doi.org/10.1016/0370-1573(90)90112-F)
2. Ключарев А.Н. // УФН. 1993. Т. 163. № 6. С. 39; <https://doi.org/10.3367/UFNr.0163.199306b.0039>
3. Golubkov G.V., Golubkov M.G., Manzhelii M.I. et al. // The Atmosphere and Ionosphere: Elementary Processes, Monitoring, and Ball Lightning / Eds. Bychkov V.L., Golubkov G.V., Nikitin A.I. N.Y.: Springer, 2014. P. 1; https://doi.org/10.1007/978-3-319-05239-7_1
4. Фриш С.Э. // УФН. 1957. Т. 61. № 4. С. 461; <https://doi.org/10.3367/UFNr.0061.195704a.0461>
5. Безуглов Н.Н., Голубков Г.В., Ключарев А.Н. Проявления “динамического хаоса” в реакциях с участием ридберговских состояний. СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского ГУ, 2017.
6. Табор М. Хаос и интегрируемость в нелинейной динамике. М.: УРСС, 2001.
7. Ключарев А.Н., Безуглов Н.Н. Элементарные процессы и ионизационные явления в газовых средах. СПб.: Изд-во Санкт-Петербургского ГУ, 2013.
8. Fermi E. // Nuovo Cim. 1934. V. 11. № 3. P. 157; <https://doi.org/10.1007/BF02959829>
9. Голубков Г.В., Девдариани А.З. // Хим. физика. 2011. Т. 30. № 11. С. 16.
10. Алексеев В.А., Собельман И.И. // ЖЭТФ. 1966. Т. 49. Вып. 4. С. 1274.
11. Мазинг М.А., Врублевская Н.А. // ЖЭТФ. 1966. Т. 50. Вып. 2. С. 343.
12. Ключарев А.Н., Лазаренко А.В. // Оптика и спектроскопия. 1980. Т. 48. № 2. С. 412.
13. Golubkov G.V., Ivanov G.K. // J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. 1988. V. 21. № 11. P. 2049; <https://doi.org/10.1088/0953-4075/21/11/019>
14. Golubkov M.G., Ozerov G.K., Adamson S.O. et al. // Chem. Phys. 2015. V. 462. P. 28; <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2015.07.037>
15. Голубков Г.В., Иванов Г.К., Голубков М.Г. // Хим. физика. 2005. Т. 24. № 6. С. 3.
16. Голубков Г.В., Иванов Г.К. // Хим. физика. 2003. Т. 22. № 10. С. 25.
17. Reetz-Lamour M., Amthor T., Deiglmayr J. et al. // Fortschritte der Phys. 2006. V. 54. № 8–10. P. 776; <https://doi.org/10.1002/prop.200610318>
18. Djerad M.T., Harima H., Cheret M. // J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. 1985. V. 18. № 23. P. L815; <https://doi.org/10.1088/0022-3700/18/23/004>
19. Девдариани А.З., Ключарев А.Н., Пенкин Н.П. и др. // Оптика и спектроскопия. 1988. Т. 64. № 3. С. 706.
20. Безуглов Н.Н., Бородин В.М., Ключарев А.Н. и др. // Оптика и спектроскопия. 1997. Т. 82. № 3. С. 368.
21. Chirikov B.V. // Phys. Rep. 1979. V. 52. № 5. P. 263; [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(79\)90023-1](https://doi.org/10.1016/0370-1573(79)90023-1)
22. Орловский К.В., Безуглов Н.Н., Бородин В.М. и др. // Оптика и спектроскопия. 2001. Т. 91. № 1. С. 25.
23. Beterov I.I., Tretyakov D.B., Ryabtsev I.I. et al. // J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. 2005. V. 38. № 24. P. 4349; <https://doi.org/10.1088/0953-4075/38/24/002>
24. Miculis K., Beterov I.I., Bezuglov N.N. et al. // J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. 2005. V. 38. № 11. P. 1811; <https://doi.org/10.1088/0953-4075/38/11/020>
25. Ефимов Д.К., Безуглов Н.Н., Ключарев А.Н. и др. // Оптика и спектроскопия. 2014. Т. 117. № 6. С. 888; <https://doi.org/10.7868/S003040341412006X>
26. Chu S.I., Telnov D.A. // Phys. Rep. 2004. V. 390. № 1–2. P. 1; <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2003.10.001>
27. Hairer E. Numerical geometric integration. Geneve: Universite de Geneve, 1999.
28. Ландау Л., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматлит, 2002.

29. *Arefieff K.N., Miculis K., Bezuglov N.N. et al.* // *J. Astrophys. Astron.* 2015. V. 36. № 4. P. 613; <https://doi.org/10.1007/s12036-015-9358-5>
30. *Арнольд В.И.* Математические методы классической механики. М.: Наука, 1974.
31. *Walker T.G., Saffman M.* // *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 2005. V. 38. № 2. P. S309; <https://doi.org/10.1088/0953-4075/38/2/022>
32. *Безуглов Н.Н., Борисов Е.И., Веролайнен Я.Ф.* // *УФН.* 1991. Т. 161. № 1. С. 3; <https://doi.org/10.3367/UFNr.0161.199101a.0003>
33. *Зоммерфельд А.* Строение атома и спектры. М.: Гостехиздат, 1956.
34. *Захаров М.Ю., Безуглов Н.Н., Ключарев А.Н. и др.* // *Хим. физика.* 2011. Т. 30. № 7. С. 3.
35. *Pillet P., Gallagher T.F.* // *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 2016. V. 49. № 17. 174003; <https://doi.org/10.1088/0953-4075/49/17/174003>
36. *Безуглов Н.Н., Бородин В.М., Ключарев А.Н. и др.* // *Оптика и спектроскопия.* 1995. Т. 79. № 5. С. 738.
37. *Zalat A.A., Bruvelis M., Miculis K. et al.* // *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 2021. V. 54. № 6. 065201; <https://doi.org/10.1088/1361-6455/abd9fe>
38. *Бородин В.М., Добролеж Б.В., Ключарев А.Н. и др.* // *Оптика и спектроскопия.* 1995. Т. 78. № 1. С. 20.
39. *Efimov D.K., Miculis K., Bezuglov N.N. et al.* // *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* 2016. V. 49. № 12. 125302; <https://doi.org/10.1088/0953-4075/49/12/125302>
40. *Безуглов Н.Н., Бородин В.М., Ключарев А.Н. и др.* // *Оптика и спектроскопия.* 1999. Т. 86. № 6. С. 922.
41. *McGeoch M.W., Schlier R.E., Chawla G.K.* // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V. 61. № 18. P. 2088; <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2088>
42. *Смирнов Б.М., Фирсов О.Б.* // *Письма в ЖЭТФ.* 1965. Т. 2. № 3. С. 478.
43. *Голубков Г.В., Голубков М.Г., Манжелей М.И.* // *Хим. физика.* 2012. Т. 31. № 2. С. 31.
44. *Голубков Г.В., Манжелей М.И., Берлин А.А. и др.* // *Хим. физика.* 2021. Т. 40. № 3. С. 86; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21030055>
45. *Su S.-Y., Tsai L.-C., Liu C.H. et al.* // *Adv. Space Res.* 2019. V. 64. № 10. P. 2137; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2019.06.039>
46. *Голубков Г.В., Манжелей М.И., Берлин А.А. и др.* // *Хим. физика.* 2016. Т. 35. № 1. С. 5; <https://doi.org/10.7868/S0207401X16010039>
47. *Голубков Г.В., Куверова В.В., Озеров Г.К. и др.* // *Хим. физика.* 2017. Т. 36. № 12. С. 12; <https://doi.org/10.7868/S0207401X17120093>
48. *Уманский С.Я., Адамсон С.О., Ветчинкин А.С. и др.* // *Хим. физика.* 2023. Т. 42. № 4. С. 31; <https://doi.org/10.31857/S0207401X23040143>
49. *Kuverova V.V., Adamson S.O., Berlin A.A. et al.* // *Adv. Space Res.* 2019. V. 64. № 10. P. 1876; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2019.05.041>
50. *Farrar D., Smith K.E., Ardila D. et al.* // *J. Astron. Telesc. Instrum. Syst.* 2019. V. 5. № 2. 020901; <https://doi.org/10.1117/1.jatis.5.2.020901>
51. *Родионов А.И., Родионов И.Д., Родионова И.П. и др.* // *Хим. физика.* 2021. Т. 40. № 10. С. 61; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21100113>
52. *Голубков Г.В., Манжелей М.И., Эппельбаум Л.В.* // *Хим. физика.* 2018. Т. 37. № 5. С. 63; <https://doi.org/10.7868/S0207401X18050084>
53. *Голубков Г.В., Адамсон С.О., Борчевкина О.П. и др.* // *Хим. физика.* 2022. Т. 41. № 5. С. 53.; <https://doi.org/10.31857/S0207401X22050053>
54. *Nesterov I.A., Kunitsyn V.E.* // *Adv. Space Res.* 2011. V. 47. № 10. P. 1789; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2010.11.034>
55. *Jin S., Park J.U., Wang J.L. et al.* // *J. Navig.* 2006. V. 59. № 3. P. 395; <https://doi.org/10.1017/S0373463306003821>
56. *Безуглов Н.Н., Ключарев А.Н., Стасевич Т.* // *Оптика и спектроскопия.* 1994. Т. 77. № 3. С. 342.

УДК 539.196

**ФРАГМЕНТАЦИЯ МОЛЕКУЛ АДЕНИНА
ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ИОНАМИ**© 2023 г. А. А. Басалаев^{1*}, В. В. Кузьмичев¹, М. Н. Панов¹, К. В. Симон¹, О. В. Смирнов¹¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: a.basalaev@mail.ioffe.ru

Поступила в редакцию 02.02.2023;

после доработки 16.02.2023;

принята в печать 20.02.2023

Исследован механизм процессов фрагментации ионов аденина (Ade, C₅H₅N₅), происходящих при взаимодействии молекул, находящихся в газовой фазе, с ионами энергий порядка кэВ. Измерены относительные сечения различных элементарных процессов, осуществляющихся при однократных столкновениях ионов с молекулами. Экспериментально изучены каналы процессов фрагментации однозарядных ионов Ade⁺. Методом самосогласованного поля в полном активном пространстве (CASSCF) выполнен расчет геометрии молекул и однозарядных ионов Ade⁺, а также путей реакций основных экспериментально наблюдаемых каналов фрагментации этих ионов.

Ключевые слова: захват электронов, аденин, фрагментация молекулярных ионов, масс-спектрометрия, метод CASSCF.

DOI: 10.31857/S0207401X23100035, EDN: RMPETI

ВВЕДЕНИЕ

Аденин (Ade, C₅H₅N₅), производное гетероциклической молекулы пурина, входит в состав нуклеиновых кислот ДНК и РНК (обозначается как А — одна из пяти букв генетического кода), а также в состав такой биологически важной молекулы, как аденозинтрифосфат. Биологическая значимость аденина инициировала большое количество работ по исследованию взаимодействия изолированных молекул аденина с ионизирующим вакуумным ультрафиолетовым (ВУФ) [1–5] излучением, воздействующим как на валентные электроны молекулы, так и на различные заряженные частицы, электроны [6–11] и ионы [12–17]. В большинстве этих работ для исследования радиационной устойчивости аденина использовали масс-спектрометрический анализ фрагментации молекулярных ионов, образующихся при ионизации молекул, находящихся в газовой фазе. Следует отметить, что такая методика исключает химические процессы, происходящие при взаимодействии излучения с растворами или твердым телом [18].

Применение фотоэлектронной спектроскопии позволило измерить величины потенциала ионизации и энергий связи валентных электронов аденина [1, 2, 5]. В этих работах отнесение пиков в экспериментально полученных спектрах электронов было выполнено с помощью *ab initio* расчетов.

Измерение интенсивности образования различных фрагментов в зависимости от энергии ВУФ-излучения позволило определить энергии появления различных фрагментов [3, 4]. В работе [4] было показано, что интенсивность образования ионов-фрагментов при фотоионизации аденина ультрафиолетовым излучением, быстро возрастает при изменении энергии фотонов от 12 до 21 эВ. Такая картина процесса ионизации принципиально отличается от ионизации электронным ударом. В работе [10] показано, что в диапазоне энергий электронов 40–100 эВ соотношение между пиками в масс-спектре, формируемом при ионизации аденина электронным ударом, практически не меняется. Это наблюдается и при ионизации электронным ударом молекулы тетрагидрофурана [19] в диапазоне энергий электронов 50–5000 эВ. Исключение из этого правила в работе [19] обнаружено только для ионов Н⁺, которые не регистрировались в работе [10], и интенсивность образования которых увеличивалась с ростом энергии электронов. Это может быть объяснено тем, что с увеличением энергии электронов возрастает сечение процессов многократной ионизации, т.е. процессов, в которых с высокой вероятностью фрагментация молекулярных ионов сопровождается образованием протонов [20].

Взаимодействие молекул органических соединений с ионами носит более сложный характер из-за большого количества возможных элемен-

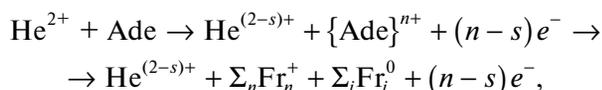
тарных процессов, имеющих сравнимые величины сечений. В первую очередь сечения этих процессов зависят от энергии налетающих ионов. Для медленных столкновений, когда скорость налетающего иона (V_p) меньше скорости электронов, участвующих в процессе ($V_p < 1$ а.е. = $2.18 \cdot 10^8$ см/с или $E_p < 25$ кэВ/а.е.м.), основными по величине сечения являются процессы, сопровождаемые захватом электронов. При более высоких энергиях столкновения начинают играть значительную роль процессы ионизации [16]. Кроме того, фрагментация образовавшихся в процессе захвата одного электрона ионов зависит от электронной структуры налетающего иона, которая определяет электронное возбуждение образующегося молекулярного иона [13, 21].

Цель данной работы – исследование механизма радиационных повреждений изолированных молекул Ade, вызванных взаимодействием с ионами He^{2+} с энергией $E_p = 4$ кэВ/а.е.м. (скорость $V_p = 0.41$ а.е.). Выбор налетающих ионов основан на том, что простой качественный анализ [21] позволяет предположить, что в процессе захвата одного электрона будут образовываться ионы аденина с относительно невысокой степенью возбуждения. С другой стороны, процессы захвата двух электронов позволят исследовать фрагментацию многозарядных и возбужденных промежуточных молекулярных ионов.

Для изучения механизма фрагментации однозарядных молекулярных ионов Ade^+ были выполнены квантовохимические расчеты. Выбор каналов фрагментации однозарядных молекулярных ионов для анализа проводили на основании экспериментальных масс-спектров ионов-фрагментов, образующихся в процессе захвата одного электрона ионами He^{2+} .

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Настоящая работа была выполнена с использованием экспериментальной методики, ранее примененной при исследовании взаимодействия ионов с основаниями нуклеиновых кислот и дипептидами [17, 20, 22]. Эксперимент основан на измерении относительных сечений различных элементарных процессов, происходящих с изменением зарядового состояния партнеров столкновения:



где $\{Ade\}^{n+}$ – образующееся в процессе захвата ионом He^{2+} s электронов ($s = 1, 2$) промежуточное состояние молекулярного иона с зарядом n , $(n-s)$ – число возникающих в процессах захвата свободных электронов, Fr_n^+ – ионы-фрагменты, как

правило, однозарядные, Fr_i^0 – нейтральные фрагменты. Зарядовые состояния взаимодействующих частиц описаны тремя числами $\{2(2-s)n\}$. Относительные сечения соответствующих процессов обозначаются как $\sigma_n^{2(2-s)}$.

Зарядовое состояние налетающих ионов после взаимодействия определялось электростатическим анализатором. Момент времени регистрации ионов He^+ или атомов He , образовавшихся после захвата одного или двух электронов, служил стартовым сигналом для регистрирующей системы. Сигналы детектора времяпролетного масс-спектрометра регистрировались в “многоstopовом” режиме. Ионно-оптическая система масс-спектрометра обеспечивала полный сбор образовавшихся в газовой струе ионов-фрагментов с начальными энергиями до 9 эВ.

Определение величин относительных сечений процессов изменения зарядового состояния партнеров столкновений проводили на основе анализа масс-спектров, полученных после вычитания фоновой составляющей и нормированных на интеграл тока пучка налетающих ионов. При обработке результатов измерений формировались масс-спектры для процессов с одновременным образованием одного, двух, трех или четырех заряженных молекулярных фрагментов. Таким образом, были разделены процессы одноэлектронного захвата {211}, захвата электрона с ионизацией {212} и захвата электрона с двукратной ионизацией {213}. Также были разделены процессы, обусловленные захватом двух электронов: двухэлектронный захват {202}, захват двух электронов с ионизацией {203} и захват двух электронов с двукратной ионизацией {204}. Типичный масс-спектр молекулярных фрагментов, образующихся при взаимодействии ионов He^{2+} с изолированными молекулами Ade в процессе одноэлектронного захвата {211}, приведен на рис. 1.

КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

Целью квантовохимических расчетов был анализ путей реакций основных, экспериментально наблюдаемых каналов фрагментации ионов Ade^+ . Расчет параметров нейтральной молекулы аденина и однозарядного молекулярного иона (вставка на рис. 1) проводился по программе GAMESS-US [23] в полноэлектронном корреляционно-согласованном атомном базисном наборе $cc-pVDZ$ методом самосогласованного поля в полном активном пространстве (CASSCF). Такие расчеты успешно применяются для определения геометрических и энергетических параметров молекул органических веществ (см., например [24–26]).

При выполнении расчетов для каждого из рассматриваемых каналов фрагментации молекуляр-

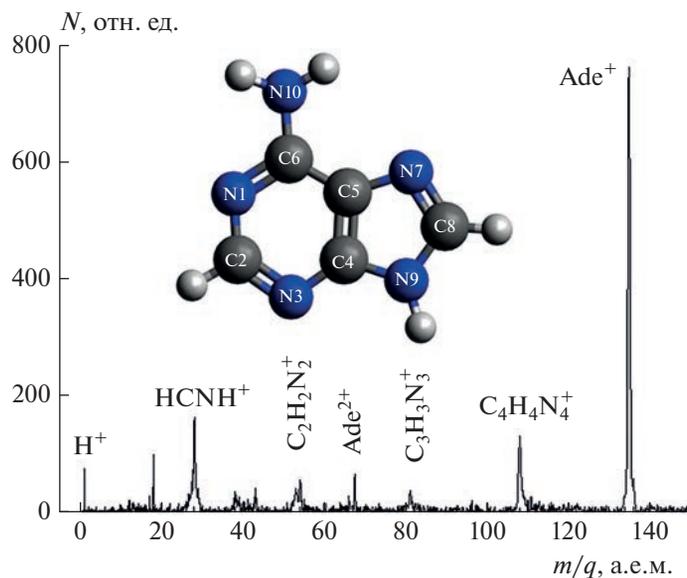


Рис. 1. Масс-спектр фрагментов, образовавшихся в процессе одноэлектронного захвата {211}, при столкновении ионов He^{2+} с молекулами аденина. Температура печи – 207 °С. На вставке – структурная формула молекулы аденина.

ного иона строилось свое модельное пространство локализованных активных орбиталей в зависимости от разрываемых химических связей. Далее его дополняли дважды занятыми и вакантными виртуальными орбиталями до CASSCF(10,10) с целью передать электронную корреляцию в сопряженной системе двойных связей. При образовании молекулярного иона один электрон уходит из активного пространства и его состояние описывается методом CASSCF(9,10). Общая методика построения активных пространств представлена в работе [27]. Для визуализации полученных результатов квантовохимических расчетов использовалась программа wxMacMolPlt [28].

Таким образом, при расчете путей реакции для различных каналов фрагментации использовали различные активные пространства, что привело к разным значениям параметров молекулы Ade и иона Ade^+ (табл. 1). В табл. 1 приведены средние значения рассчитанных длин связи для семи различных пространств локализованных активных орбиталей (см. рис. 1) и среднее квадратичное отклонение. Как видно из приведенных данных, рассчитанные длины связей хорошо согласуются с расчетами, выполненными в рамках теории функционала плотности (DFT) [7, 29] и экспериментом [29]. Вычисленные нами также для семи различных пространств локализованных активных орбиталей значения вертикального потенциала ионизации молекулы аденина $I_{\nu} = (7.90 \pm \pm 0.07)$ эВ хорошо согласуются с экспериментальными и расчетными данными [7, 30].

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Относительные сечения процессов $\{2(2 - s)n\}$

Относительные величины сечений процессов изменения зарядового состояния партнеров столкновений приведены в табл. 2. Как видно из приведенных данных, при взаимодействии иона He^{2+} с молекулами Ade основной по величине сечения – процесс одноэлектронного захвата {211}, эффективно осуществляющийся при больших параметрах удара $\sim 4\text{--}10$ а.е. [21].

Образование свободных протонов в результате взаимодействия молекул Ade с ионами обусловлено в основном многоэлектронными процессами, т.е. происходит при фрагментации образующихся молекулярных ионов $\{\text{Ade}\}^{n+}$ $n \geq 2$ (табл. 2). Очевидно, что многоэлектронные процессы эффективно осуществляются при меньших параметрах удара, чем процесс одноэлектронного захвата [31]. Этот факт необходимо учитывать при анализе взаимодействия ионов килоэлектронвольтовых энергий с конденсированными средами, в которых столкновения при больших параметрах удара не происходят.

Фрагментация однозарядных ионов Ade^+

В табл. 3 приведены основные ионы-фрагменты, образующиеся в процессе одноэлектронного захвата при взаимодействии ионов He^{2+} с молекулами Ade. Приведенные в таблице фрагменты составляют 89% наблюдаемого спектра. Однозарядные молекулярные ионы Ade^+ образовавшиеся

Таблица 1. Величины длины связи R в молекулах Ade и ионах Ade⁺

Тип связи	$R(\text{Ade}), \text{Å}$				$R(\text{Ade}^+), \text{Å}$			$R(\text{Ade}^+) - R(\text{Ade})$
	Эксперимент [29]	DFT [7]	DFT [29]	CASSCF	DFT [7]	DFT [29]	CASSCF	
N1–C2	1.35	1.355	1.341	1.346 ± 0.005	1.327	1.312	1.310 ± 0.015	–0.036
C2–N3	1.32	1.351	1.333	1.326 ± 0.018	1.400	1.381	1.387 ± 0.028	0.061
N3–C4	1.34	1.350	1.336	1.336 ± 0.016	1.317	1.298	1.286 ± 0.007	–0.049
C4–C5	1.36	1.404	1.395	1.377 ± 0.010	1.433	1.430	1.430 ± 0.006	0.053
C5–C6	1.39	1.411	1.409	1.416 ± 0.005	1.429	1.435	1.448 ± 0.012	0.032
C6–N1	1.35	1.360	1.341	1.333 ± 0.022	1.379	1.355	1.357 ± 0.022	0.024
C6–N10	1.35	1.355	1.350	1.349 ± 0.006	1.328	1.320	1.301 ± 0.002	–0.048
C4–N9	1.36	1.384	1.376	1.377 ± 0.014	1.395	1.386	1.381 ± 0.006	0.004
N9–C8	1.35	1.393	1.379	1.372 ± 0.004	1.364	1.352	1.349 ± 0.008	–0.022
C8–N7	1.31	1.326	1.306	1.299 ± 0.020	1.365	1.343	1.332 ± 0.021	0.033
N7–C5	1.38	1.400	1.384	1.389 ± 0.002	1.356	1.336	1.332 ± 0.006	–0.057

процессе {211}, с высокой вероятностью фрагментации, и ее сечение составляет 65% от полного сечения σ_1^{21} . Тем не менее недиссоциированный молекулярный ион Ade⁺ с массой $m = 135$ а.е.м. является основным по величине в масс-спектре. Пик с массой $m = 136$ а.е.м. обусловлен изотопной составляющей и имеет интенсивность 6.5 отн.ед. (при относительной интенсивности Ade⁺, составляющей 100 отн.ед.), что хорошо согласуется с расчетными данными 7.3 отн.ед. [32].

Как видно из приведенных данных, масс-спектр ионов-фрагментов, образующихся при захвате одного электрона ионами He²⁺, имеет много общего с масс-спектром фрагментов, образующихся при ионизации молекулы аденина электронным ударом [33], что указывает на невысокое возбуждение образующихся в процессе захвата молекулярных ионов. При более высоком возбуждении, которое происходит при захвате ионом Ne⁺ од-

ного из внутренних валентных электронов [21], относительная интенсивность недиссоциированного иона C₅H₅N₅⁺ значительно уменьшается.

Ионы-фрагменты формируют в масс-спектре группы, локализованные около пиков с массами, соответствующими потере молекулярным ионом от одной до четырех групп HCN. Идентификация наблюдаемых пиков была основана на том, что образование фрагментов требует минимального количества разрываемых связей и минимальной перегруппировки атомов между образующимися частицами – ионом и нейтральными фрагментами. В частности, поэтому фрагмент с массой $m = 108$ а.е.м. был идентифицирован, как ион C₄H₄N₄⁺, а не как имеющий такую же массу ион C₂H₂N₅⁺. При идентификации более легких фрагментов учитывались вероятные процессы миграции атомов водорода.

Анализ возможных каналов процессов фрагментации проводился на основании структурной схемы молекулы представленной на рис. 1 и изменения длин связей после ионизации, приведенных в табл. 1. Молекулярный ион C₄H₄N₄⁺, наиболее вероятно, образуется за счет потери молекулярным ионом Ade⁺ группы HCN. Авторы работ [3, 7, 8] на основании расчетов энтальпии реакции делают вывод о том, что наиболее вероятным каналом образования иона C₄H₄N₄⁺ является разрыв связей C2–N3 и N1–C6, которые, как видно из табл. 1, при ионизации молекулы удлиняются. В результате проведенных расчетов путей реакции оказалось, что рассматриваемая реакция может протекать двумя путями, при которых связи C2–N3 и N1–C6 разрываются либо последовательно, либо одновременно. Точки стационарно-

Таблица 2. Относительные величины сечения элементарных процессов {2(2 – s)n}; относительное количество протонов, образующихся в процессе {2(2 – s)n} в зависимости от общего числа зарегистрированных протонов

Процесс	σ , отн.ед.	$N_{s,n}(\text{H}^+)/\Sigma_{s,n}N_{s,n}(\text{H}^+)$, %
$\Sigma_n\{21n\}$	67.8 ± 6.7	20.5 ± 2
{211}	63.9 ± 6.5	15.0 ± 2
{212}	3.6 ± 0.4	4.9 ± 0.7
{213}	0.2 ± 0.1	0.6 ± 0.2
$\Sigma_n\{20n\}$	32.2 ± 3.5	79.5 ± 7.5
{202}	30.7 ± 3.5	73.9 ± 7.5
{203}	1.4 ± 0.3	5.5 ± 1
{204}	0.1 ± 0.05	0.1 ± 0.05

сти вдоль этих путей фрагментации показаны на рис. 2. За начало отсчета энергии взята полная энергия катиона Ade^+ в оптимальной геометрии нейтральной молекулы ($E = -464.395337$ а.е.), что соответствует приближению внезапного изменения зарядового состояния. Начальное состояние на рис. 2 соответствует энергии иона Ade^+ в оптимальной геометрии.

Реакция по последовательному пути начинается с разрыва химической связи C2-N3 и через первую точку переходного состояния (TS1) приводит к промежуточному минимуму (IS1). В промежуточном минимуме (IS1) фрагмент HCN связан с катионом $\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_4^+$ донорно-акцепторной связью N1-C6 с длиной 1.426 \AA . Разрыв этой связи приводит к потере группы HCN через вторую точку переходного состояния (TS2). В случае последовательного разрыва связей активационный барьер определяется энергией второго переходного состояния и равен 2.287 эВ , что в сумме с вертикальным потенциалом ионизации молекулы аденина, полученного при выбранном в данном случае активном пространстве ($\text{IP}_v = 7.97 \text{ эВ}$), дает энергию появления иона $\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_4^+$, равную 10.26 эВ . При одновременном разрыве связей существует только одно переходное состояние (TS1^*) с энергией 3.850 эВ , которое определяет активационный барьер и, следовательно, энергию появления иона $\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_4^+$, равную 11.82 эВ . По обоим путям реакция – эндотермическая с энергетическим эффектом 2.09 эВ .

Вторая возможность отрыва группы HCN из шестичленного цикла молекулы связана с разрывом связей N3-C4 и N1-C2 , которые в процессе ионизации молекулы, в отличие от рассмотренного выше случая, укорачиваются (табл. 1). В данном случае осуществляется только процесс с одновременным разрывом связей (рис. 3). Активационный барьер реакции (5.02 эВ) определяется переходным состоянием TS1 , который с учетом вертикального потенциала ионизации, полученного при выбранном в данном случае активном пространстве ($\text{IP}_v = 7.61 \text{ эВ}$), дает энергию появления иона $\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_4^+$ в 12.63 эВ . Эндотермический эффект реакции составляет 4.03 эВ .

Отрыв группы HCN возможен и при разрыве связей N7-C5 и N9-C8 в пятичленном кольце молекулы. Эти связи, как следует из табл. 1, в процессе ионизации также укорачиваются. Точки стационарности пути фрагментации показаны на рис. 4. Реакция начинается с разрыва химической связи C8-N9 и через первую точку переходного состояния TS1 приводит к промежуточному минимуму IS1 , в котором фрагмент HCN удерживается донорно-акцепторной связью C5-N7 . Отрыв фрагмента HCN осуществляется через второе

Таблица 3. Относительные величины интенсивности* ионов-фрагментов, образующихся в процессе одноэлектронного захвата {211} при столкновении ионов He^{2+} и Ne^+ [20] с молекулами Ade и при ионизации молекул Ade электронами [33]

Ион-фрагмент	m , а.е.м.	$\sigma_1^{21}(\text{He}^{2+})$	$\sigma_1^{10}(\text{Ne}^+)$	$\sigma_{ion}(\text{el})$
H^+	1	12.2	11.1	
C^+	12	5.4	7.6	
CH^+	13	4.0	3.6	
$\text{N}^+, \text{CH}_2^+$	14	1.9	12.3	
CN^+	26	4.9	19.0	
HCN^+	27	11.3	131.1	1.9
CH_2N^+	28	39.4	2050.6	18.5
CH_3N^+	29	10.8	333.0	3.6
C_2N^+	38	6.5	118.4	2.4
C_2HN^+	39	4.5	208.5	2.2
$\text{CN}_2^+, \text{C}_2\text{H}_2\text{N}^+$	40	2.4	249.5	1.6
CH_3N_2^+	43	4.9	302.9	4.4
C_2N_2^+	52	2.9	103.9	0.5
C_2HN_2^+	53	8.6	784.6	7.6
$\text{C}_2\text{H}_2\text{N}_2^+$	54	9.4	649.2	11.2
$\text{C}_2\text{H}_3\text{N}_2^+$	55	2.2	259.3	2.4
$\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_2^+$	56	1.1	44.8	1.5
C_3N_2^+	64	1.4	61.5	0.8
C_3HN_2^+	65	1.3	302.5	1.8
$\text{C}_3\text{H}_2\text{N}_2^+, \text{C}_2\text{N}_3^+$	66	2.9	331.2	6.3
Ade^{2+}	67.5	6.2	123.4	0.0
$\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_3^+$	70	1.3	21.5	3.6
$\text{C}_3\text{H}_2\text{N}_3^+$	80	2.2	311.6	3.3
$\text{C}_3\text{H}_3\text{N}_3^+$	81	4.9	140.1	9.7
$\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_4^+$	108	17.3	34.6	27.0
$\text{C}_4\text{H}_5\text{N}_4^+$	109	6.8	10.3	1.7
$\text{C}_5\text{H}_4\text{N}_5^+$	134	3.0	25.0	3.0
Ade^+	135	100.0	100.0	100.0
Ade^+	136	6.5	7.0	7.6

* Данные нормированы на интенсивность пика с массой 135 а.е.м.

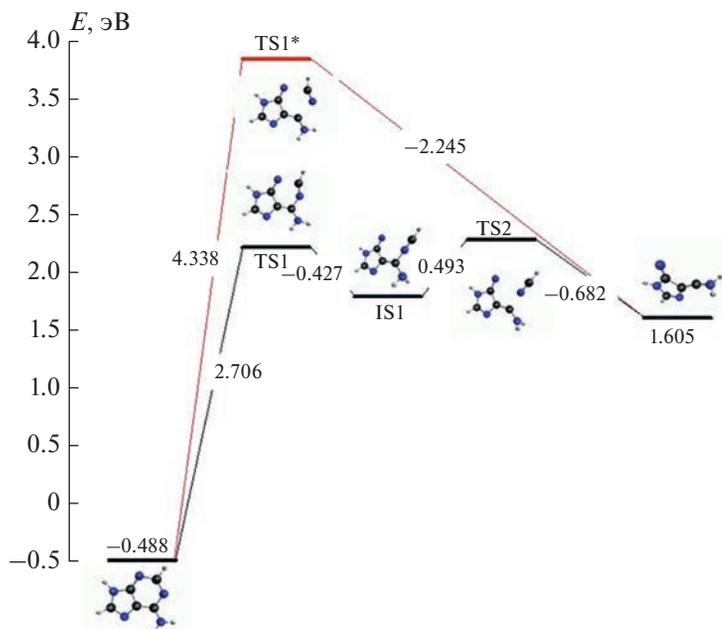


Рис. 2. Точки стационарности вдоль пути фрагментации при разрыве связей C2–N3 и N1–C6 в шестичленном цикле иона Ade⁺. Начало отсчета энергии – полная энергия катиона Ade⁺ в оптимальной геометрии нейтральной молекулы

переходное состояние TS2 и второй промежуточный минимум с энергией 3.52 эВ. Активационный барьер реакции (3.54 эВ) определяется переходным состоянием TS2, который с учетом вертикального потенциала ионизации, полученного при выбранном в данном случае активном про-

странстве ($IP_v = 7.80$ эВ), дает энергию появления иона C₄H₄N₄⁺ в 11.34 эВ. Эндотермический эффект реакции – 3.90 эВ.

Сравнение вычисленных энергий появления иона C₄H₄N₄⁺ с экспериментально полученными при исследовании ионизации аденина ВУФ-излучением (11.56 эВ [3], 12.3 эВ [4]) и электронным ударом (11.7 эВ [8], 11.3 эВ [10]) показывают, что все рассмотренные каналы энергетически возможны. Вероятно, многоступенчатый процесс последовательного разрыва связей C2–N3 и N1–C6 (рис. 2), имеющий минимальную энергию появления, осуществляется вследствие его наибольшей длительности из всех рассмотренных процессов только при минимально необходимой энергии возбуждения молекулярного иона, и поэтому маловероятен.

Образование более легких фрагментов в масс-спектрах авторы работ [3, 4, 8, 10] связывают с последовательной потерей ионом Ade⁺ нескольких нейтральных фрагментов HCN. Мы выполнили расчет пути фрагментации иона C₄H₄N₄⁺ (рис. 5), образовавшегося в результате процесса, представленного на рис. 2, и имеющего минимальный из рассмотренных процессов эндотермический эффект реакции. Процесс фрагментации имеет активационный барьер 3.905 эВ, что с учетом энергии появления иона C₄H₄N₄⁺ в процессе, происходящем при одновременном разрыве связей, дает для иона C₃H₃N₃⁺ энергию появления, рав-

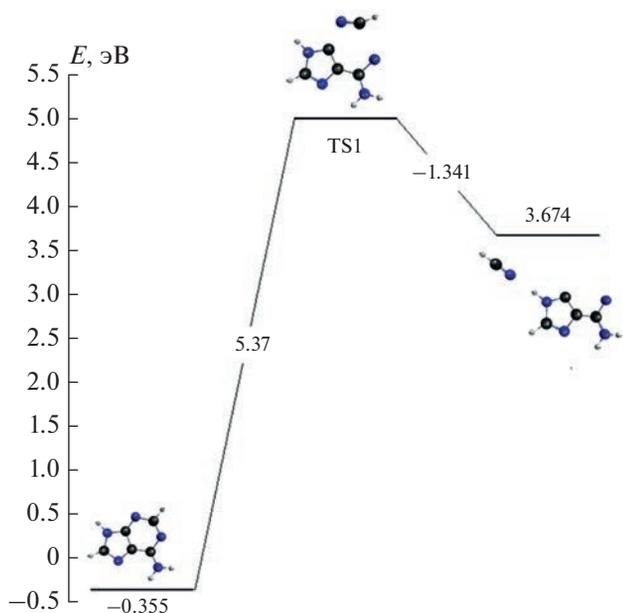


Рис. 3. Точки стационарности вдоль пути фрагментации при разрыве связей N3–C4 и N1–C2 в шестичленном цикле иона Ade⁺.

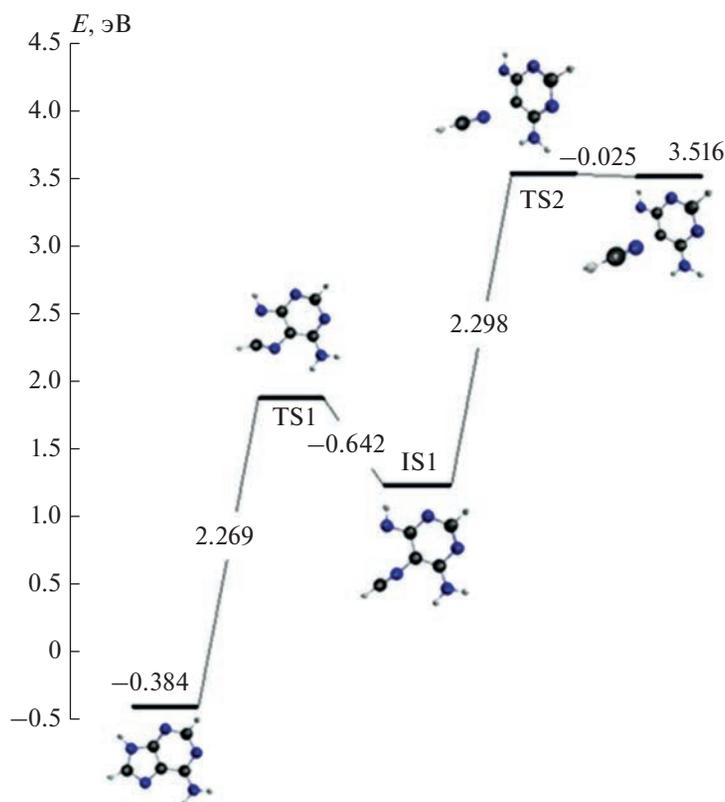


Рис. 4. Точки стационарности вдоль пути фрагментации при разрыве связей N7–C5 и N9–C8 в пятичленном цикле иона Ade^+ .

ную 15.73 эВ. Расчетная величина энергии появления иона $\text{C}_3\text{H}_3\text{N}_3^+$ в результате последовательной потери двух фрагментов HCN существенно превышает экспериментальные данные (12.8 эВ [3], 12.4 эВ [4], 14.1 эВ [8], 13.1 эВ [10]).

Очевидно, что энергия появления ионов, локализованных в диапазоне значений масс 26–29 а.е.м., при последовательной потере трех фрагментов HCN будет еще выше, что не согласуется с экспериментальными данными (для пика с массой 28 а.е.м. – 13.1 эВ [3], 12.9 эВ [4], 13.1 эВ [8], 12.9 эВ [10]). Таким образом, более вероятным представляется осуществление процессов с простым разрывом химических связей в исходном молекулярном ионе.

Результаты расчета пути реакции отрыва фрагмента HCNH^+ с массой 28 а.е.м. вследствие одновременного разрыва химических связей N7–C8 и N9–C4 в пятичленном цикле Ade^+ приведены на рис. 6. Образование заряженного фрагмента HCNH^+ соответствует минимуму с энергией 5.27 эВ. Активационный барьер реакции (5.37 эВ) определяется переходным состоянием TS1, который с учетом вертикального потенциала ионизации, полученного при выбранном в данном случае активном пространстве ($\text{IP}_v = 7.94$ эВ), дает энергию

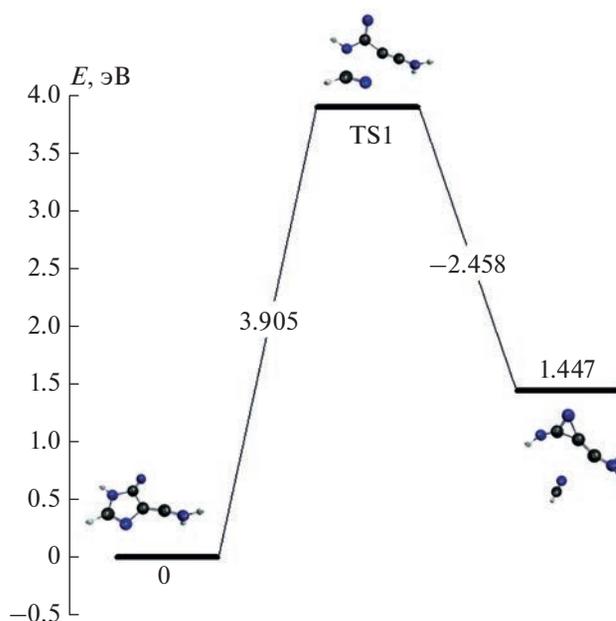


Рис. 5. Точки стационарности вдоль пути фрагментации (процесс представлен на рис. 2) при разрыве связей N9–C8 и N7–C5 в ионе $\text{C}_4\text{N}_4\text{H}_4^+$, образовавшегося после вылета фрагмента HCN из иона Ade^+ вследствие разрыва связей C2–N3 и N1–C6. Начало отсчета энергии – полная энергия катиона $\text{C}_4\text{N}_4\text{H}_4^+$.

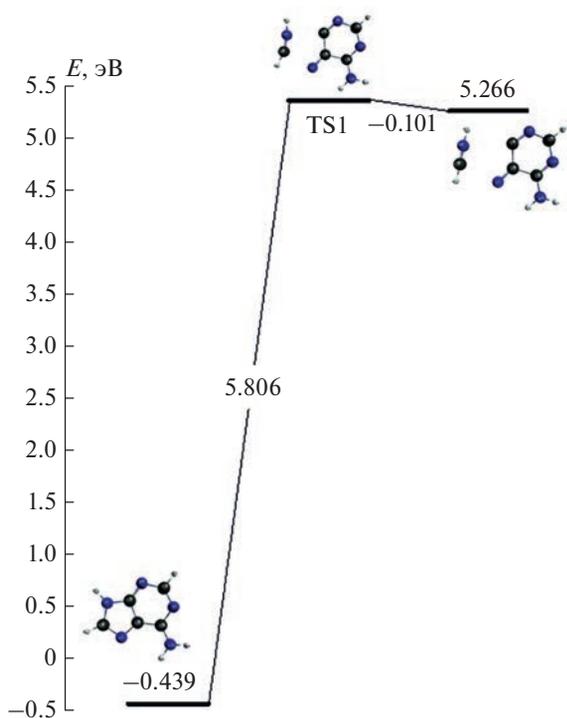


Рис. 6. Точки стационарности вдоль пути фрагментации при разрыве связей N7–C8 и N9–C4 в пятичленном цикле иона Ade^+ .

появления иона HCNH^+ , равную 13.21 эВ. Эндотермический эффект реакции – 5.71 эВ.

Альтернативный процесс, ведущий к образованию пика с массой 28 а.е.м., может быть связан с разрывом связей N1–C6 и C5–N6 в шестичленном цикле иона аденина. Однако расчет показывает, что рассматриваемый процесс не ведет к потере CNH_2 или образованию иона CNH_2^+ , а оказывается многостадийным процессом с последовательным разрывом химических связей (рис. 7). Путь реакции начинается с перегруппировки шестичленного цикла с образованием химической связи между атомами N1–C5. Этот процесс имеет точку переходного состояния TS1 с энергией 3.70 эВ. В первом промежуточном минимуме IS1 фрагмент H_2NC остается связанным с атомами N1 и C5. Разрыв химической связи C5–C6 происходит в точке переходного состояния TS2, что приводит к формированию промежуточной конформации TC1. Образование структуры, соответствующей третьему переходному состоянию TS3, сопровождается переносом протона от атома N10 к атому C6 в фрагменте H_2NC . Потеря фрагмента HCNH^+ происходит в результате разрыва химической связи N1–C6. Активационный барьер реакции (4.59 эВ) определяется переходным состоянием

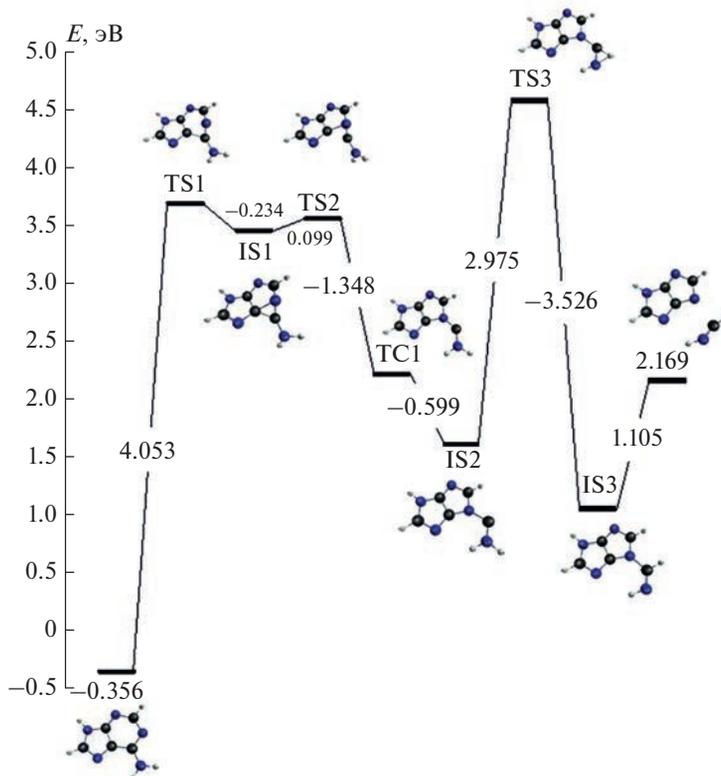


Рис. 7. Точки стационарности вдоль пути фрагментации при разрыве связей N1–C6 и C5–N6 в шестичленном цикле иона Ade^+ .

TS3, который с учетом вертикального потенциала ионизации, полученного при выбранном в данном случае активном пространстве ($IP_V = 7.84$ эВ), дает энергию появления иона $HCNH^+$, равную 12.43 эВ. Эндотермический эффект реакции – 2.53 эВ.

Вероятно, рассмотренный выше многоступенчатый процесс последовательного разрыва связей, имеющий минимальную энергию появления, осуществляется вследствие его длительности только при минимально необходимой энергии возбуждения молекулярного иона, и поэтому маловероятен по сравнению с процессом, представленным на рис. 6.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Измерения относительных сечений процессов изменения зарядового состояния партнеров столкновения показали, что при взаимодействии ионов He^{2+} килоэлектронвольтовых энергий с молекулами аденина процесс захвата одного электрона имеет наибольшее сечение. Выделены вклады процессов захвата с ионизацией в полные сечения процессов захвата электронов. Показано, что образование свободных протонов происходит в многоэлектронных процессах с образованием промежуточных молекулярных ионов Ade^{n+} ($n \geq 2$). Исследование фрагментации молекулярных ионов Ade^+ , образующихся в процессе одноэлектронного захвата показали их высокую устойчивость к фрагментации при захвате одного из валентных электронов, имеющих минимальные энергии связи. В результате квантово-химических расчетов методом самосогласованного поля в полном активном пространстве (CASSCF) путей реакции фрагментации молекулярных ионов Ade^+ были получены энергии появления фрагментов $C_4H_4N_4^+$ и $HCNH^+$, хорошо согласующиеся с измеренными экспериментально. Анализ величины активационных барьеров показал, что рассматриваемый в литературе процесс последовательного отрыва группы CHN , ведущий к образованию ионов $C_kH_kN_k^+$ ($k = 1-3$) энергетически маловероятен.

Авторы благодарят вычислительный центр ФТИ им. А.Ф. Иоффе за предоставленные ресурсы кластера высокопроизводительных вычислений.

Работа выполнена в рамках государственного задания – тема № 0040-2019-0023.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Lin J., Yu C., Peng S. I. Akiyama et al. // J. Amer. Chem. Soc.* 1980. V. 102. P. 4627.

2. *Urano S., Yang X., LeBreton P.R. // J. Mol. Struct.* 1989. V. 214. P. 315.

3. *Jochims H.-W., Schwell M., Baumgärtel H. et al. // Chem. Phys.* 2005. V. 314. № 1–3. P. 263; <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2005.03.008>

4. *Pilling S., Lago A.F., Coutinho L.H. et al. // Rapid Commun. Mass Spectrom.* 2007. V. 21. № 22. P. 3646; <https://doi.org/10.1002/rcm.3259>

5. *Trofimov A.B., Schirmer J., Kobychew V.B. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2006. V. 39. № 2. P. 305; <https://doi.org/10.1088/0953-4075/39/2/007>

6. *Sethi S.K., Gupta S.P., Jenkins E.E.J. et al. // Amer. Chem. Soc.* 1982. V. 104. № 12. P. 3349.

7. *Minaev B.F., Shafranyosh M.I., Svida Yu.Yu. et al. // J. Chem. Phys.* 2014. V. 140. № 17. P. 175101; <https://doi.org/10.1063/1.4871881>

8. *Dawley M.M., Tanze K., Cantrell P. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014. V. 16. № 45. P. 25039; [doi.org/https://doi.org/10.1039/C4CP03452J](https://doi.org/10.1039/C4CP03452J)

9. *Rahman M.A., Krishnakumar E. // J. Chem. Phys.* 2016. V. 144. № 16. P. 161102; <https://doi.org/10.1063/1.4948412>

10. *Van der Burgt P.J.M., Finnegan S., Eden S. // Eur. Phys. J. D.* 2015. V. 69. P. 173; <https://doi.org/10.1140/epjd/e2015-60200-y>

11. *Дьяков Ю.А., Пузанков А.А., Адамсон С.О. и др. // Хим. физика.* 2020. Т. 39. № 10. С. 3; <https://doi.org/10.31857/S0207401X20100040>

12. *Bernard J., Brédy R., Chen L. et al. // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. B.* 2006. V. 245. № 1. P. 103; <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2005.11.086>

13. *Alvarado F., Bari S., Hoekstra R., Schlathölter T. et al. // J. Chem. Phys.* 2007. V. 127. № 3. P. 034301.

14. *Martin S., Brédy R., Allouche A.R. et al. // Phys. Rev. A.* 2008. V. 77. P. 062513; <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.77.062513>

15. *Montagne G., Bernard J., Martin S. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2009. V. 42. № 7. 075204; <https://doi.org/10.1088/0953-4075/42/7/075204>

16. *Tabet J., Eden S., Feil S. et al. // Intern. J. Mass Spectrom.* 2010. V. 292. № 1. P. 53; <https://doi.org/10.1016/j.ijms.2010.03.002>

17. *Афросимов В.В., Басалаев А.А., Морозов Ю.Г. и др. // ЖТФ.* 2012. Т. 82. № 5. С. 16.

18. *De Vries M.S., Hobza P. // Annu. Rev. Phys. Chem.* 2007. V. 58. P. 585; <https://doi.org/10.1146/annurev.physchem.57.032905.104722>

19. *Fuss M., Muñoz A., Oller J.C. et al. // Phys. Rev. A: At. Mol. Opt. Phys.* 2009. V. 80. № 5. 052709; <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.80.052709>

20. *Басалаев А.А., Кузьмичев В.В., Панов М.Н. и др. // ЖТФ.* 2022. Т. 92. № 7. С. 978; <https://doi.org/10.21883/JTF.2022.07.52654.309-21>

21. *Басалаев А.А., Кузьмичев В.В., Панов М.Н. и др. // Письма в ЖТФ.* 2022. Т. 48. № 17. С. 13; <https://doi.org/10.21883/PJTF.2022.17.53280.19238>

22. *Basalaev A.A., Kuz'michev V.V., Panov M.N. et al. // Radiat. Phys. Chem.* 2022. V. 193. № 4. P. 109984; <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2022.109984>

23. *Barca G.M.J., Bertoni C., Carrington L. et al.* // J. Chem. Phys. 2020. V. 152. № 15. Article 154102.
24. *Дьяков Ю.А., Адамсон С.О., Ванг П.К. и др.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 10. С. 22;
<https://doi.org/10.31857/S0207401X21100034>
25. *Дьяков Ю.А., Адамсон С.О., Ванг П.К. и др.* // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 6. С. 85;
<https://doi.org/10.31857/S0207401X22060036>
26. *Храповский Г.М., Аристов И.В., Егорова Д.Л. и др.* // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 9. С. 19;
<https://doi.org/10.31857/S0207401X22070068>
27. *Schmidt M.W., Gordon M.S.* // Annu. Rev. Phys. Chem. 1998. V. 49. P. 233.
28. *Bode V.M., Gordon M.S.* // J. Mol. Graph. Model. 1998. V. 16. № 3. P. 133.
29. *Improta R., Scalmani G., Barone V.* // Intern. J. Mass Spectrom. 2000. V. 201. P. 321.
30. NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database. NIST Standard Reference Database Number 101. 2022;
<https://doi.org/10.18434/T47C7Z>
31. *Басалаев А.А., Панов М.Н.* // ЖТФ. 2019. Т. 89. № 3. С. 342;
<https://doi.org/10.21883/JTF.2019.03.47166.299-18>
32. Mass Spectrum Interpreter Version 2; <https://chemdata.nist.gov/mass-spc/interpreter/>
33. NIST Chemistry WebBook. NIST Standard Reference Database Number 69;
<https://doi.org/10.18434/T4D303>

РЕАКЦИИ ГАЛОГЕНЗАМЕЩЕННЫХ УКСУСНОЙ И ПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТ С АТОМАМИ ФТОРА

© 2023 г. И. И. Морозов^{1*}, Е. С. Васильев¹, Н. И. Бутковская¹, А. Г. Сыромятников^{1, 2}, П. С. Хомякова¹, Н. Д. Волков¹, О. С. Морозова¹, С. В. Савилов^{2, 3}

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

³Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: igormrzu@gmail.com

Поступила в редакцию 11.05.2023;

после доработки 22.05.2023;

принята в печать 20.06.2023

Галогензамещенные кислоты имеют антропогенное и природное происхождение и играют важную роль в атмосферных процессах. Глобальное распространение и высокая стабильность галогензамещенных кислот вызывают беспокойство в связи с тем, что они токсичны, накапливаются в поверхностных водах и представляют угрозу для людей и экосистемы. Знание механизма реакций галогензамещенных кислот в газовой фазе позволяет объяснить и управлять многими важными процессами, протекающими в атмосфере и при горении. В настоящей работе экспериментально исследованы реакции атомарного фтора с монохлоруксусной, дихлоруксусной, трихлоруксусной, трифторуксусной и пентафторпропионовой кислотами при давлении 1 Торр. Эксперименты проводили с помощью проточного реактора, соединенного с масс-спектрометром с модулированным пучком. Методом конкурирующих реакций с привлечением имеющихся литературных данных определены константы скорости указанных реакций при комнатной температуре. Показано, что в этом ряду наиболее быстрой является реакция $F + CH_2ClCOOH$. Кроме того, для реакций $F + CF_3COOH$ и $F + C_2F_5COOH$ получены температурные зависимости констант скорости в диапазонах 258–343 и 262–343 К соответственно.

Ключевые слова: галогензамещенные кислоты, атомарный фтор, масс-спектрометрия, проточный реактор, константа скорости реакции.

DOI: 10.31857/S0207401X23100114, EDN: PHDRSC

1. ВВЕДЕНИЕ

Галогензамещенные уксусные кислоты (ГУК) присутствуют, как правило, в атмосферном воздухе, дождевой воде, системах поверхностных и сточных вод, а также в природных водоемах. Помимо природных источников галогенсодержащих соединений, существуют антропогенные источники, к которым относятся предприятия органического синтеза, гидролизные, целлюлозно-бумажные, коксохимические, лакокрасочные и фармацевтические производства. Кроме того, эти соединения возникают и при хлорировании природных вод.

Окисление галогенсодержащих углеводородов в тропосфере приводит к образованию ряда вторичных загрязняющих веществ, в том числе галогензамещенных кислот. Некоторые продукты атмосферного разложения хлорфторуглеродов, такие как трифторуксусная (ТФУК), трихлоруксусная

(ТХУК), дифторуксусная (ДФУК), дихлоруксусная (ДХУК), монофторуксусная (МФУК) и монохлоруксусная (МХУК) кислоты являются чрезвычайно токсичными веществами. Их образование представляет угрозу для окружающей среды, поскольку генерировать эти кислоты могут все классы заменителей, включая гидрофторуглероды. Формирование вредных веществ из относительно безопасных прекурсоров протекает по достаточно сложной схеме, включающей процессы в газовой и водной фазе, а также гетерогенные процессы с участием аэрозолей [1, 2].

Галогензамещенные уксусные кислоты в основном являются продуктами атмосферного разложения C2-галогенуглеродов. В работах [3, 4] была предложена общая схема превращения галогенсодержащих растворителей, в том числе этана и этилена, в ГУК в атмосфере. Например, полихлорвинил, который является одним из наи-

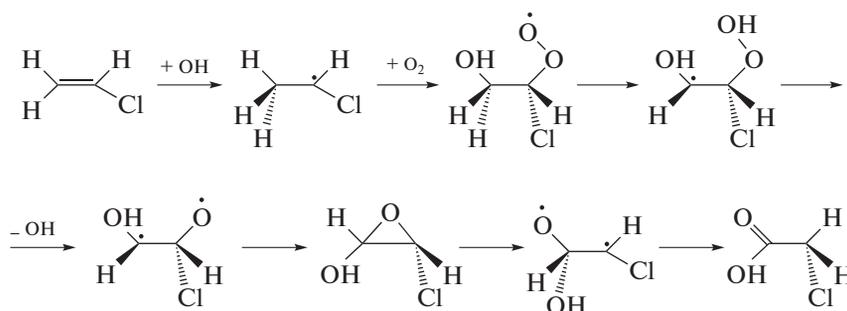


Рис. 1. Схема превращения хлорэтилена в монохлоруксусную кислоту в атмосферных условиях.

более распространенных полимеров, выпускается в больших количествах. В процессе его производства и утилизации небольшая часть хлорэтилена попадает в окружающую среду. Превращение хлорэтилена в МХУК в атмосферных условиях инициируется присоединением гидроксильного радикала к двойной связи $C=C$. Затем радикал $H_2(OH)C-C\dot{S}H$ взаимодействует с кислородом воздуха с образованием пероксирадикала. На следующем этапе радикал OH отщепляется от пероксирадикала после миграции атома H от углерода к концевому кислороду. Конечным продуктом является $CH_2ClCOOH$, который появляется в результате нескольких стадий внутренней перегруппировки. На рис. 1 приведена схема превращения хлорэтилена в МХУК в атмосферных условиях.

Поведение ГУК в окружающей среде изучено достаточно плохо. Механизм их разложения до сих пор не установлен. На эту тему ведутся пока только общие дискуссии. Фотолиз и фотокаталитическая диссоциация таких кислот рассматривались ранее в работе [5], а процессы с участием ГУК в водной среде – в работах [6, 7]. Знание механизма газофазных реакций необходимо для многих практических целей, таких как процессы горения, развитие химических и газодинамических лазеров и т.д.

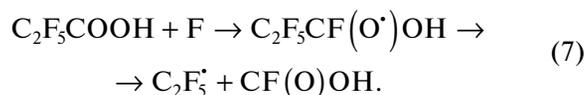
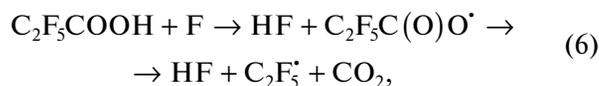
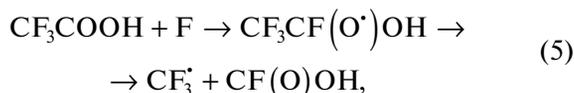
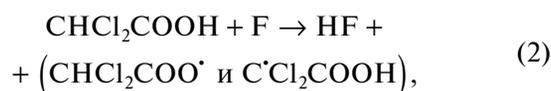
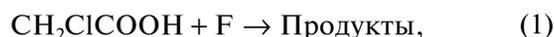
Цели данной работы – установление кинетических параметров реакций атомарного фтора с ГУК и пентафторпропионовой кислотой в газовой фазе и проведение сравнительного анализа скоростей этих реакций. Систематическое исследование реакций атомов фтора с малыми органическими кислотами ранее не проводилось. Поэтому результаты настоящего исследования могут послужить развитию теории элементарных химических реакций. Следует также отметить, что образующиеся в реакциях колебательно-возбужденные молекулы HF являются активной средой для химических лазеров [8].

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Метод конкурирующих реакций

Метод конкурирующих реакций (МКР) основан на том, что одна и та же активная частица (в данном случае – это атом фтора) может одновременно участвовать в нескольких реакциях с образованием различных продуктов. Этот метод позволяет определить отношение констант скоростей исследуемой и референсной (эталонной) реакций.

В настоящей работе МКР использовался для исследования следующих реакций атомарного фтора с ГУК и пентафторпропионовой кислотой:



В качестве конкурирующих реакций выступали реакции атомарного фтора с соответствующими реагентами: $c-C_6H_{12}$ и CH_2FCH_2OH для реакции (1); $c-C_6H_{12}$, CH_2FCH_2OH и CH_3CCl_3 для реакции (2); этанолом, $c-C_6H_{12}$, CH_2FCH_2OH и CH_3CCl_3 для ре-

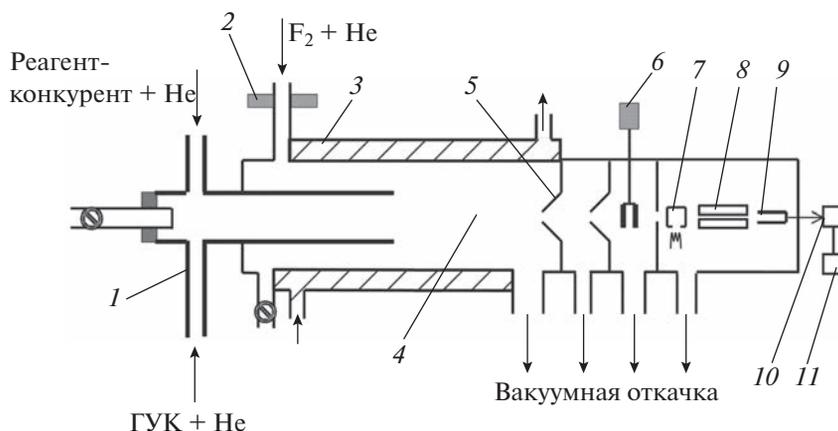


Рис. 2. Схема проточного реактора с масс-спектрометром: 1 – инжектор; 2 – высокочастотный разряд; 3 – охлаждающая жидкость; 4 – зона смешивания реагентов; 5 – напускной конус; 6 – модулятор; 7 – ионный источник; 8 – масс-спектрометр; 9 – электронный умножитель; 10, 11 – система регистрации ионного тока.

акции (3); CHCl_3 , CH_2CCl_3 и HNO_3 для реакций (4) и (5); HNO_3 для реакций (6) и (7).

Экспериментальная установка

Методы проведения кинетических измерений были подробно описаны в наших предыдущих работах [9, 10], поэтому здесь мы ограничимся кратким описанием методик с небольшими изменениями и дополнениями. Эксперименты были выполнены с использованием масс-спектрометра с модулированным молекулярным пучком. В работе использовался проточный реактор, соединенный с масс-спектрометром, схема которого представлена на рис. 2. В качестве газа-носителя использовался гелий. Типичная скорость газового потока в реакторе составляла 1–5 м/с. Общее давление в реакторе поддерживалось на уровне 0.8–1.3 Торр. Атомы фтора получали при пропускании 5%-ной смеси молекулярного фтора в гелий через высокочастотный разряд. Степень диссоциации молекулярного фтора находилась в диапазоне 98–100%.

По тонкому инжектору, расположенному на оси реактора, добавляли одну из ГУК и реагент конкурирующей реакции, сильно разбавленные гелием. Проводили измерение концентраций ГУК и реагента-конкурента в присутствии атомов фтора и в их отсутствие на соответствующих масс-спектральных линиях. Таким образом определяли глубины превращения ГУК и реагента-конкурента. По изменению в реакционной смеси концентрации реагента-конкурента определяли соответствующие изменения глубин превращения. Отношение констант скоростей исследуемой и референсной реакций $(k/k_{ref})_{exp}$ определяли

из тангенса угла наклона прямой линии, полученной в результате линейного регрессионного анализа измерений глубины превращения ГУК по отношению к глубине превращения реагента-конкурента.

Регулировку и стабилизацию потока газа-носителя проводили с помощью расходомера Mass Flow Controller 1100 Series (Type 1160 B). Давление в реакторе измеряли мембранным манометром MKS Baratron (Type 122A). Отбор проб из реакционной зоны в масс-спектрометр осуществлялся в виде модулированного молекулярного пучка. Система формирования молекулярного пучка состояла из сопла и сепаратора. Пучок модулировался с частотой 33 Гц в камере между сепаратором и входной диафрагмой ионного источника масс-спектрометра.

Реактивы

В настоящей работе были использованы следующие реактивы: монохлоруксусная кислота производства компании Sigma-Aldrich (USA) чистотой >97%, дихлоруксусная кислота (Sigma-Aldrich, >98%), трихлоруксусная кислота (Sigma-Aldrich, >97%), гелий (Югра-ПГС, >99.99%), фторэтанол (Sigma-Aldrich, 98.7%), F_2 (ОАО «КЧХК», 98%, 5%-ная концентрация в He), циклогексан (ЗАО Экос-1, ЧДА), 1,1,1-трихлорэтан (Sigma-Aldrich, 99%), трифторуксусная кислота (Fluka, 99.5%), хлороформ (Sigma-Aldrich, 99.9%), пентафторпропионовая кислота (Fluka, 97%). Все реактивы использовали после очистки и обезгаживания.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Определение констант скоростей реакций (1)–(7) по экспериментальным данным проводили по одной методике, поэтому рассмотрим этот алгоритм более подробно на примере реакции атома фтора с МХУК. Для остальных реакций исследования выполнялись аналогичным образом.

Реакция F + CH₂ClCOOH

Планируемые реагенты-конкуренты в МКР должны удовлетворять следующим необходимым условиям:

1) константы скоростей реакций атома фтора с изучаемым реагентом и веществом-конкурентом должны различаться не сильно;

2. масс-спектры исследуемого вещества и конкурента не должны перекрываться.

Этим двум требованиям отвечают 2-фторэтанол и циклогексан.

Для определения масс-спектральных пиков, пригодных для мониторинга концентраций реагентов, были проанализированы спектры МХУК и CH₂FCH₂OH. На рис. 3а представлены масс-спектры в диапазоне масс 30–100 а.е.м., каждый из которых нормирован на 100% по наиболее интенсивному пику спектра с $m/z = 50$ и 31 для МХУК и CH₂FCH₂OH соответственно. Видно, что молекулярный пик каждого реагента (кислоты с $m/z = 94$ и спирта с $m/z = 64$) имеет достаточную интенсивность (высота пика $m/z = 94$ составляет 5.9%, а пика с $m/z = 64$ – 14.2%) и не имеет пересечения с осколочными пиками спектра другого реагента. Аналогично на рис. 3б представлены спектры МХУК и циклогексана в диапазоне масс 30–100 а.е.м. В этом случае молекулярный пик каждого реагента также имеет достаточную интенсивность (интенсивность пика кислоты с $m/z = 94$ – 5.9%, а циклогексана с $m/z = 84$ – 82.1%) и не имеет пересечения с осколочными пиками спектра другого реагента. Это позволило контролировать концентрации реагентов по их молекулярным пикам.

Результат измерений глубины превращения МХУК по отношению к глубинам превращения 2-фторэтанола и циклогексана представлен на рисунках 4а и б соответственно. Данные были получены в работе [11] при изменении в реакционной смеси концентрации вещества-реагента конкурирующей реакции. Отношение констант определялось из тангенса угла наклона прямой

линии, полученной в результате линейной регрессии, при подгонке согласно уравнению

$$\ln([MXUK]_0/[MXUK])/ \ln([REF]_0/[REF]) = (k_1/k_{ref})_{exp}, \quad (8)$$

где [МХУК], [REF] и [МХУК]₀, [REF]₀ – концентрации исследуемого вещества и вещества-реагента конкурирующей реакции соответственно в присутствии атомарного фтора и в его отсутствие, а $(k_1/k_{ref})_{exp}$ – экспериментально определенное отношение констант скоростей реакций МХУК и конкурирующего вещества с атомарным фтором.

В результате проведенных экспериментов для реакции (1) была получена усредненная величина [11]:

$$k_1(293 \text{ K}) = (10 \pm 4) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (9)$$

При этом для вычисления константы скорости k_1 в выражении (9) использовались данные как прямых, так и непрямых измерений констант скоростей конкурирующих реакций: F + CH₂FCH₂OH [11, 14] и F + с-C₆H₁₂ [8, 11, 15].

Реакция F + CHCl₂COOH

Реакция атома фтора с ДХУК подробно рассматривалась в работах [11, 13]. В качестве конкурирующих реагентов использовались с-C₆H₁₂, CH₂FCH₂OH, CH₃CCl₃. В результате экспериментов для реакции (2) при комнатной температуре была получена усредненная величина константы скорости:

$$k_2(293 \text{ K}) = (8 \pm 4) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (10)$$

Для вычисления k_2 в (10) использовались константы скорости конкурирующих реакций: F + CH₂FCH₂OH [11, 14], F + с-C₆H₁₂ [8, 11, 15] и F + CH₃CCl₃ [16].

Реакция F + CCl₃COOH

Реакция атома фтора с ТХУК исследовалась в работе [17]. В качестве конкурирующих реагентов здесь выбирались CH₃CCl₃, C₂H₅OH, CH₂FCH₂OH и с-C₆H₁₂. В итоге усредненная величина константы скорости для реакции (3) при комнатной температуре составила

$$k_3(293 \text{ K}) = (4.3 \pm 0.8) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (11)$$

Константа скорости в выражении (11) вычислялась с использованием доступных литературных данных о константах скорости конкурирую-

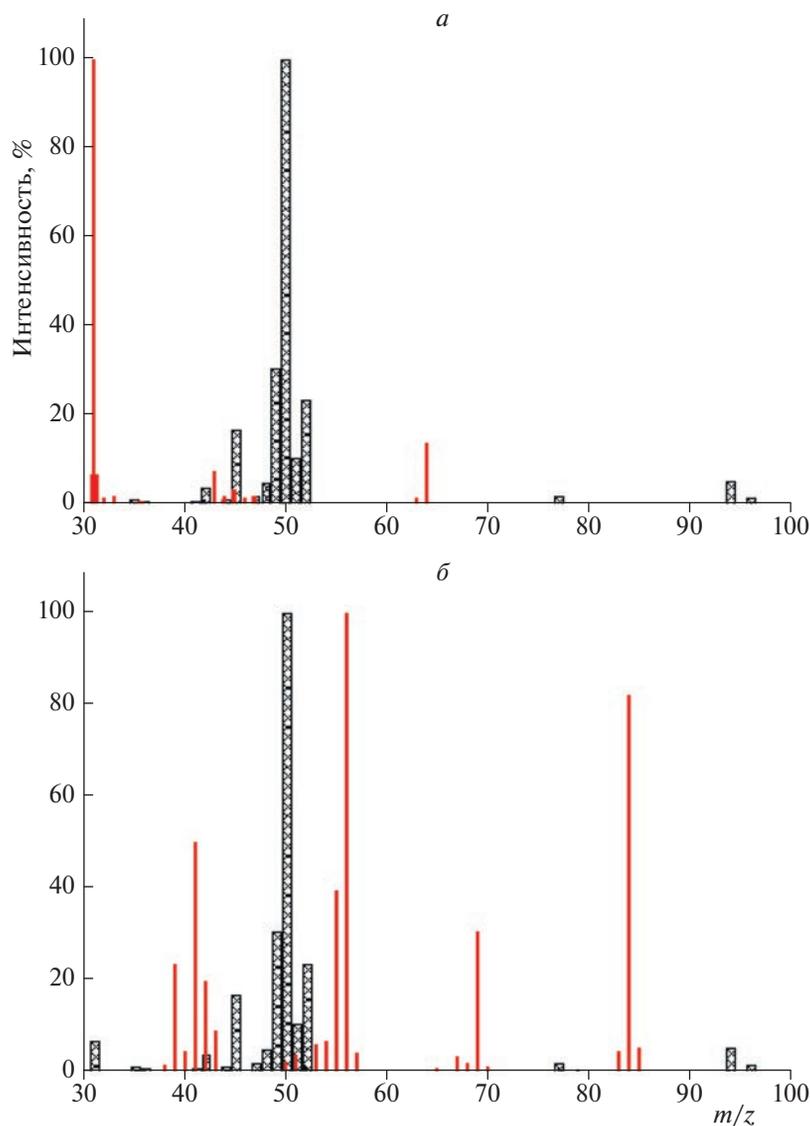


Рис. 3. Масс-спектры в диапазоне масс 30–100 а.е.м., нормированные на 100% по наиболее интенсивному пику спектров: *a* – для МХУК (штрихованные прямоугольники) и $\text{CH}_2\text{FCH}_2\text{OH}$ (сплошные тонкие линии), нормированы по $m/z = 50$ и 31 соответственно; *б* – для МХУК (штрихованные прямоугольники) и циклогексана (сплошные тонкие линии), нормированы соответственно по $m/z = 50$ и 56. Данные по масс-спектрам: МХУК – [11], $\text{CH}_2\text{FCH}_2\text{OH}$ – [12], циклогексан – [13].

щих реакций: $\text{F} + \text{CH}_3\text{CCl}_3$ [16], $\text{F} + \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ [17], $\text{F} + \text{CH}_2\text{FCH}_2\text{OH}$ [11, 14] и $\text{F} + \text{c-C}_6\text{H}_{12}$ [8, 11, 15].

Реакция $\text{F} + \text{CF}_3\text{COOH}$

Реакция атома фтора с ТФУК рассматривалась в работах [9, 17, 18]. В качестве конкурирующих реагентов использовались CHCl_3 , CH_3CCl_3 , HNO_3 , CH_4 и CD_4 . В итоге усредненная величина константы скорости для реакций (4) и (5) при комнатной температуре составила

$$k_{4,5}(293 \text{ K}) = (5 \pm 1) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (12)$$

Для вычисления констант скорости реакций (4) и (5) были заимствованы данные о конкурирующих реакциях: $\text{F} + \text{CHCl}_3$ [19], $\text{F} + \text{CH}_3\text{CCl}_3$ [16], $\text{F} + \text{HNO}_3$ [20], $\text{F} + \text{CH}_4$ и $\text{F} + \text{CD}_4$ [18]. Кроме того, в работе [9] была рассчитана температурная зависимость константы скорости:

$$k_{4,5}(T) = (1.1 \pm 0.4) \cdot 10^{-12} \times \exp[(1000 \pm 100 \text{ K})/T], \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}, \quad (13)$$

которая справедлива в диапазоне температур $T = 258\text{--}343 \text{ K}$.

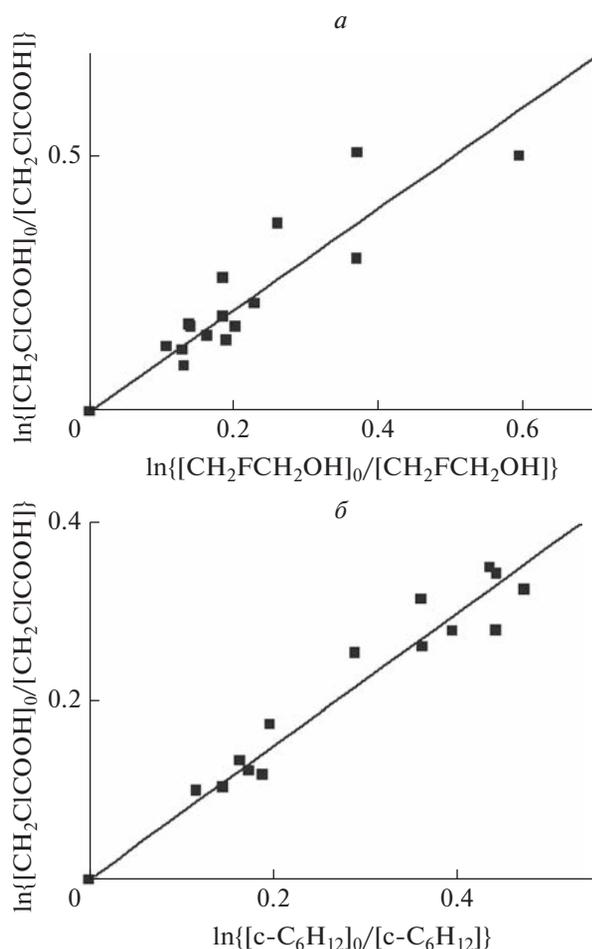


Рис. 4. Зависимость отношения глубин превращения МХУК и конкурирующих реагентов в реакциях с атомом фтора при $T = 293$ К: *a* – 2-фторэтанол, *б* – циклогексан.

Реакция $F + C_2F_5COOH$

Реакция атома фтора с пentaфторпропионо-вой кислотой была подробно исследована в работе [10]. В качестве конкурирующего реагента здесь бралась азотная кислота. В итоге усредненная величина константы скорости для реакций (6) и (7) при комнатной температуре составила

$$k_{6,7}(293 \text{ К}) = (3.1 \pm 0.8) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (14)$$

Для вычисления $k_{6,7}$ использовались также данные работы [20]. Температурная зависимость константы скорости для реакций (6) и (7) имеет вид [10]

$$k_{6,7}(T) = (6 \pm 5) \cdot 10^{-13} \times \exp[(1200 \pm 200)/T], \text{ см}^3 \cdot \text{молекула}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}. \quad (15)$$

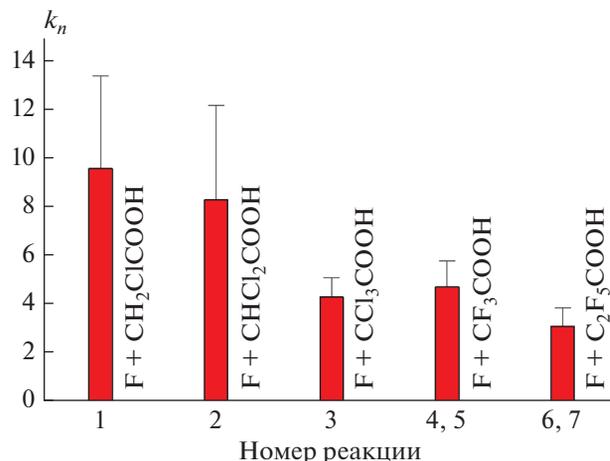


Рис. 5. Значения констант скорости реакций (1)–(7) при температуре $T = 293$ К.

Зависимость (15) рекомендована к использованию в диапазоне температур $T = 262$ – 343 К.

В сводной табл. 1 приведены значения констант скоростей реакций атомов фтора с ГУК и пentaфторпропионо-вой кислотой при комнатной температуре, полученные методом конкурирующих реакций в экспериментах с применением проточного реактора с детектированием реагентов и продуктов реакции молекулярно-пучковым масс-спектрометром.

На рис. 5 представлены значения k_1 , k_2 , k_3 , $k_{4,5}$ и $k_{6,7}$ при комнатной температуре. Видно, что константы k_3 и $k_{4,5}$ мало отличаются друг от друга. Это объясняется тем, что в обоих случаях происходит отрыв водорода только от группы $COOH$, так как энергии связи $COO-H$ для этих молекул достаточно близки: 472 кДж/моль для CF_3COOH и 466 кДж/моль для CCl_3COOH . Молекула C_2F_5COOH , принимающая участие в реакциях (6) и (7), имеет более сложную структуру по сравнению с CF_3COOH , и атака атома водорода затруднена из-за стерического фактора.

Реакция (1) является самой быстрой, поскольку существуют три термодинамически выгодных канала реакции: отрыв двух атомов водорода от группы CH_2 и одного – от группы $COOH$. Энергия связи $C-H$ в группе CH_2Cl составляет 397 кДж/моль, а для связи $COO-H$ – 463 кДж/моль. По сравнению с (1) реакция (2) является более медленной, так как в ней могут участвовать только два атома водорода. При этом энергия связи $C-H$ составляет 379 кДж/моль, а в группе $COO-H$ – 466 кДж/моль.

Таблица 1. Константы скоростей реакций атомов фтора с галогензамещенными уксусной и пропионовой кислотами при комнатной температуре ($T = 293$ К), полученные в экспериментах с рядом конкурирующих реакций

Реагент	Реагент конкурирующей реакции	k/k_{ref}	k , 10^{-11} см ³ · молекула ⁻¹ · с ⁻¹
CH ₂ ClCOOH	CH ₂ FCH ₂ OH	1.0 ± 0.1	11 ± 5 [11]
	c-C ₆ H ₁₂	0.75 ± 0.04	10 ± 3 [11] 8 ± 4 [11]
	10 ± 4 [11]		
CHCl ₂ COOH	CH ₂ FCH ₂ OH	0.7 ± 0.1	8 ± 4 [11]
	c-C ₆ H ₁₂	0.6 ± 0.1	8 ± 3 [11, 13] 6 ± 3 [11, 13]
	CH ₃ CCl ₃	12 ± 2	8 ± 2 [11] 8 ± 4 [11]
CCl ₃ COOH	CH ₃ CCl ₃	7 ± 1	5 ± 1 [17]
	C ₂ H ₅ OH	0.24 ± 0.02	4 ± 2 [17]
	CH ₂ FCH ₂ OH	0.34 ± 0.04	5 ± 2 [17]
	c-C ₆ H ₁₂	0.28 ± 0.02	4 ± 1 [17] 5 ± 3 [17]
	4.3 ± 0.8 [17]		
CF ₃ COOH	CHCl ₃	14 ± 2	3.9 ± 0.8 [17]
	CH ₃ CCl ₃	8.4 ± 0.6	6 ± 2 [17]
	HNO ₃	1.6 ± 0.2	3.7 ± 0.9 [17]
	CH ₄ , CD ₄		5.6 ± 0.4 [18] 5 ± 1 [17]
	5 ± 1 [17]		
C ₂ F ₅ COOH	HNO ₃	1.3 ± 0.1	3.1 ± 0.8 [10, 17]

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Настоящее исследование является продолжением цикла работ [6, 7, 9–11, 13, 17, 21, 22] по применению масс-спектрометрии к исследованию атмосферных процессов. В данной работе экспериментально исследованы реакции атомарного фтора с монохлоруксусной, дихлоруксусной, трихлоруксусной, трифторуксусной и пентафторпропионовой кислотами при давлении 1 Торр. Эксперименты проводили с помощью проточного реактора, соединенного с масс-спектрометром с модулированным пучком. Методом конкурирующих реакций с привлечением имеющихся литературных данных определены константы скоростей указанных реакций при комнатной температуре. Показано, что в этом ряду наиболее быстрой является реак-

ция F + CH₂ClCOOH. Кроме того, для реакций F + CF₃COOH и F + C₂F₅COOH получены температурные зависимости констант скоростей в диапазонах 258–343 и 262–343 К соответственно.

В 2023 году исполняется 100 лет со дня рождения выдающегося ученого академика В.И. Гольданского. Ряд работ [7, 11, 21, 22] возник в результате обсуждения с Виталием Иосифовичем вопросов взаимосвязи структуры и реакционной способности молекул, близких по строению. Гольданского интересовали проблемы сохранения и охраны среды нашего обитания, включая механизмы природной трансформации относительно “безопасных” веществ в разного рода токсиканты. Авторы работы с благодарностью вспоминают работу с Виталием Иосифовичем.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 122040500060—4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Asplund G., Grimvall A., Jonsson S.* // *Chemosphere*. 1994. V. 28. № 8. P. 1467; [https://doi.org/10.1016/0045-6535\(94\)90241-0](https://doi.org/10.1016/0045-6535(94)90241-0)
2. *Hoekstra E.J.* // *Ibid.* 2003. V. 52. № 2. P. 355; [https://doi.org/10.1016/S0045-6535\(03\)00213-3](https://doi.org/10.1016/S0045-6535(03)00213-3)
3. *Sidebottom H., Franklin J.* // *Pure Appl. Chem.* 1996. V. 68. № 9. P. 1757; <https://doi.org/10.1351/pac199668091757>
4. *Folberth G., Pfister G., Baumgartner D. et al.* // *Environ. Pollut.* 2003. V. 124. № 3. P. 389; [https://doi.org/10.1016/S0269-7491\(03\)00048-4](https://doi.org/10.1016/S0269-7491(03)00048-4)
5. *Lifongo L.L., Bowden D.J., Brimblecombe P.* // *Intern. J. Phys. Sci.* 2010. V. 5. № 6. P. 738.
6. *Karpov G.V., Vasiliev E.S., Volkov N.D. et al.* // *Chem. Phys. Lett.* 2020. V. 760. 138001; <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2020.138001>
7. *Васильев Е.С., Карпов Г.В., Волков Н.Д. и др.* // *Хим. физика*. 2021. Т. 40. № 3. С. 17; <https://doi.org/10.31857/S0207401X20120171>
8. *Pearson R., Cowles J., Hermann G. et al.* // *IEEE J. Quant. Electr.* 1973. V. 9. № 9. P. 879; <https://doi.org/10.1109/JQE.1973.1077761>
9. *Vasiliev E.S., Knyazev V.D., Savelieva E.S. et al.* // *Chem. Phys. Lett.* 2011. V. 512. № 4–6. P. 172; <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2011.07.023>
10. *Vasiliev E.S., Knyazev V.D., Karpov G.V. et al.* // *J. Phys. Chem. A*. 2014. V. 118. № 23. P. 4013; <https://doi.org/10.1021/jp5029382>
11. *Васильев Е.С., Карпов Г.В., Шартава Д.К. и др.* // *Хим. физика*. 2022. Т. 41. № 5. С. 10; <https://doi.org/10.31857/S0207401X22050119>
12. NIST Standard Reference Database. Number 69 / Eds. Linstrom P.J., Mallard W.G. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology, 2018.
13. *Васильев Е.С., Сыромятников А.Г., Шартава Д.К. и др.* // *Хим. безопасность*. 2018. Т. 2. № 1. С. 206; <https://doi.org/10.25514/CHS.2018.1.12894>
14. *Васильев Е.С., Морозов И.И., Хак В. и др.* // *Кинетика и катализ*. 2006. Т. 47. № 6. С. 859.
15. *Heinemann-Fiedler P., Hoyer mann K., Rohde G.* // *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 1990. V. 94. № 11. P. 1400; <https://doi.org/10.1002/bbpc.199000042>
16. *Platz J., Nielsen O.J., Sehested J. et al.* // *J. Phys. Chem.* 1995. V. 99. № 17. P. 6570; <https://doi.org/10.1021/j100017a044>
17. *Vasiliev E.S., Morozov I.I., Karpov G.V.* // *Intern. J. Chem. Kinet.* 2019. V. 51. № 12. P. 909; <https://doi.org/10.1002/kin.21319>
18. *Wallington T.J., Hurley M.D.* // *Ibid.* 1995. V. 27. № 2. P. 189; <https://doi.org/10.1002/kin.550270209>
19. *Catoire V., Lesclaux R., Schneider W.F. et al.* // *J. Phys. Chem.* 1996. V. 100. № 34. P. 14356; <https://doi.org/10.1021/jp960572z>
20. *Wine P.H., Wells J.R., Nicovich J.M.* // *Ibid.* 1988. V. 92. № 8. P. 2223; <https://doi.org/10.1021/j100319a028>
21. *Морозов И.И., Васильев Е.С., Волков Н.Д. и др.* // *Хим. физика*. 2022. Т. 41. № 10. С. 16; <https://doi.org/10.31857/S0207401X22100089>
22. *Васильев Е.С., Волков Н.Д., Карпов Г.В. и др.* // *Хим. физика*. 2021. Т. 40. № 10. С. 30; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21100125>

УДК 541.124

ИЗЛУЧЕНИЕ УДАРНО-НАГРЕТОГО ВОЗДУХА В ВАКУУМНО-УЛЬТРАФИОЛЕТОВОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

© 2023 г. Н. Г. Быкова¹, И. Е. Забелинский¹, П. В. Козлов¹, Г. Я. Герасимов¹, В. Ю. Левашов^{1*}

¹Институт механики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*E-mail: vyl69@mail.ru; levashovy@imec.msu.ru

Поступила в редакцию 21.03.2023;

после доработки 14.04.2023;

принята в печать 20.04.2023

Представлены результаты измерения интегральных и временных спектральных характеристик ударно-нагретого воздуха. Эксперименты проведены на модифицированной двухсекционной ударной трубе STS-M Института механики МГУ в интервале скоростей ударной волны от 7.8 до 10.7 км/с при начальных давлениях в камере низкого давления 0.125 и 0.25 Торр. Исследован диапазон волн излучения 115–195 нм, соответствующий вакуумно-ультрафиолетовой области спектра, в которой основной вклад в излучение дают атомарные линии азота и кислорода. Проведен анализ полученных спектрограмм излучения. Данные измерений сравниваются с имеющимися экспериментальными данными других авторов.

Ключевые слова: ударные волны, излучение, воздух, ударная труба, вакуумный ультрафиолет, атомарные линии излучения.

DOI: 10.31857/S0207401X23100047, EDN: ROLBUM

ВВЕДЕНИЕ

Создание надежных систем теплозащиты спускаемых космических аппаратов тесно связано с усовершенствованием методов расчета процессов теплопереноса к поверхности аппарата [1]. При этом следует учитывать, что в некоторых точках сверхорбитальной траектории спуска аппарата в атмосфере Земли радиационный тепловой поток становится сравнимым с конвективным, что требует привлечения дополнительной информации по радиационным характеристикам ударно-нагретого воздуха [2]. Важную роль при их определении играет спектральный диапазон вакуумного ультрафиолета (VUV). С одной стороны, излучение в этом диапазоне составляет значительную часть общего радиационного теплового потока к поверхности спускаемого аппарата [3]. С другой стороны, VUV-диапазон вносит наибольшую неопределенность в оценку радиационного теплопереноса, что объясняется в основном недостатком экспериментальной информации в данной спектральной области [4]. Одной из причин отсутствия достаточного количества экспериментальных данных является сложность измерения VUV-излучения, связанная с необходимостью удаления молекулярного кислорода и водяного пара из оптического пути при регистрации излучения в рассматриваемом диапазоне [5].

Экспериментальное исследование радиационных характеристик ударно-нагретых газов проводится в основном на ударных трубах [6]. Немногочисленные данные по излучению высокотемпературного воздуха в VUV-диапазоне спектра при начальном давлении 0.2 Торр и скоростях ударной волны до 12 км/с получены в электроразрядной ударной установке EAST (Electric Arc Shock Tube), эксплуатируемой в Исследовательском центре NASA Ames [7, 8], а также в поршневом ударном туннеле X2 Университета Квинсленда (Австралия) [9]. Ударная труба STS (Standard Shock Tube) Института механики МГУ, работающая на детонационном горении, имеет более скромные возможности, чем электроразрядные и поршневые установки: экспериментальные данные по измерению интенсивности VUV-излучения ударно-нагретого воздуха получены при начальном давлении 0.25 Торр и скоростях ударной волны до 8.4 км/с [10].

Модернизация ударной трубы STS позволила повысить энергетическую эффективность установки за счет организации более оптимального сгорания гремучей смеси в камере высокого давления [11]. В настоящей работе, являющейся продолжением [10], представлены результаты измерения интегральных и временных характеристик излучения ударно нагретого воздуха в модернизи-

рованной ударной трубе STS-M в VUV-диапазоне спектра при скоростях ударной волны до 10.7 км/с.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Экспериментальное исследование излучательных характеристик ударно-нагретого воздуха в VUV-диапазоне спектра проводилось в модифицированной двухсекционной ударной трубе STS-M Института механики МГУ, которая имеет цилиндрическую форму с внутренним диаметром 50 мм. Инициирование ударной волны осуществляется за счет детонационного сжигания в камере высокого давления стехиометрической смеси кислорода с водородом, разбавленной гелием. Вдоль секций ударной трубы расположены пьезоэлектрические датчики для осуществления контроля за давлением газа и скоростью ударной волны. Принципиальная схема экспериментальной установки и более подробное ее описание приведены в работе [10].

Для повышения энергетической эффективности исходной ударной трубы STS и увеличения скорости ударной волны, распространяющейся по камере низкого давления, была проведена модернизация STS, которая заключалась во включении в конструкцию трубы дополнительного элемента – форкамеры, подробное описание которой приведено в работе [12]. Форкамера отделяет торцевую стенку ударной трубы, на которой расположено поджигающее устройство, от основного объема камеры высокого давления перфорированным диском, имеющим 19 микроскопических отверстий. Наличие форкамеры обеспечивает быстрое формирование интенсивной ударной волны с более высокими параметрами газа (температура и давление) за волной. Это, в свою очередь, ведет к более высокой скорости волны горения. Поэтому к моменту подхода ударной волны к диафрагме, разделяющей камеру высокого и низкого давления, сгорает больший объем горючей смеси. В итоге к моменту открытия диафрагмы выделяется большее количество энергии сжигания газа, что ведет к формированию более интенсивной ударной волны в камере низкого давления.

Система регистрации излучения ударной трубы STS-M позволяет измерять радиационные характеристики ударно-нагретого воздуха, проходящего мимо измерительного сечения трубы, в VUV-диапазоне длин волн. Так как образующийся в воздухе под действием излучения озон является мощным поглотителем VUV-излучения, весь оптический тракт измерительной системы должен быть предварительно полностью откачан. Это является причиной ограниченности имеющихся экспериментальных данных по излучению воздуха в VUV-области спектра [9]. Регистрация излучения в ударной трубе STS-M проводится либо ICCD-камерой LEGA-VUV для записи спек-

трального распределения излучения (панорамных спектров), либо фотоэлектронным умножителем Hamamatsu R6836 (Japan) для записи временной эволюции излучения в узких спектральных диапазонах, специально выделенных с помощью вакуумного монохроматора VM-1. Для получения экспериментальной информации по интенсивности излучения в абсолютных единицах проводится предварительная калибровка оптической системы, подробно описанная в работе [13].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Интегральные и временные характеристики излучения ударно-нагретого воздуха измерены в интервале значений скоростей ударной волны V_{SW} от 7.8 до 10.7 км/с при начальных давлениях p_0 в камере низкого давления 0.125 и 0.25 Торр. Измерения проводились в спектральной области $\lambda = 115\text{--}195$ нм, в которой основной вклад в излучение дают атомарные линии азота и кислорода. Полученные спектрограммы излучения позволяют, с одной стороны, выявить основные закономерности рассматриваемого процесса в данной спектральной области, а с другой – служат источником для тестирования расчетных моделей процессов теплопереноса к поверхности спускаемого космического аппарата.

Интегральная спектрограмма излучения (панорамный спектр) ударно-нагретого воздуха в области вакуумного ультрафиолета при начальном давлении $p_0 = 0.125$ Торр и скорости ударной волны $V_{SW} = 10$ км/с приведена на рис. 1. Видно, что значительную интенсивность на спектрограмме имеют линии атома азота на длинах волн $\lambda = 120.0, 141.2, 149.3$ и 174.5 нм, а также резонансная линия атома кислорода на длине волны $\lambda = 130.2$ нм и три линии атома углерода на длинах волн $\lambda = 156.1, 165.8$ и 195.1 нм [14, 15]. Фоновое излучение, которое включает в себя тормозное и фоторекомбинационное излучение электронов низкотемпературной плазмы [16], в рассматриваемом случае не играет заметной роли. Наличие в спектре воздушной смеси линий атома углерода может быть объяснено присутствием в воздухе углеродсодержащих примесей (CO_2 и углеводороды).

Триплет атома азота с максимумом интенсивности на длине волны $\lambda = 120.0$ нм вносит наиболее заметный вклад в общую спектральную плотность ударно нагретого воздуха в VUV-диапазоне, как это видно из рис. 1. Триплет описывает переход с уровня $2s^2 2p^2(^3P) 3s^4P$ на уровень $2s^2 2p^3 4S^0$ и состоит из трех полос на длинах волн $\lambda = 119.96, 120.02$ и 120.07 нм [17]. На рис. 2 показана часть панорамного спектра в спектральном диапазоне 115–125 нм, включающем рассматриваемый триплет и соседние полосы. Измерения проведены при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр и различ-

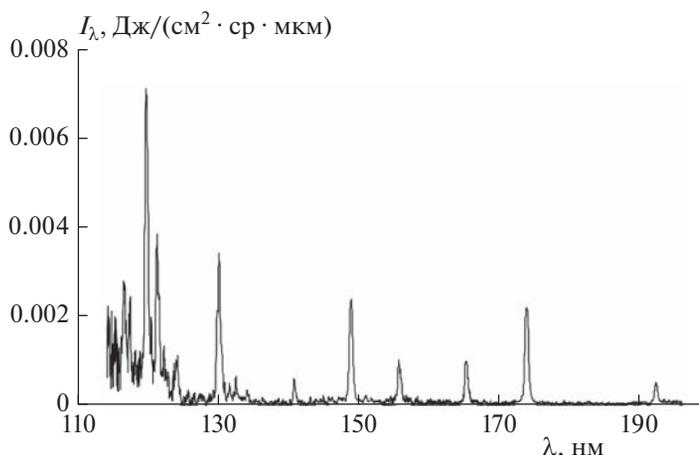


Рис. 1. Спектральная плотность излучения I_λ ударно-нагретого воздуха в VUV-диапазоне при начальном давлении $p_0 = 0.125$ Торр и скорости ударной волны $V_{SW} = 10.0$ км/с.

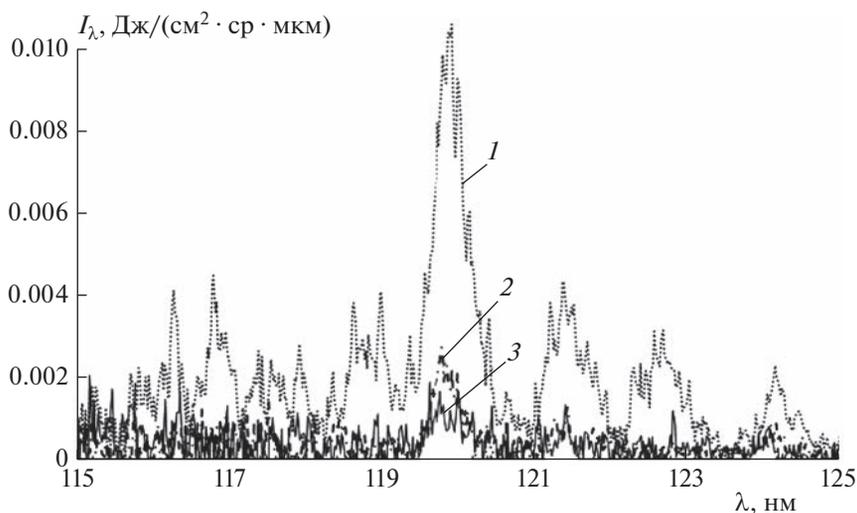


Рис. 2. Спектр излучения воздуха в диапазоне $\lambda = 115$ – 125 нм при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр и следующих значениях скорости ударной волны: $V_{SW} = 9.84$ (1), 8.77 (2) и 7.81 км/с (3).

ных значениях скорости ударной волны. Видно, что при увеличении скорости V_{SW} от 8.77 до 9.84 км/с интенсивность излучения атомов азота на рассматриваемой длине волны резко растет. Это связано в первую очередь с увеличением интенсивности ударной волны при росте ее скорости и, соответственно, с ростом температуры газа за ударной волной. Более высокая температура газа, в свою очередь, увеличивает степень диссоциации молекул азота, а также повышает заселенность возбужденных уровней образующихся атомов.

Анализ спектрограммы, приведенной на рис. 2, показывает, что в данном спектральном диапазоне локализуется также серия мультиплетов атома азота с максимумами интенсивности на длинах волн $\lambda = 116.8$, 117.7 , 122.5 и 124.3 нм [18], слабая ли-

ния атома кислорода на длине волны $\lambda = 115.2$ нм, резонансная линия водорода L_α из серии Лаймана на длине волны $\lambda = 121.6$ нм [19] и серия мультиплетов атома углерода с максимумами интенсивности на длинах волн $\lambda = 115.8$, 118.9 и 119.3 нм. Следует также отметить, что фоновое излучение при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр играет более заметную роль, чем при $p_0 = 0.125$ Торр, что видно из сравнения спектрограмм, приведенных на рис. 1 и 2.

На рис. 3 показана часть панорамного спектра в спектральном диапазоне 125–135 нм, который включает триплет атома кислорода на длине волны $\lambda = 130$ нм. Триплет описывает переход с уровня $2s^2 2p^3(^4S^0) 3s^3 S^0$ на уровень $2s^2 2p^4^3P$ и состоит из

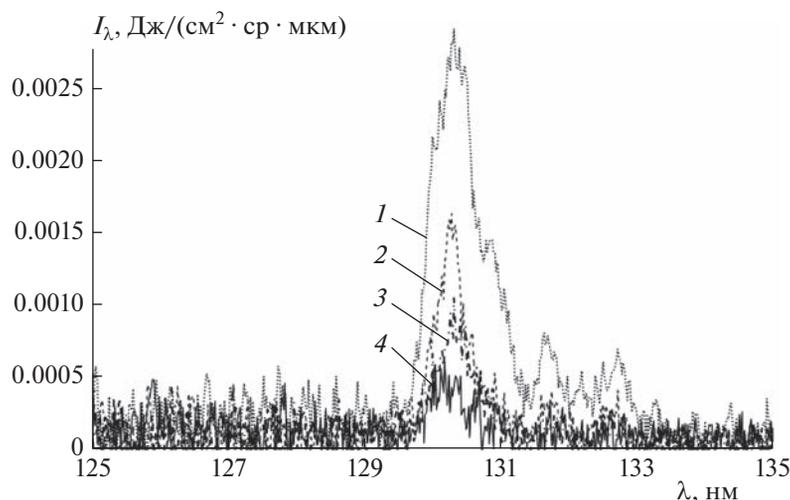


Рис. 3. Спектр излучения воздуха в диапазоне $\lambda = 125\text{--}135$ нм при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр и следующих значениях скорости ударной волны: $V_{SW} = 9.84$ (1), 8.77 (2), 8.73 (3) и 7.81 км/с (4).

трех полос на длинах волн $\lambda = 130.22, 130.49$ и 130.60 нм [20]. Измерения проведены при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр и различных значениях скорости ударной волны. Видно, что увеличение скорости ударной волны ведет к росту интенсивности излучения атомов кислорода. Но этот рост не является столь резким, как в случае излучения атомов азота на длине волны $\lambda = 120.0$ нм, что можно объяснить меньшим значением энергии диссоциации молекул кислорода и, соответственно, большей концентрацией излучающих атомов кислорода при более низких температурах воздуха за фронтом ударной волны. Максимум интенсивности триплета в рассматриваемом случае имеет примерно то же значение, что и при начальном давлении $p_0 = 0.125$ Торр, что видно из сравнения рис. 1 и 3. На спектрограмме идентифицированы также мультиплеты атома азота на длинах волн $\lambda = 131.9$ и 132.7 нм. Фоновое излучение в рассматриваемом спектральном диапазоне, как и в диапазоне $115\text{--}125$ нм, имеет ярко выраженный характер.

Спектрограмма излучения ударно-нагретого воздуха в диапазоне длин волн $145\text{--}155$ нм при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр и различных скоростях ударной волны приведена на рис. 4. Спектрограмма содержит изолированный триплет атома азота, описывающий переход с уровня $2s^2 2p^2(^3P) 3s^2 P$ на уровень $2s^2 2p^3(^2D^0)$ и состоящий из трех полос на длинах волн $\lambda = 149.26, 149.28$ и 149.47 нм [17]. Здесь также наблюдается увеличение интенсивности излучения с ростом скорости ударной волны, причем это увеличение при увеличении V_{SW} с 8.58 км/с до скорости 9.48 км/с не является столь значительным, как для триплета атома с максимумом интенсивности на длине

волны $\lambda = 120.0$ нм, который изображен на рис. 2. Следует также отметить, что максимум интенсивности триплета в рассматриваемом случае немного ниже, чем при начальном давлении $p_0 = 0.125$ Торр, что видно из сравнения рис. 1 и 4.

На рис. 5 показана часть панорамного спектра ударно-нагретого воздуха, измеренная в диапазоне длин волн излучения $170\text{--}180$ нм при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр и различных скоростях ударной волны. Данная спектрограмма содержит изолированный дублет атома азота, соответствующий переходу атома с уровня $2s^2 2p^2(^3P) 3s^2 P$ на уровень $2s^2 2p^3(^2P^0)$ и состоящий из двух полос на длинах волн $\lambda = 174.27$ и 174.53 нм [15]. Как и в случае триплета атома азота с $\lambda = 120.0$ нм, изображенного на рис. 2, здесь также наблюдается резкий рост интенсивности излучения при увеличении V_{SW} от 8.89 до 9.90 км/с. Максимальное значение интенсивности излучения при данном начальном давлении несколько выше соответствующего значения, полученного при $p_0 = 0.125$ Торр и показанного на рис. 1. Просматривается зависимость фонового излучения от скорости ударной волны.

Приведенные выше интегральные характеристики излучения ударно-нагретого воздуха дают общую информацию о характере спектра, а также позволяют определить области длин волн, наиболее интересные для дальнейших исследований. Временные спектрограммы излучения, описывающие изменение мощности излучения J_λ атомов и молекул на определенных длинах волн в зависимости от времени t протекания процесса, являются удобным инструментом для тестирования радиационно-столкновительных моделей, позволяющих оценить излучение ударно-нагретого

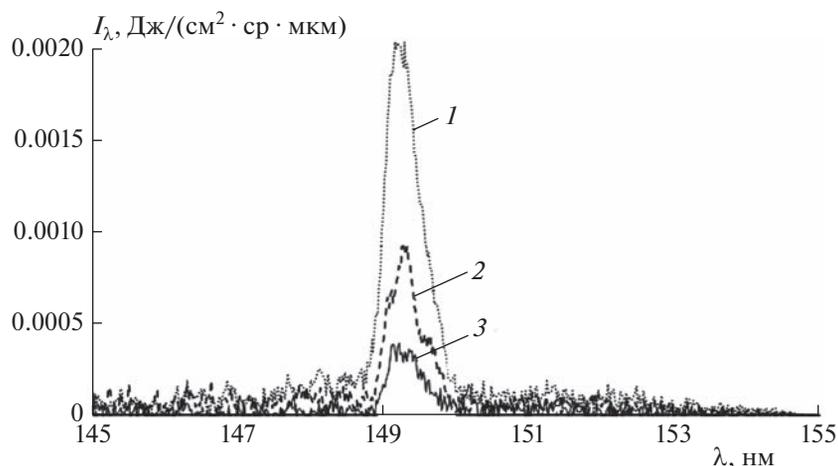


Рис. 4. Спектр излучения воздуха в диапазоне $\lambda = 145\text{--}155$ нм при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр и следующих значениях скорости ударной волны: $V_{SW} = 9.48$ (1), 8.58 (2) и 7.90 км/с (3).

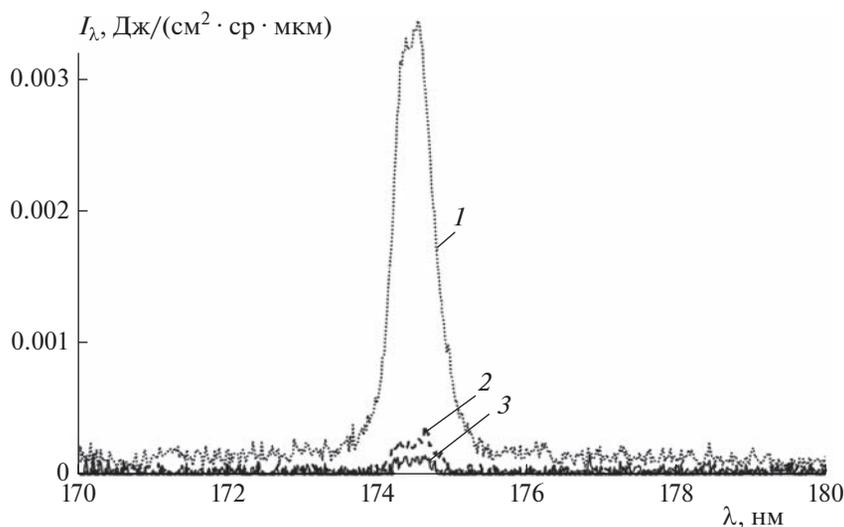


Рис. 5. Спектр излучения воздуха в диапазоне $\lambda = 170\text{--}180$ нм при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр и следующих значениях скорости ударной волны: $V_{SW} = 9.90$ (1), 8.89 (2) и 6.54 км/с (3).

воздуха вблизи поверхности спускаемого космического аппарата [21]. Временные спектрограммы излучения позволяют также определить эффективное время излучения Δt на определенной длине волны, которое служит критерием для пересчета объемной плотности энергии излучения I_λ на объемную мощность излучения B_λ , обычно измеряемую в Вт/(см³ · мкм · ср) [22].

На рис. 6 приведены временные зависимости мощности излучения J_λ атомов азота на длине волны $\lambda = 120$ нм, измеренные при $p_0 = 0.25$ Торр и разных скоростях ударной волны. Видно, что на начальной стадии процесса происходит резкий “всплеск” величины J_λ , связанный с неравномерностью протекания процесса. Длительность нерав-

новесной зоны составляет величину порядка 1 мкс. Максимум интенсивности в неравновесной зоне растет с увеличением V_{SW} . При $t > 1$ мкс процесс переходит в равновесную стадию, длительность которой равна примерно 5 мкс. Аналогичное поведение имеют временные спектрограммы излучения атомов кислорода на длине волны $\lambda = 130$ нм, показанные на рис. 7. Так как здесь интервал изменения величины V_{SW} шире, зависимость J_λ от V_{SW} более ярко выражена.

Как показывает проведенный выше анализ панорамных спектров, спектральная плотность излучения I_λ ударно-нагретого воздуха на различных длинах волн практически не зависит от начального давления p_0 при фиксированном значении скоро-

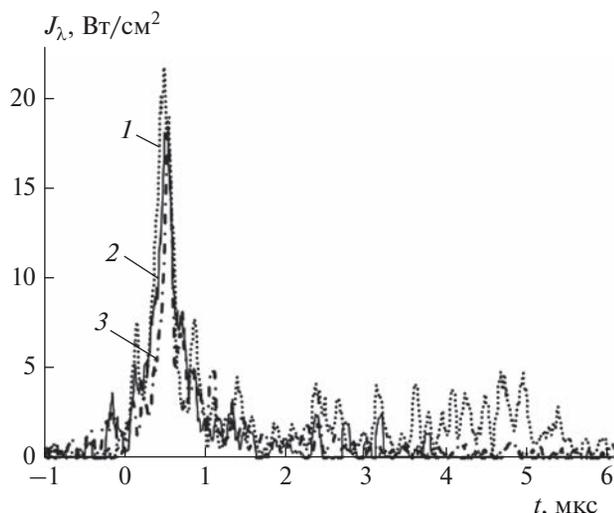


Рис. 6. Временные спектрограммы излучения атомов азота на длине волны 120 нм в ударно-нагретом воздухе при $p_0 = 0.25$ Торр и следующих значениях скорости ударной волны: $V_{SW} = 8.73$ (1), 8.62 (2) и 8.39 км/с (3).

сти ударной волны V_{SW} . На рис. 8 показаны временные зависимости мощности излучения J_λ атомов азота на длине волны $\lambda = 149$ нм в воздухе, измеренные при различных значениях скорости ударной волны V_{SW} и начальном давлении $p_0 = 0.125$ Торр. Видно, что характер поведения приведенных спектрограмм в общих чертах повторяет спектрограммы, измеренные при начальном давлении $p_0 = 0.25$ Торр и показанные на рис. 6 и 7. На всех спектрограммах на начальном этапе процесса наблюдается сильный “всплеск” мощности излучения J_λ с последующим ее выходом на равновесный уровень. При небольших скоростях ударной

волны пиковая интенсивность J_λ значительно превышает равновесные значения. Увеличение скорости ударной волны ведет к уменьшению этой разницы, и при $V_{SW} \geq 10$ км/с пиковая интенсивность практически совпадает с равновесными значениями.

Как уже отмечалось выше, основной причиной отсутствия достаточного количества экспериментальной информации по радиационным характеристикам ударно-нагретого воздуха в VUV-диапазоне спектра является обеспечение нужного уровня вакуума на пути прохождения излучения к системе его регистрации. Наибольшее количество данных по панорамным спектрам воздуха в рассматриваемом спектральном диапазоне получено в электроразрядной ударной установке EAST [8]. Так как спектрограммы, измеренные в EAST, получены в единицах объемной мощности излучения B_λ , а измерительная система ударной трубы STS-M фиксирует объемную плотность излучения I_λ , для перехода в панорамном спектре от I_λ к B_λ необходимо величину I_λ разделить на эффективное время излучения Δt , которое определяется из временных осциллограмм излучения для каждого узкого диапазона спектра. Для данного интервала длин волн, как видно из рис. 4, величина Δt равна примерно 4 мкс.

На рис. 9 приведено сравнение панорамных спектров излучения в интервале длин волн $\lambda = 146-154$ нм, полученных в ударных установках STS-M и EAST примерно в одинаковых условиях. Для данного спектрального диапазона, как видно из рис. 4, эффективное время излучения Δt равно примерно 4 мкс. Анализ рис. 9 показывает, что обе спектральные кривые в общих чертах повторяют друг друга. Небольшое различие можно объ-

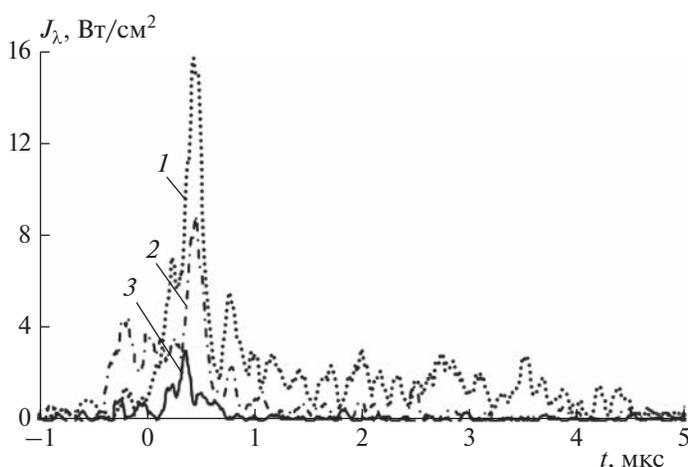


Рис. 7. Временная зависимость мощности излучения атомов кислорода на длине волны 130 нм в ударно-нагретом воздухе при $p_0 = 0.25$ Торр и следующих значениях скорости ударной волны: $V_{SW} = 10.00$ (1), 9.07 (2) и 8.03 км/с (3).

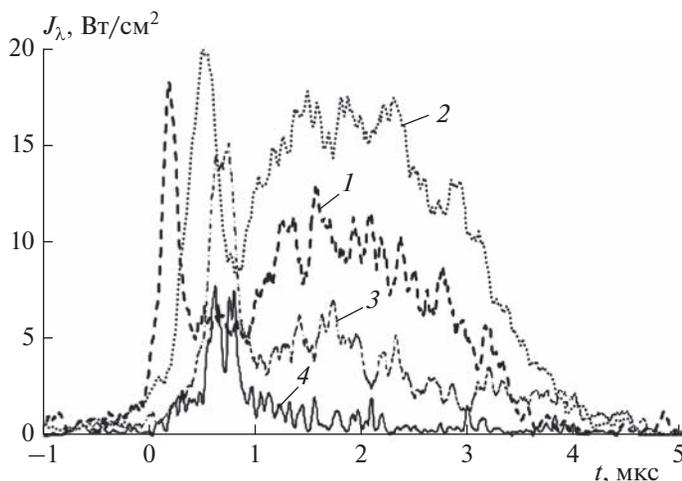


Рис. 8. Временная зависимость мощности излучения атомов азота на длине волны 149 нм в ударно-нагретом воздухе при $p_0 = 0.125$ Торр и следующих значениях скорости ударной волны: $V_{SW} = 10.72$ (1), 10.36 (2), 9.95 (3) и 8.79 км/с (4).

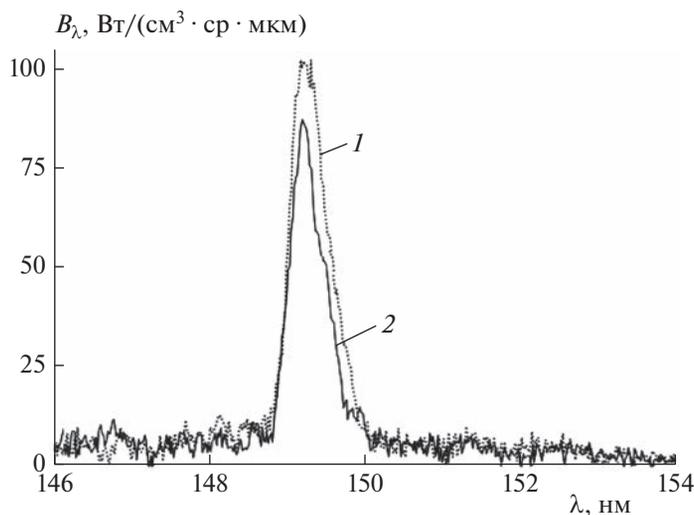


Рис. 9. Сравнение панорамных спектров излучения воздуха, полученных в ударной трубе STS при $p_0 = 0.25$ Торр и $V_{SW} = 9.48$ км/с (1) и ударной установке EAST [8] при $p_0 = 0.2$ Торр и $V_{SW} = 9.53$ км/с (2).

яснить более высоким давлением в экспериментах в STS-M.

ВЫВОДЫ

1. Проведена серия экспериментов по измерению интегральных и временных характеристик излучения ударно-нагретого воздуха в вакуумно-ультрафиолетовой области в интервале скоростей ударной волны от 7.8 до 10.7 км/с при начальных давлениях в камере низкого давления 0.125 и 0.25 Торр.

2. Анализ интегральных спектрограмм излучения показывает, что значительную интенсивность в рассматриваемом спектральном диапазоне имеют

линии атома азота на длинах волн $\lambda = 120.0$, 141.2, 149.3 и 174.5 нм, а также резонансная линия атома кислорода на длине волны $\lambda = 130.2$ нм и три линии атома углерода на длинах волн $\lambda = 156.1$, 165.8 и 195.1 нм.

3. Временные спектрограммы излучения атомов азота и кислорода, измеренные на длинах волн $\lambda = 120$, 130 и 149 нм, позволяют определить эффективное время излучения $\Delta\tau$, которое служит критерием для пересчета объемной плотности энергии излучения I_λ на объемную мощность излучения B_λ .

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № АААА-А19-119012990112-4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Shang J.S., Surzhikov S.T.* // Prog. Aerospace Sci. 2012. V. 53. P. 46.
2. *Суржиков С.Т.* // Хим. физика. 2008. Т. 27. № 10. С. 63.
3. *Brandis A.M., Johnston C.O., Cruden B.A., Prabhu D., Bose D.* // J. Thermophys. Heat Trans. 2015. V. 29. P. 209.
4. *Kleb B., Johnston C.* // AIAA Paper. № 2008-3688.
5. *Palumbo G., Craig R.A., Whiting E.W., Park C.* // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1997. V. 51. P. 207.
6. *Герасимов Г.Я., Козлов П.В., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г., Левашов В.Ю.* // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 8. С. 17.
7. *Cruden B.A., Martinez R., Grinstead J.H., Olejniczak J.* // AIAA Paper. № 2009-4240.
8. *Brandis A.M., Cruden B.A.* // AIAA Paper. № 2017-1145.
9. *Sheikh U.A., Morgan R.G., McIntyre T.J.* // AIAA J. 2015. V. 53. P. 3589.
10. *Быкова Н.Г., Забелинский И.Е., Ибрагимова Л.Б., Козлов П.В., Стовбун С.В., Тереза А.М., Шаталов О.П.* // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 2. С. 35.
11. *Забелинский И.Е., Козлов П.В., Акимов Ю.В., Быкова Н.Г., Герасимов Г.Я., Туник Ю.В., Левашов В.Ю.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 11. С. 22.
12. *Kozlov P.V., Zabelinsky I.E., Bykova N.G., Gerasimov G.Ya., Levashov V.Yu., Tunik Yu.V.* // Acta Astronaut. 2022. V. 194. P. 461.
13. *Козлов П.В., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г., Акимов Ю.В., Левашов В.Ю., Герасимов Г.Я., Тереза А.М.* // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 9. С. 26.
14. NIST Atomic Spectra Database, Ver. 5.10. Gaithersburg: NIST, 2022; <https://doi.org/10.18434/T4W30F>
15. *Kazakov V.V., Kazakov V.G., Kovalev V.S., Meshkov O.I., Yatsenko A.S.* // Phys. Scr. 2017. V. 92. № 105002.
16. *Jung Y.-D., Kim C.-G.* // J. Plasma Phys. 2002. V. 67. P. 191.
17. *Tibère-Inglesse A., Cruden B.A.* // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2022. V. 290. № 108302.
18. *Johnston C.O., Kleb B.* // J. Spacecraft Rockets. 2012. V. 49. P. 425.
19. *Han J., Park W., Kim J. et al.* // Current Appl. Phys. 2021. V. 31. P. 208.
20. *Han D., Park J., Kim Y., Kwon D., Park S.* // Ibid. P. 239.
21. *Суржиков С.Т.* // Теплофизика высоких температур. 2016. Т. 54. № 2. С. 249.
22. *Козлов П.В., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г., Герасимов Г.Я., Левашов В.Ю.* // Изв. РАН. МЖГ. 2022. № 6. С. 85.

УДК 533.6.011.5

ИССЛЕДОВАНИЕ ИОНИЗАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕД СИЛЬНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНОЙ

© 2023 г. М. А. Котов^{1,2*}, П. В. Козлов², К. Ю. Осипенко¹, Г. Я. Герасимов², В. Ю. Левашов², Н. Г. Быкова², И. Е. Забелинский²

¹Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук, Москва, Россия

²Институт механики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

*E-mail: kotov@ipmnet.ru

Поступила в редакцию 28.03.2023;

после доработки 17.04.2023;

принята в печать 20.04.2023

С помощью двухдиафрагменной ударной трубы DDST-M Института механики МГУ проведена серия зондовых измерений параметров низкотемпературной плазмы перед фронтом падающей ударной волны. В качестве рабочих газов использовали азот, кислород, воздух и аргон. Полученные результаты позволяют описать процессы фотоэффекта и фотоионизации частиц исследуемого газа за счет жесткого излучения от ударно-нагретой среды и оценить влияние этих процессов на изменение потенциала зонда. Зондовые измерения синхронизированы с регистрацией светового потока, которая осуществлялась с использованием лавинного фотодиода и 9-кадровой видеокамеры K011, расположенных в торце ударной трубы. Данные с камеры и пьезоэлектрические датчики регистрируют динамику открытия диафрагмы, а также процесс формирования ударной волны в исследуемом газе.

Ключевые слова: ударная волна, зондовая методика, фотоэффект, фотоионизация, азот, кислород, воздух, аргон.

DOI: 10.31857/S0207401X23100084, EDN: PFXYKU

ВВЕДЕНИЕ

Для корректного описания радиационных процессов за фронтом сильной ударной волны (УВ), образующейся перед головной частью спускаемого космического аппарата, необходима информация о концентрации и температуре электронного газа перед УВ. Присутствующие в газовой среде прекурсорные электроны могут существенно влиять на параметры среды за фронтом УВ [1]. В частности, ионизация атомов за счет их столкновений с электронами является доминирующим механизмом в значительной части ионизационного процесса [2]. Как показывают оценки, погрешность при вычислении радиационной составляющей теплового потока в зависимости от моделирования эффекта прекурсорных электронов может достигать 20% [3, 4].

Известно, что излучение из области длин волн, соответствующих вакуумному ультрафиолетовому (ВУФ) диапазону спектра, составляет значительную часть общего радиационного теплового потока к поверхности спускаемого аппарата [5]. При этом надежная экспериментальная информация и, как следствие, надежные расчетные модели формирования ВУФ-излучения отсутствуют. С другой стороны, как отмечается в работе [6],

экспериментальные данные по измерению концентрации и температуры электронов в воздухе перед фронтом УВ могут быть использованы для верификации модели формирования излучения УВ в диапазоне длин волн $\lambda = 85\text{--}105$ нм спектра при скорости ударной волны $V_{SW} = 4.5\text{--}9.5$ км/с. Таким образом, для построения корректных моделей излучения и ионизации газов за фронтом УВ необходимо уменьшить неопределенность в данных по концентрации и температуре электронов перед ударным фронтом.

Возникновение электронов перед УВ объясняется двумя конкурирующими процессами: фотоионизацией молекул [7, 8] и диффузией электронов из послееударной области [9, 10]. Вопрос о наличии электронов в исследуемом газе до прихода УВ начал активно обсуждаться в литературе начиная с 60-х годов прошлого столетия [11–13], и это обсуждение не прекращается до настоящего времени [3, 14]. Одной из основных методик регистрации концентрации электронов является зондовая методика [15]. Хорошо известно, что интерпретация зондовых измерений, выполненных в плазме, сама по себе может быть предметом отдельного изучения, поскольку “подходящая” теория существенным образом зависит от парамет-

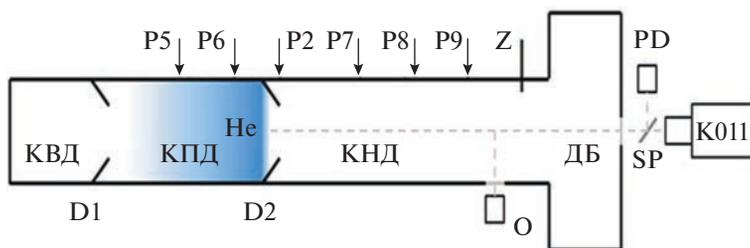


Рис. 1. Схема ударной установки DDST-M (описание см. в тексте).

ров плазмы, размеров и формы зонда [16]. В то же время регистрируемое зондами изменение потенциала не всегда позволяет выделить процесс, связанный с этим изменением. Таким образом, для получения детальной информации о временной эволюции параметров электронного газа (концентрации и температуре) необходимы подробные экспериментальные данные с выделением всех возможных процессов, влияющих на процесс образования электронов.

В настоящей работе зондовые измерения перед фронтом УВ синхронизированы с данными по измерению светового потока, а также с данными с пьезоэлектрических датчиков и оптической системы регистрации излучения. Подобная процедура позволяет выделить причины изменения потенциала зонда, связанные с процессами фотоэффекта и фотоионизации, а также дает возможность определить момент начала образования электронов перед фронтом УВ за счет излучения газа из высокотемпературной области за ударной волной.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Исследования проводились в двухдиафрагменной ударной установке DDST-M (Modified Double-Diaphragm Shock Tube) Института механики МГУ, принцип действия которой подробно описан в работе [17]. Схема измерительной системы установки применительно к исследованию ионизационных процессов перед сильной УВ приведена на рис. 1. Диафрагма D1 на схеме отделяет камеру высокого давления (КВД), заполненную гремучей смесью, от камеры промежуточного давления (КПД), которая заполнена гелием. Детонационное сжигание гремучей смеси в КВД приводит к раскрытию D1 и формированию первичной ударной волны в КПД, которая нагревает гелий и способствует раскрытию диафрагмы D2. Сформировавшаяся при этом вторичная УВ движется по камере низкого давления (КНД), которая заканчивается демпферным баком (ДБ).

В торцевой стенке демпферного бака по оси трубы находится кварцевое окно толщиной 15 мм и диаметром 20 мм, за которым через раздели-

тельную пластину SP помещен лавинный фотодиод PD с диапазоном спектральной чувствительности 200–1100 нм. Фотодиод используется для регистрации излучения в момент раскрытия диафрагмы D2. Для проведения скоростной съемки этапов раскрытия диафрагмы D2 применяется 9-кадровая камера K011. Одновременно с камерой регистрируется сигнал с пьезоэлектрического датчика P2, установленного в КНД в 25 мм от D2 вверх по потоку, по которому определяется момент начала и полного открытия диафрагмы D2. Датчики давления P5 и P6 располагаются за 200 и 100 мм до диафрагмы D2. Для регистрации параметров падающей ударной волны в КНД установлены датчики давления P7–P9, которые находятся соответственно на расстояниях 2500, 2600 и 3000 мм от D2.

В экспериментах всегда присутствовал изолированный электрический зонд Z для контактной регистрации параметров плазмы, который имел одноэлектродную конструкцию и находился на расстоянии 3100 мм от D2. В некоторых экспериментах проводили измерение излучения ударно-нагретого газа, проходящего мимо измерительного сечения трубы, расположенного за 50 мм до зонда Z. Излучение регистрировалось с помощью оптической системы O, которая собрана на базе спектрографа Horiba 1061 (USA), фиксирующего на фотоэлектронном умножителе R446 (Hamamatsu) осциллограммы излучения в специально выделенных с помощью монохроматора узких спектральных диапазонах.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

С помощью ударной установки DDST-M была проведена серия измерений параметров низкотемпературной плазмы перед фронтом падающей УВ. Одновременно фиксировались световой поток и показания пьезоэлектрических датчиков, что позволяет описать динамику открытия диафрагмы D2, а также процесс формирования УВ в исследуемом газе. На рис. 2 приведен пример записи стадий открытия D2, сделанной с помощью высокоскоростной камеры K011. В рассматриваемом случае ударная волна движется в КНД, за-

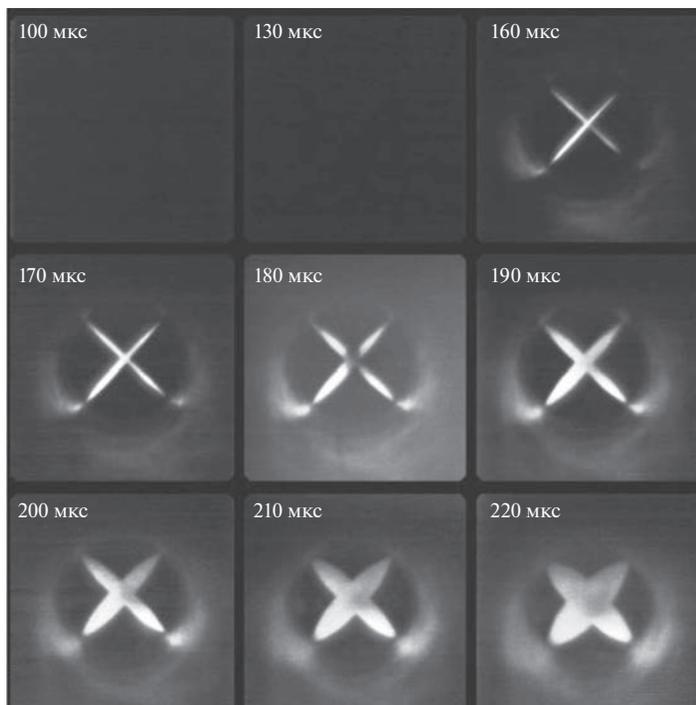


Рис. 2. Серия кадров, иллюстрирующая начало (160 мкс) и последующие стадии раскрытия диафрагмы D2. Выдержка кадра – 0.1 мкс.

полненной чистым азотом, со скоростью $V_{SW} = 7.8$ км/с при начальном давлении перед фронтом УВ $p_0 = 0.25$ Торр. Запуск камеры осуществлялся фотодиодом PD, который регистрировал излучение ударно-нагретого гелия в КПД.

Результаты видеосъемки, показанные на рис. 2 и позволяющие зарегистрировать момент начала и полного раскрытия диафрагмы D2, синхронизированы с записями показаний зонда Z, лавинного фотодиода PD и пьезоэлектрического датчика P2. Динамика открытия диафрагмы приведена на рис. 3. Видно, что до момента открытия D2 датчик P2 фиксирует только колебания стенки установки, которые вызваны УВ, пришедшей на диафрагму D2 со стороны КПД. С момента начала открытия D2 на записи показаний P2 во временном интервале $t = 160\text{--}260$ мкс меняется частота колебаний из-за истечения сверхзвукового потока через образовавшиеся в диафрагме щелевые отверстия. В момент полного раскрытия лепестки диафрагмы ударяются о внутреннюю стенку КНД и датчик P2 показывает резкое увеличение амплитуды колебаний.

Из рис. 3 видно, что в процессе раскрытия диафрагмы D2 наблюдается нарастание сигнала зонда Z. Причиной этого является эмиссия электронов с поверхности зонда (фотоэффект), поскольку интенсивность излучения ударно-нагретого гелия в этот момент достаточно значительна. В рассматриваемом случае скорость первичной УВ в гелии, кото-

рая определяется по показаниям датчиков давления P15 и P16, равна 6.3 км/с. Используя это значение скорости и начальные параметры эксперимента, приведенные выше, можно рассчитать давление и температуру гелия за УВ, отраженной от диафрагмы D2 [18], которые равны 27 атм и 8820 К соответственно. Кривые, снятые при помощи фотодиода PD и пьезоэлектрического датчика P2, также демонстрируют изменения (рис. 3), свидетельствующие о раскрытии диафрагмы (увеличение амплитуды колебаний P2) и излучении гелия (рост показаний PD после $t = 150$ мкс).

Зависимость показаний зонда Z от процессов, протекающих вблизи его поверхности, демонстрируется на рис. 4. В первую очередь – это фотоэффект, возникающий в результате излучения толкающего газа (гелия) сразу после открытия диафрагмы D2. Далее, после формирования вторичной УВ начинает сказываться фотоэффект от излучения ударно-нагретого газа. И наконец, перед самым приходом вторичной ударной волны к зонду он начинает фиксировать фотоионизацию газа перед фронтом ударной волны за счет излучения ударно-нагретого газа. В данном эксперименте вторичная УВ движется по камере низкого давления, заполненной чистым азотом, со скоростью $V_{SW} = 10.0$ км/с при начальном давлении перед фронтом УВ $p_0 = 0.25$ Торр. Скорость первичной УВ, которая распространялась по КПД, за-

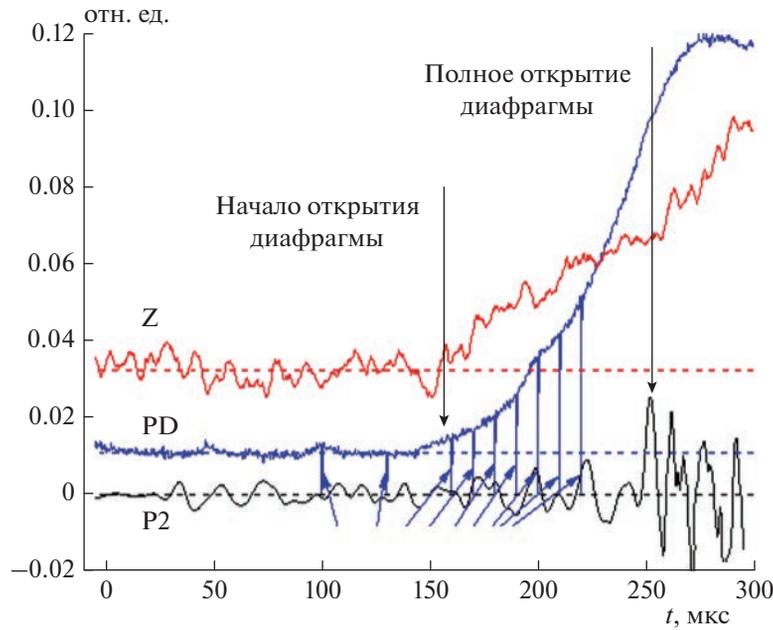


Рис. 3. Динамика открытия диафрагмы D2, зафиксированная зондом Z, лавинным фотодиодом PD и пьезоэлектрическим датчиком P2. Стрелками отмечены моменты кадров, показанных на рис. 2.

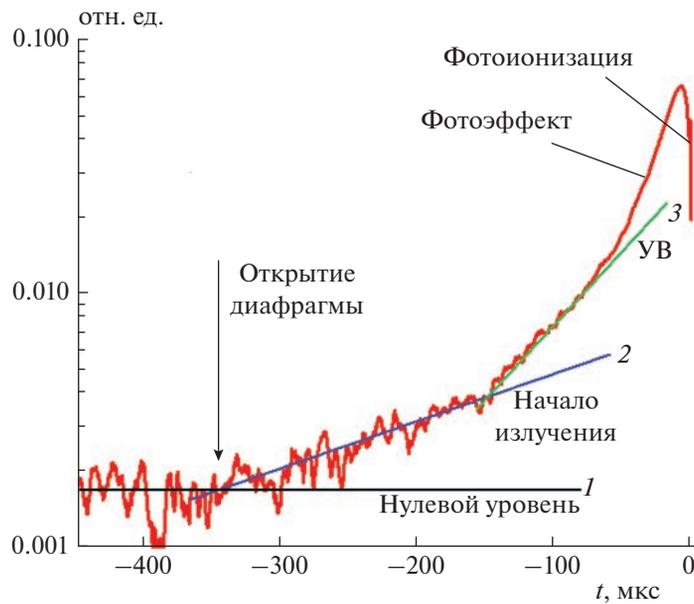


Рис. 4. Сигнал с зонда Z, показывающий явления фотоэффекта и фотоионизации при подходе к нему сформировавшейся вторичной ударной волны в азоте; $V_{SW} = 10.0$ км/с, $p_0 = 0.25$ Торр.

полненной гелием, и затем отразилась от диафрагмы D2, составляла 6.25 км/с.

Анализ рис. 4 показывает, что по сигналу с зонда Z и росту значения его потенциала можно вычислить момент открытия диафрагмы. Он определяется как пересечение нулевой (1) и наклонной (2) линий спектра излучающего гелия. Значения ра-

боты выхода электрона с поверхности нержавеющей стали, из которой изготовлен зонд, оцениваются в диапазоне от 3.5 эВ и выше [19–22], что эквивалентно энергии фотонов на длине волны $\lambda = 354$ нм и ниже. Спектр излучения атомарного гелия имеет несколько типичных полос в ВУФ-области [23]. С ростом температуры плазма также

дает дополнительный вклад в интенсивность излучения, как излучение континуума, определяемое по закону Планка. Таким образом, в условиях эксперимента ударно-нагретый гелий хорошо излучает в ВУФ-области, а излучение, приходящее через раскрывающуюся диафрагму, обладает достаточной мощностью для совершения работы выхода электронов с поверхности зонда и увеличения его потенциала. Об этом свидетельствует начало фотоэффекта, которое хорошо наблюдается по росту потенциала зонда Z в интервале времен t от -350 до -140 мкс перед приходом ударной волны к зонду Z .

На расстоянии нескольких калибров от диафрагмы D2 вниз по потоку начинает формироваться УВ, которая также начинает излучать и способствовать дополнительной эмиссии электронов с зонда. Линия 3 на рис. 4 демонстрирует крутой рост потенциала зонда вследствие фотоэффекта от излучения сформированной УВ. За ее фронтом находится наиболее нагретая область неравновесной плазмы. Излучение нагретой плазмы с энергией, превосходящей энергию ионизации частиц исследуемого газа, частично поглощается ближайшим к фронту УВ слоем газа, что приводит к его ионизации, а частично распространяется далее и ионизует области газа, все более отстоящие от фронта УВ. Электроны за счет теплового движения попадают на поверхность зонда, что приводит к уменьшению положительного потенциала зонда, а в дальнейшем — к переходу потенциала в область отрицательных величин. Это хорошо видно из рис. 5, который представляет собой более детальное изображение рис. 4 перед приходом УВ. Поскольку интенсивность проходящего излучения экспоненциально уменьшается с увеличением толщины слоя, наибольшая концентрация электронов находится вблизи фронта УВ.

Анализ рис. 5 показывает, что при скорости УВ в азоте $V_{SW} = 10$ км/с толщина плазменного слоя составляет порядка 5–10 см, что подтверждается результатами измерения концентрации электронов перед фронтом УВ [14]. Последующий рост потенциала и переход его в положительную область обусловлены прохождением УВ мимо зонда с последующей локализацией зонда в зоне ударно-нагретого газа, где степень ионизации последнего резко возрастает и основную роль при формировании потенциала зонда начинают играть положительно заряженные ионы [24]. На рис. 5 показаны также моменты прихода ударной волны к датчику давления P9 и к оптической системе O, которая в рассматриваемом случае регистрирует излучение на длине волны $\lambda = 381$ нм.

Для оценки влияния химического состава исследуемой газовой смеси на протекание ионизационных процессов и их взаимного влияния друг на друга были проведены эксперименты с различ-

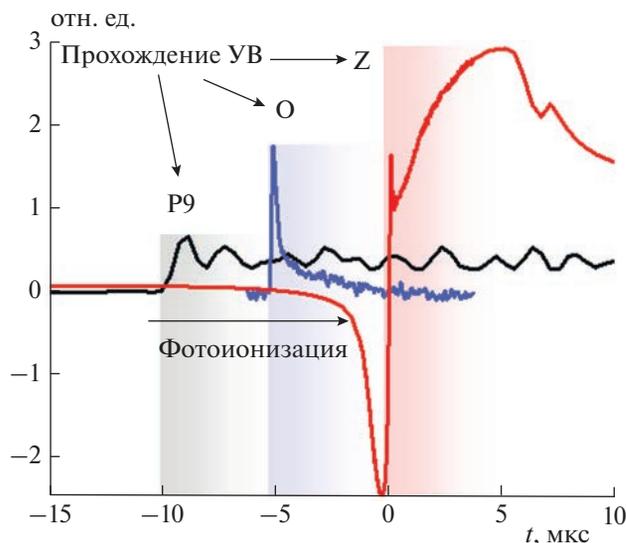


Рис. 5. Область вблизи ударного фронта с показаниями зонда Z , датчика давления P9 и оптической системы O на длине волны $\lambda = 381$ нм, которые демонстрируют прохождение ударной волны в азоте со скоростью $V_{SW} = 10$ км/с.

ными газовыми средами в КНД. На рис. 6 представлены результаты, полученные в воздухе комнатного состава и в синтетическом воздухе норматива ПНГ (поверочный нулевой газ) при одинаковых начальных экспериментальных условиях: скорость ударной волны в воздухе $V_{SW} = 10.7$ км/с, начальное давление в КНД $p_0 = 0.2$ Торр, температура гелия в момент раскрытия диафрагмы равна 12600 К при давлении 48 атм.

Как видно из рис. 6, в эксперименте с комнатным воздухом в показаниях зонда не наблюдается фотоэффект при открытии диафрагмы. По-видимому, это связано с поглощением излучения гелия углекислым газом и парами воды. Углекислый газ в комнатном воздухе имеет объемную долю около 0.03%. Относительная влажность воздуха в момент наполнения КНД составляла не менее 50%, что соответствует примерному содержанию воды в 8.8 г/м³ при комнатной температуре или объемной доле, составляющей 0.00088%. Учитывая, что начальное давление воздуха в КНД равно 0.2 Торр, в ее цилиндрическом объеме между сечением размещения зонда и диафрагмой D2, равном примерно 6084 см³, содержится более $1.3 \cdot 10^{-2}$ мм³ воды. В работах [25–28] приведены данные по поглощению ВУФ-излучения водяным паром, которое может быть достаточно значительным, особенно в области электронных переходов, соответствующих длинам волн излучения $\lambda = 106$ –198 нм. Это непосредственным образом влияет на поглощение излучения гелия за раскрывающейся диафрагмой, вследствие чего фотоэффект в экспериментах с воздухом комнатного состава не наблюдается. Следует

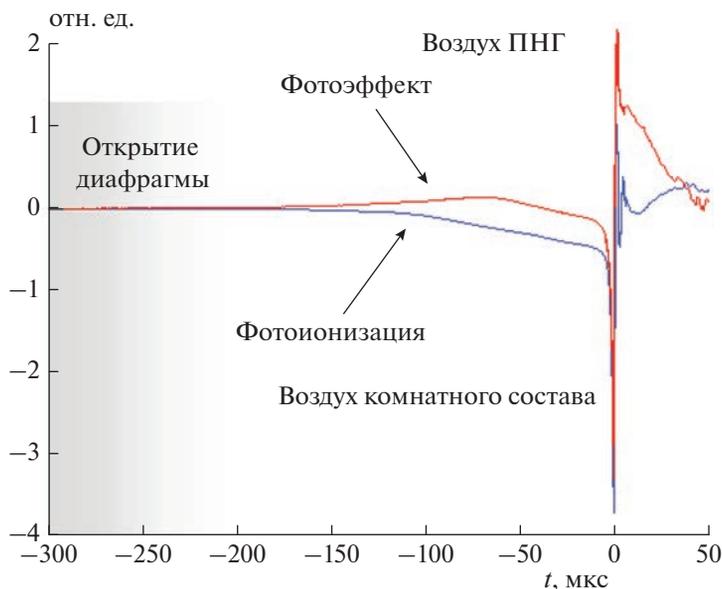


Рис. 6. Сигналы с зонда Z в экспериментах с воздухом различного состава.

отметить, что наиболее значительный вклад в поглощение при длинах волн ниже 200 нм вносит содержащийся в воздухе кислород [29–32].

В воздухе ПНГ, в отличие от комнатного воздуха, процессы фотоэффекта и фотоионизации конкурируют друг с другом, из-за чего спад в показаниях зонда Z начинается намного позже, как это видно из рис. 6. Нормативы по компонентному составу синтетического воздуха ПНГ, следующие: O_2 – 20%, CO_2 – менее 0.0005%, CH_4 – менее 0.0005% и CO – менее 0.0005%. Объемная доля водяного пара практически равна нулю. Отсутствие в синтетическом воздухе значительной доли поглотителей жесткого излучения гелия ведет к доминирующей роли фотоэффекта на начальном этапе формирования ударной волны в КНД. На завершающем этапе ведущую роль начинают играть ионизационные процессы за счет излучения ударно-нагретого газа, которые в итоге ведут к образованию плазменного слоя перед фронтом УВ.

На рис. 7 представлены типичные данные, полученные при прохождении ударной волны по КНД, заполненной кислородом. Скорость УВ в рассматриваемом случае равна $V_{SW} = 9$ км/с, начальное давление $p_0 = 0.25$ Торр, температура гелия в момент раскрытия диафрагмы составляла 7130 К при давлении 21 атм. В отличие от предыдущих экспериментов здесь не наблюдается эмиссии электронов с зонда Z при раскрытии диафрагмы D2. В начальный момент времени фотодиод PD также не фиксирует никакого излучения. По-видимому, это связано с тем, что нагретый гелий сначала излучает в коротковолновом ВУФ-диапазоне с длиной волны ниже 200 нм. Это

излучение поглощается кислородом в КНД на временном интервале t от -460 до -365 мкс. Далее гелий начинает остывать и максимум интенсивности смещается в область длин волн $\lambda > 200$ нм – в сторону видимого спектрального диапазона, и показания PD начинают резко расти, что наблюдается при временах процесса начиная от $t = -365$ мкс. Затем, спустя 230 мкс после начала раскрытия диафрагмы, в КНД формируется УВ, которая начинает излучать и способствовать фотоионизации кислорода. При этом показания зонда Z снижаются вследствие прихода электронов на зонд. Следует отметить, что при проведении экспериментов в других газах (в азоте, аргоне, воздухе особой частоты) в отличие от сред, в которых происходит поглощение коротковолнового ВУФ-излучения, эмиссия электронов с зонда Z будет проявляться, что позволяет достоверно определить момент начала раскрытия диафрагмы.

На рис. 8 представлены данные, полученные при заполнении КНД аргоном. Здесь скорость ударной волны $V_{SW} = 6.25$ км/с при $p_0 = 1$ Торр. Как и при распространении ударной волны в азоте (см. рис. 4), здесь также наблюдаются рост потенциала зонда Z при приближении к нему ударного фронта за счет фотоэффекта и излом перед лавинной фотоионизацией.

Интересным результатом является синхронность в поведении излучения аргона на длине волны $\lambda = 763$ нм (линия 1 на рис. 8) и потенциала зонда (линия 2). Излучение на этой длине волны соответствует переходу с возбужденного уровня $3s^23p^5(^2P_{3/2}^o)4p$ на уровень $3s^23p^5(^2P_{3/2}^o)4s$. Видно, что излучение на начальном этапе, т.е. сразу по-

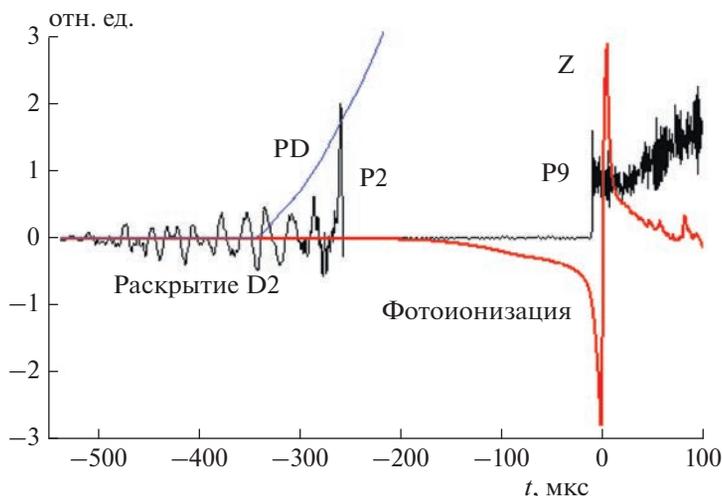


Рис. 7. Показания датчиков давления P2 и P9, лавинного фотодиода PD и зонда Z, демонстрирующие раскрытие диафрагмы D2 и прохождение ударной волны в кислороде со скоростью $V_{SW} = 9$ км/с.

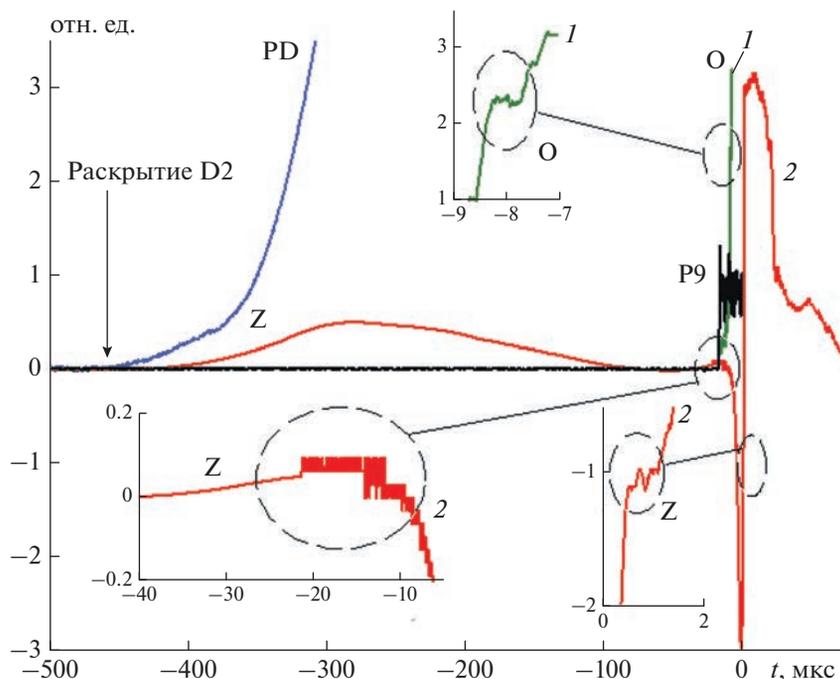


Рис. 8. Показания датчика давления P9, лавинного фотодиода PD, зонда Z и оптической системы O на длине волны $\lambda = 763$ нм, демонстрирующие раскрытие диафрагмы D2 и прохождение ударной волны в аргоне со скоростью $V_{SW} = 6.25$ км/с.

сле прихода фронта УВ в измерительное сечение, ведет себя следующим образом. Интенсивность излучения сначала незначительно возрастает, затем наблюдается плавный спад, а далее происходит резкое лавинообразное нарастание сигнала, что связано с образованием достаточного количества электронов. Потенциал зонда Z после прихода к нему фронта УВ ведет себя аналогичным образом.

Как показано в работе [33], именно присутствие электронов позволяет объяснить такой немонотонный характер поведения излучения. Характер изменения потенциала зонда Z позволяет сделать вывод, подтверждающий образование электронов. Действительно, из графиков для потенциала видно, что сразу после прихода ударной волны потенциал зонда начинает увеличиваться. Данный факт, очевидно, связан с “поступлени-

ем” на поверхность зонда положительных ионов в результате движения УВ. В то же время образующиеся в результате ударной ионизации свободные электроны начинают поступать на зонд в результате теплового движения, что приводит к изменению характера нарастания потенциала.

Следует отметить, что по данным измерения потенциала зонда Z при наличии соответствующих данных по току можно рассчитать концентрацию и температуру электронов в различные моменты времени перед приходом УВ к зоне локализации зонда [34–36]. Эта задача является предметом дальнейших исследований коллектива авторов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные исследования показали, что раскрытие диафрагмы между КПД и КНД, зафиксированное высокоскоростной видеокамерой, сопровождается жестким ВУФ-излучением гелия, ударно-нагретого в КПД. В отсутствие поглотителей этого излучения в исследуемом газе (молекулярный кислород, пары воды, углекислый газ) наблюдается эмиссия электронов с электрического зонда за счет фотоэффекта. Формирование и дальнейшее распространение ударной волны в КНД сопровождается быстрым нагревом исследуемого газа и ростом интенсивности его излучения в широком спектральном диапазоне. Это, в свою очередь, приводит к фотоионизации газа перед ударным фронтом. Этот процесс фиксируется резким падением потенциала зонда в область отрицательных величин, что объясняется приходом электронов на поверхность зонда из окружающего газа. В качестве исследуемых газов рассмотрены азот, кислород, воздух различной степени чистоты и аргон.

Работа выполнена в рамках госзаданий Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (темы № АААА-А19-119012990112-4 и № 123021700057-0).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kapper M.G., Cambier J.-L.* // J. Appl. Phys. 2011. V. 109. № 113308.
2. *Суржиков С.Т.* // Хим. физика. 2010. Т. 29. № 7. С. 48.
3. *Notura S., Lemal A., Kawakami T., Fujita K.* // AIAA Paper. № 2018-0741.
4. *Johnston C.O., Mazaheri A., Gnoffo P. et al.* // AIAA Paper. № 2011-3145.
5. *Brandis A., Johnston C., Cruden B., Prabhu D., Bose D.* // J. Thermophys. Heat Transf. 2015. V. 29. P. 209.
6. *Горелов В.А., Куреев А.Ю.* // Физ.-хим. кинетика в газ. динамике. 2014. Т. 15. № 1. С. 1.
7. *Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П.* Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматлит, 2008.
8. *Власов П.А., Смирнов В.Н., Тереза А.М.* // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 6. С. 35.
9. *Weymann H.D.* // Phys. Fluids. 1969. V. 12. P. 1193.
10. *Kim M., Gülhan A., Boyd I.D.* // J. Thermophys. Heat Transf. 2012. V. 26. P. 244.
11. *Weymann H.D.* // Phys. Fluids. 1960. V. 3. P. 545.
12. *Holmes L.B., Weymann H.D.* // Phys. Fluids. 1969. V. 12. P. 1200.
13. *Горелов В.А., Кильдюшова Л.А., Чернышев В.М.* // Уч. записки ЦАГИ. 1977. Т. 8. № 6. С. 49.
14. *Notura S., Kawakami T., Fujita K.* // J. Thermophys. Heat Transf. 2021. V. 35. P. 518.
15. *Ступоченко Е.В., Лосев С.А., Осипов А.И.* Релаксационные процессы в ударных волнах. М.: Наука, 1965.
16. *Demidov V.I., Ratynskaia S.V., Rypdal K.* // Rev. Sci. Instrum. 2002. V. 73. P. 3409.
17. *Забелинский И.Е., Козлов П.В., Акимов Ю.В. и др.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 11. С. 22.
18. *Campbell M.F., Parise T., Tulgestke A.M., Spearrin R.M., Davidson D.F., Hanson R.K.* // Shock Waves. 2015. V. 25 P. 651.
19. *Wilson R.* // J. Appl. Phys. 1966. V. 37. P. 2261.
20. *Wilson R.* // J. Appl. Phys. 1966. V. 37. P. 3161.
21. *Prutton M.* Introduction to surface physics. Oxford: University Press, 1994.
22. *Рухляда Н.Я., Вишератин Р.К.* // Вопр. ат. науки и техники. Сер.: “Ядерно-реакторные константы”. 2014. № 2. С. 95.
23. *Lemmon E., Huber M.L., McLinden M.O.* NIST standard reference database 23: Reference fluid thermodynamic and transport properties-REFPROP. Ver. 8.0. Gaithersburg: NIST, 2007.
24. *Colonna G., Capitelli M., Laricchiuta A.* Hypersonic meteoroid entry physics. IOP Publishing, 2019.
25. *Watabene K., Zelikoff M.* // J. Opt. Soc. Amer. 1953. V. 43. P. 753.
26. *Thompson B.A., Harchek P., Reeves R.R., Jr.* // J. Geophys. Res. 1963. V. 68. P. 6431.
27. *Макогон М.М.* // Оптика атмосферы и океана. 2001. Т. 14. № 9. С. 764.
28. *Patterson E.M., Gillespie J.B.* // Appl. Optics. 1989. V. 28. P. 425.
29. *Generalov N.A., Losev S.A.* // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 1966. V. 6. P. 101.
30. *Душин В.К., Забелинский И.Е., Шаталов О.П.* // ЖПС. 1983. Т. 39. № 3. С. 440.
31. *Зуев А.П., Стариковский А.Ю.* // ЖПС. 1990. Т. 52. № 3. С. 455.
32. *Забелинский И.Е., Быкова Н.Г., Ибрагимова Л.Б., Кузнецова Л.А., Шаталов О.П.* // Физ.-хим. кинетика в газ. динамике. 2004. Т. 2. № 1. С. 1.
33. *Левашов В.Ю., Козлов П.В., Быкова Н.Г., Забелинский И.Е.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 1. С. 16.
34. *Fujita K., Matsuda A., Sato S., Abe T.* // Rarefied Gas Dynamics: 22nd Intern. Sympos. IOP Publ., 2001. P. 780.
35. *Fujita K., Sato S., Abe T., Matsuda A.* // AIAA Paper. № 2001-2765.
36. *Yamada G., Ago S., Kawazoe H., Obayashi S.* // J. Fluid Sci. Technol. 2014. V. 9. № 5. P. 70.

УДК 551.510.536

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДНЫХ ФАКТОРОВ НА ТЕМПЕРАТУРУ НИЖНЕЙ ТЕРМОСФЕРЫ

© 2023 г. Н. В. Бахметьева^{1*}, И. Н. Жемяков^{2**}, Г. И. Григорьев¹, Е. Е. Калинина¹

¹Научно-исследовательский радиофизический институт Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

²Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

*E-mail: nv_bakhm@nirfi.unn.ru

**E-mail: ilia.zhem@yandex.ru

Поступила в редакцию 02.05.2023;

после доработки 11.05.2023;

принята в печать 22.05.2023

Подробно описана разработанная нами и усовершенствованная на основе многолетних измерений параметров ионосферы и нейтральной атмосферы методика определения температуры нижней термосферы. Сформулированы требования к проведению измерений методом, основанным на резонансном рассеянии пробных радиоволн искусственными периодическими неоднородностями ионосферной плазмы. Обоснованы основные требования к регистрации сигналов, рассеянных неоднородностями, и обработке данных. Показано, что нижний предел определения температуры по высоте ограничен уровнем турбопаузы, верхний — условием выполнения теплового равновесия. Приведены примеры высотно-временных вариаций температуры на высотах 90–130 км. Представлены новые данные, полученные в результате экспериментов на стенде СУРА (56.15° N; 46.11° E) в сентябре 2021 г. Высотное и временное разрешение порядка 1 км и 15 с, соответственно, позволяют изучать как быстрые, так и медленные процессы в нижней термосфере. Продемонстрирована большая изменчивость температуры на высотах 90–130 км в течение суток и ото дня ко дню, обусловленная распространением атмосферных волн с периодами от 5–10 мин до нескольких часов. Обсуждаются особенности сглаживания высотного профиля по высоте и во времени, влияние на результат определения температуры использования реального и модельного профилей электронной концентрации, а также влияние спорадического слоя E, атмосферной турбулентности и других природных факторов. Выполнено сопоставление профилей температуры с моделью MSIS-E-90 и данными спутниковых измерений.

Ключевые слова: атмосфера Земли, ионосфера, искусственные периодические неоднородности, температура, внутренние гравитационные волны.

DOI: 10.31857/S0207401X23100023, EDN: RLJHJC

1. ВВЕДЕНИЕ

Область нижней термосферы, которая охватывает высоты $h = 90–150$ км, является промежуточной между мезосферой и верхней термосферой. Сведения о температуре существенны для установления закономерностей и роли динамических факторов в формировании теплового режима нижней термосферы, а также для развития и усовершенствования моделей атмосферы. Распространение атмосферных волн разных пространственно-временных масштабов, горизонтальные и вертикальные движения нейтральной среды и ионосферной плазмы, развитая турбулентность, существующая ниже уровня турбопаузы, оказывают влияние на температуру нижней термосферы. Вариации температуры, в свою очередь, влияют на скорость химических реакций. К настоящему вре-

мени получено много сведений о распределении температуры в мезосфере (60–90 км), в то время как данных о высотно-временных вариациях температуры нижней термосферы недостаточно.

Использование разных методов измерений дает возможность получить сведения о температуре области мезосферы и нижней термосферы. Например, применение метода падающих сфер с метеорологических ракет позволило установить значительную изменчивость температуры выше уровня мезопаузы [1–3]. Ракетные измерения являются эпизодическими и редко дают сведения о температуре на высотах $h > 90$ км. Большой массив данных о температуре на высотах 80–100 км был получен в исследованиях радиоотражений от метеорных следов [4]. К сожалению, этот хорошо

развитый и доступный метод практически неприменим при $h > 100$ км.

В исследованиях области мезосферы и нижней термосферы установлены значительные суточная и сезонная изменчивости высотного профиля температуры [5–8]. Получено, например, что на одной высоте вариации температуры могут достигать 50 К и более. Утверждается, что такие вариации могут быть обусловлены распространением внутренних гравитационных волн [5]. Большой объем данных по температуре в мезосфере получен на основе измерений свечения ночного неба в разных атмосферных линиях [1, 7–9]. В течение нескольких десятилетий активно развивается метод, основанный на лазерном зондировании атмосферы. В работе [8] за 417 ночей наблюдений в период с 1990 по 1999 гг. приведены результаты измерений температуры на высотах 80–110 км лидаром в Форт-Коллинз, USA (41° N; 105° E). В работе [10] обсуждаются высотные профили температуры около города Andenes, Norway (69° N; 16° E), полученные с помощью натриевого лидара в таком же диапазоне высот. Результаты измерений температуры на высотах 92–120 км на радаре некогерентного рассеяния EISCAT, Norway (67.85° N; 20.43° E) приведены в работах [11–13]. В монографии [9] приведены подробные сведения о методах и результатах исследования верхней атмосферы на основе измерения атмосферных эмиссий, в частности эмиссии гидроксила. Все полученные данные подтверждают значительную изменчивость температуры в мезосфере и в области мезопаузы. В последние годы большое количество данных о мезосфере и нижней термосфере получено с помощью аппаратуры проекта SABER, размещенной на спутнике TIMED [14] и спутнике Aura [15]. Тем не менее для высот 100–130 км существует дефицит экспериментальных данных. Используемый нами метод, основанный на создании искусственных периодических неоднородностей (ИПН) ионосферной плазмы, может восполнить недостаток сведений о температуре нижней термосферы [16]. Как мы отмечали в предыдущих работах [17–19], несмотря на то, что в методе используется воздействие на ионосферу мощным коротковолновым радиоизлучением с созданием неоднородностей плазмы, измерение температуры атмосферы происходит на стадии их релаксации, т.е. в естественной и уже невозмущенной среде.

Теоретические предпосылки метода и разработанные на его основе способы определения различных параметров нейтральной и ионизованной компонент ионосферы и нейтральной атмосферы подробно описаны в монографии [16]. За прошедшие годы методом ИПН удалось получить большой объем сведений о высотном-временных вариациях температуры и плотности нейтральной компоненты в нижней термосфере, скоростях регулярного

вертикального движения среды, параметрах турбулентности и уровне турбопаузы, характеристиках спорадического слоя E (далее – слой E_s) [20–25]. Анализ этих данных позволил усовершенствовать методику измерения температуры, выяснить и сформулировать ограничения, которые накладывают на нее процессы в нижней ионосфере.

В работе приводятся и обсуждаются как результаты измерений температуры в 2006–2018 гг. на высотах 90–120 км, так и новые данные, полученные в недавних экспериментах на стенде СУРА (56.15° N; 46.11° E) в сентябре 2021 г.

2. МЕТОД ИЗМЕРЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ОСНОВЕ СОЗДАНИЯ ИПН

Метод исследования мезосферы и нижней термосферы на основе создания искусственных периодических неоднородностей и резонансном рассеянии на них пробных радиоволн подробно изложен в монографии [16]. Примеры определения характеристик нейтральной компоненты ионосферы содержатся в работах [17–25].

Основы метода создания ИПН для измерения температуры

Принцип создания неоднородностей основан на воздействии на ионосферу излучением синфазно работающих передатчиков стенда СУРА в зенит мощной радиоволны на частоте ниже критической частоты F-слоя. В поле стоячей волны, образующейся при отражении от ионосферы мощной радиоволны, за период времени от долей до десятков мс формируются неоднородности температуры и концентрации электронов, образуя структуру (“решетку”) квазипериодических плазменных неоднородностей. По окончании воздействия на ионосферу неоднородности разрушаются (релаксируют). Многие параметры нейтральной и ионизованной компонент среды определяются на стадии релаксации неоднородностей по измеренным характеристикам рассеянных ими сигналов при зондировании неоднородностей пробными радиоволнами. Последние излучаются в импульсном режиме также передатчиками нагревного стенда после окончания нагрева; при этом мощность излучения в импульсном режиме мала и не оказывает возмущающего влияния на ионосферную плазму. Отметим, что рассеяние пробных радиоволн квазипериодической структурой возникает при выполнении условия обратного рассеяния Брэгга–Вульфа, один из вариантов реализации которого в эксперименте предполагает использование радиоволн одной и той же частоты и поляризации и для создания, и для зондирования неоднородностей [16, 25].

На высотах E-слоя (высотах нижней термосферы) процесс релаксации ИПН после прекращения

воздействия на ионосферу происходит под действием амбиполярной диффузии [16] и определяется коэффициентом диффузии $D = k_B (T_e + T_i) / M_i v_{im}$ и пространственным периодом неоднородностей. Коэффициент диффузии зависит от электронной, T_e , и ионной, T_i , невозмущенных (фоновых) температур, частоты соударений ионов с молекулами, v_{im} , и массы ионов M_i ; k_B – постоянная Больцмана. В среднеширотной ионосфере ниже 130 км можно принять, что температура нейтральной компоненты и температуры электронов и ионов равны, т.е. $T_e = T_i = T$. В этом случае релаксация неоднородностей происходит с характерным временем

$$\tau = \frac{1}{K^2 D} = \frac{M_i v_{im}}{k_B (T_e + T_i) K^2} = \frac{M_i v_{im}}{2 k_B T K^2}, \quad (1)$$

где $K = 2k$ – волновое число стоячей волны, $k = 2\pi n / \lambda_0$ – волновое число мощной (пробной) радиоволны в среде, n – показатель преломления. Частота соударений пропорциональна плотности ρ атмосферы: $v_{im} = \beta \rho / M$, где M – средняя масса молекул и, как в [26], принято значение $\beta = 0.38 \cdot 10^{-10} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$. Формула (1) является основной для определения температуры нижней термосферы T по измерениям времени релаксации τ периодических плазменных неоднородностей [16].

В предположении, что атмосфера является локально изотермической в пределах некоторого небольшого высотного интервала, время релаксации ИПН выражается соотношением

$$\tau(h) = \frac{\beta \rho(h)}{2K^2(h) k_B T} \left(\frac{M_i}{M} \right). \quad (2)$$

Зависимость времени релаксации от высоты h определяется зависимостью $\rho(h)$ согласно формуле

$$\rho(h) = \rho(h_0) \exp\left(-\frac{h-h_0}{H}\right), \quad (3)$$

где h и h_0 – текущая и начальная высоты, $H = k_B T / Mg$ – высота однородной атмосферы, g – ускорение свободного падения. Измеряя высотную зависимость $\tau(h)$ и предполагая, что в небольшом интервале высот $T = \text{const}$, можно найти высоту однородной атмосферы H , а затем температуру T определить по формуле

$$T = MgH / k_B. \quad (4)$$

Именно такой подход реализован в измерениях температуры методом создания ИПН.

Особенности измерений температуры

Для измерения температуры и других параметров ионосферы и нейтральной атмосферы неоднородности создаются излучением мощной волны не-

обыкновенной поляризации, для того чтобы исключить влияние на рассеянный сигнал неоднородностей, вытянутых вдоль геомагнитного поля, которые возникают в области взаимодействия мощной обыкновенной волны с ионосферной плазмой [27]. Нагревная (создающая неоднородности) и пробная (зондирующая) радиоволны излучаются на частотах, отражающихся в F-слое ионосферы. Как правило, используются частоты в диапазоне 4.30–5.65 МГц, что обусловлено особенностями приемной антенны аппаратного комплекса для приема и регистрации ионосферных сигналов. Воздействие на ионосферу обычно происходит в течение 2–3 с с периодом в 15 с. Этого времени более чем достаточно для образования периодических неоднородностей температуры и концентрации электронов, после чего стенд СУРА переводится в режим импульсной диагностики, излучая пробные волны той же частоты и поляризации с частотой повторения в 50 Гц.

Прием рассеянных сигналов осуществляется антенной системой и приемниками установки частичных отражений, расположенной на расстоянии 1 км от нагревного стенда. Регистрируются квадратурные компоненты рассеянного сигнала, по которым стандартным образом определяются его амплитуда и фаза. Рассеянные сигналы регистрируются с шагом 0.7 или 1.4 км по высоте, в последние годы – с шагом 0.15 км с временным разрешением в 15 с.

Амплитуда и время релаксации рассеянного сигнала подвержены быстрым временным вариациям в течение последовательных измерений, т.е. каждые 15 с. На рис. 1а приведен пример регистрации рассеянного сигнала в реальном времени в период релаксации неоднородностей. Так выглядят рассеянные неоднородностями в нижней ионосфере сигналы на мониторе регистрирующего компьютера в составе приемной аппаратуры. На рис. 1б показаны высотные профили амплитуды и времени релаксации рассеянного сигнала в зависимости от действующей высоты h за 30-минутный период измерений. Каждый профиль получен за 15-секундный сеанс измерений, хотя в реальности неоднородности на высотах 90–130 км релаксируют за время, не превышающее, как правило, 1.5–2.0 с. Время одного сеанса измерений, равное 15 с, определяет временное разрешение метода. Усредненные за 30-минутный период профили характеристик сигнала показаны жирными линиями. В данном примере диффузионному закону релаксации неоднородностей (1), который справедлив в E-слое ионосферы, отвечает интервал высот 100–120 км. На высотах $h < 100$ км атмосферная турбулентность разрушает неоднородности быстрее, чем амбиполярная диффузия, в результате чего время релаксации рассеянного сигнала в среднем уменьшается по сравнению с диффузионным временем, обнаруживая при этом значительный разброс мгновенных

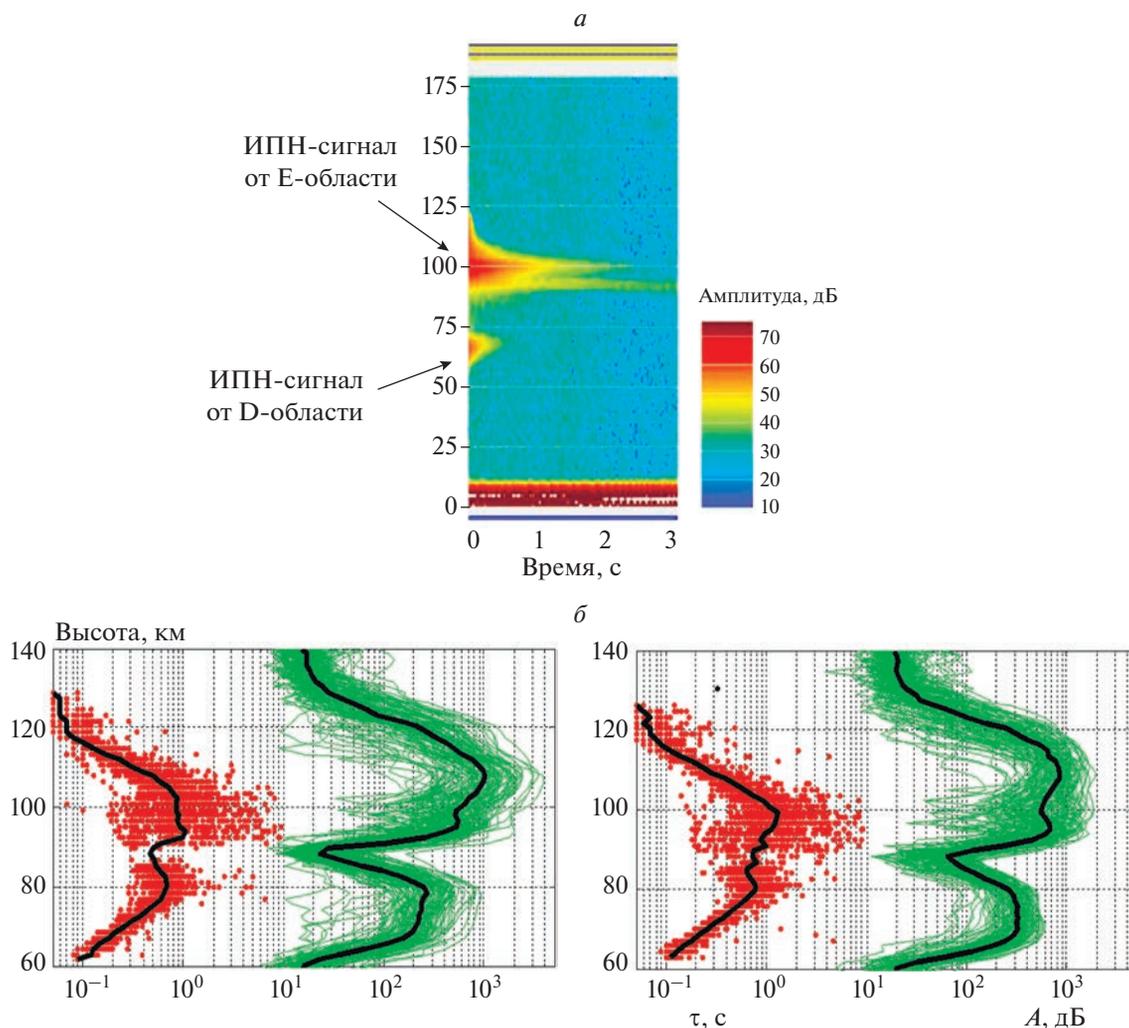


Рис. 1. *a* – Пример аппаратной регистрации в реальном времени сигнала, рассеянного неоднородностями; *b* – высотные профили амплитуды A , времени релаксации τ , полученные 10.08.2015 в сеансах 19:09–19:39 (левая панель) и 19:09–19:39 (правая панель); каждая кривая получена за 15-секундный сеанс регистрации ИПН, а сплошными жирными кривыми показаны усредненные за 30 мин профили амплитуды и времени релаксации.

значений. На высоте $h = 95$ км локальный рост амплитуды и времени релаксации обусловлен слоем E_s , образовавшимся ниже максимума E -слоя. На мезосферных высотах 60–85 км амплитуда и время релаксации изменяются с ростом высоты в полном соответствии с температурной зависимостью коэффициента отлипания электронов в D -области [16]. Результаты измерений характеристик рассеянного сигнала, подобные приведенным на рис. 1, служат основой для последующего определения параметров ионосферы и нейтральной атмосферы [16, 25].

Методика расчета температуры по измеренному времени релаксации ИПН

Время релаксации τ сигнала, рассеянного неоднородностями, определяется по уменьшению амплитуды сигнала в e раз. На каждой высоте зависи-

мость амплитуды рассеянного сигнала от времени, $A(t)$, аппроксимируется линейной функцией вида $\ln A(t) = \ln A_0 - t/\tau$. Далее в определенной последовательности проводится обработка полученного массива данных. На начальном этапе выбираются сеансы измерений в диапазоне высот выше уровня турбопаузы до высоты, где начинает нарушаться диффузионный режим релаксации, а также исключаются периоды времени, когда существует слой E_s (см. ниже). Таким образом, для каждого выбранного сеанса выполняется расчет времени релаксации $\tau(h, t)$ в зависимости от действующей высоты h и времени t . Для уменьшения влияния мелкомасштабных и кратковременных флуктуаций проводится усреднение (сглаживание) зависимости $\tau(h, t)$ по времени и высоте. Как правило, диапазон усреднения по высоте составляет 1–4 км, чтобы выполнялось изотермическое приближение. Сглаживание по времени обычно проводится за интервал

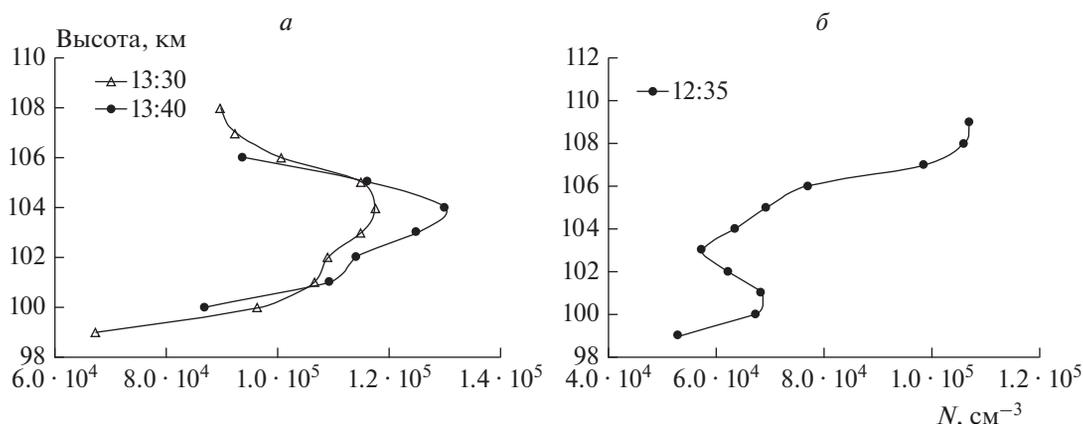


Рис. 2. Примеры реальных высотных профилей электронной концентрации, измеряемых методом ИПН в одном сеансе с измерением температуры, для 24.09.2007 (а) и 04.10.2006 (б).

от 3 до 5 мин. Так как в выражение (1) входит показатель преломления n , то необходимо знание высотного профиля электронной концентрации $N(z)$, где z – истинная высота.

Метод создания ИПН позволяет измерить профиль $N(z)$ непосредственно в этом же сеансе измерений [28, 29]. На рис. 2 показаны примеры реальных высотных профилей электронной концентрации $N(z)$, измеряемых методом ИПН в одном сеансе с измерением температуры, для 24.09.2007 – рис. 2а и 04.10.2006 – рис. 2б. На рис. 2а виден слой E_s на высоте 101 км, на рис. 2б слой E_s присутствует на высоте 100 км. Это видно по увеличению амплитуды рассеянного сигнала. Использование реальных профилей $N(z)$ позволяет определить температуру с высокой точностью. Если же такой возможности нет, то приходится использовать какой-либо модельный профиль. Часто используется профиль электронной концентрации, рассчитанный согласно модели IRI и скорректированный по данным местного ионозонда CADI [30]. С учетом выбранного профиля $N(z)$ определяется коэффициент преломления волны на каждой высоте в исследуемом высотном диапазоне. Одновременно с этим проводится расчет истинных высот z , соответствующих действующим высотам h . Далее, начиная с некоторой высоты h_0 , для четырех последовательно выбранных высот применяется процедура линейной регрессии к функции $\ln(\tau n^2) = -bz + a$, ($b = 1/H$), в процессе которой рассчитывается коэффициент линейной регрессии $b = 1/H$, который дает величину высоты H однородной атмосферы.

На конечном этапе рассчитывается температура нижней термосферы согласно формуле (4). Полученное значение T относится к середине диапазона $\Delta h = h - h_0$. Затем процедура повторяется со смещением на один шаг по высоте, пока не будет пройден весь доступный высотный диапазон. Рассчитывается также коэффициент детермина-

ции R^2 , который показывает, насколько модель линейной регрессии соответствует данным, на которых она построена. На рис. 3 приведены примеры применения процедуры линейной регрессии для функции $\ln(\tau n^2)$ в зависимости от высоты. Рисунок 3а относится к усреднению данных по высоте в диапазоне, равном 4 км. На рис. 3б в качестве примера показано применение линейной регрессии для всего диапазона высот.

Влияние атмосферной турбулентности и спорадических слоев ионизации на релаксацию рассеянного сигнала

Описанная в предыдущем разделе методология определения температуры используется в отсутствие слоя E_s , выраженной атмосферной турбулентности и частичных отражений, которые, как правило, наблюдаются на высотах 60–95 км и представляют собой рассеяние пробных радиоволн естественными неоднородностями электронной концентрации. Частичные отражения уменьшают соотношение сигнал/шум и приводят к увеличению разброса значений амплитуды и, соответственно, времени релаксации ИПН. В результате погрешность измерения температуры растет. Сгладить влияние частичных отражений можно, используя усреднение (сглаживание) по времени полученных высотных профилей $\tau(h)$. Но, как правило, сеансы с частичными отражениями исключаются из обработки.

Влияние слоя E_s заключается в росте времени релаксации τ на высотах этого слоя, что видно на правых панелях рис. 1б. Согласно формуле (1), величина τ пропорциональна массе ионов M_i . В слое E_s присутствуют сравнительно легкие положительные ионы металлов с атомными массами Na (23 а.е.м.), Mg (24), близкими к массам основных атмосферных ионов NO^+ (30) и O_2^+ (32), и более

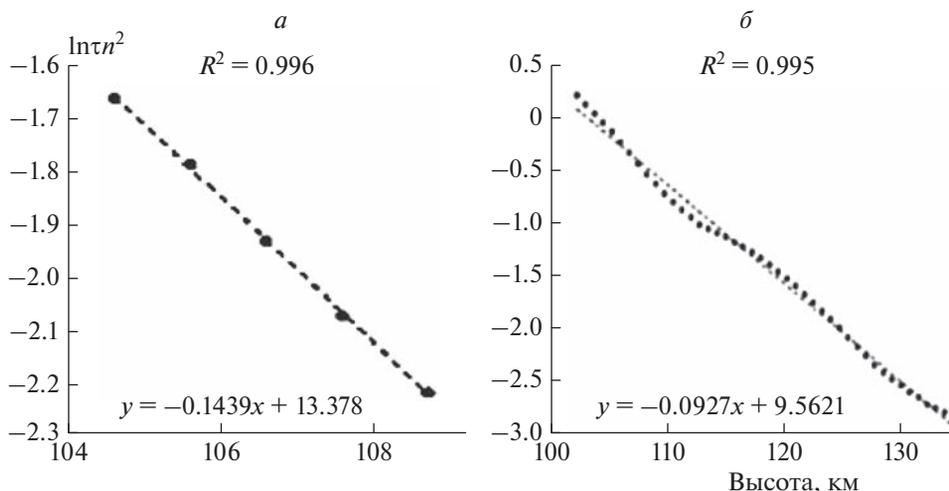


Рис. 3. *а* – Пример применения процедуры линейной регрессии к полученной по результатам измерений функции $\ln\pi n^2$ для скользящего диапазона усреднения по высоте, равного 4 км, 04.10.2007; *б* – то же самое для всего диапазона исследуемых высот при шаге усреднения 0.75 км 02.09.2021.

тяжелые ионы K^+ (39), Ca^+ (40), Fe^+ (56) [31–33]. Хотя кальций не является металлом, но при образовании слоя E_s проявляет себя аналогично ионам металлов [31–33]. В результате с ростом массы ионов на высотах слоя E_s время релаксации ИПН растет, и процедура регрессии, а следом и процедура определения температуры, дают менее достоверные результаты.

Атмосферная турбулентность влияет на неоднородности противоположным образом. В процессе релаксации ИПН она разрушает неоднородности быстрее, чем амбиполярная диффузия, и время релаксации при этом уменьшается по сравнению с диффузионным временем. Это приводит к отклонению зависимости времени релаксации от экспоненциального закона на высотах, близких к турбопаузе, и кажущемуся росту температуры. Сеансы измерений с влиянием указанных факторов, как правило, исключаются из анализа и определения температуры. Однако при кратковременном влиянии слабой турбулентности бывает достаточно увеличить интервал усреднения данных.

Границы диапазона высот измерения температуры определяются из условий выполнения условий теплового равновесия, т.е. при $T_e = T_i = T$ (верхняя граница), и минимального влияния турбулентности (нижняя граница), определяемого уровнем турбопаузы. Из многолетних исследований ионосферы методом создания ИПН следует, что верхняя граница находится на высотах 120–130 км, а уровень турбопаузы варьирует в интервале высот 85–112 км [21, 25, 34].

Отметим, что метод создания ИПН позволяет определять температуру с относительно небольшой погрешностью. Например, в работах [16, 35]

показано, что нарушение теплового равновесия дает погрешность определения температуры, не превышающую 5%, при отношении $T_e/T_i = 1.1$. Незначительную погрешность дает изменение молекулярного и ионного составов с ростом высоты [35]. Погрешность определения действующей высоты h обусловлена длительностью зондирующего импульса, отношением сигнал/шум и другими техническими характеристиками установки. Установлено, что для используемой аппаратуры эта погрешность не превышает 1 км [16]. Пересчет h в истинную высоту увеличивает эту погрешность примерно вдвое, что составляет доли процента. В периоды высокой волновой активности погрешность определения температуры может возрастать до 10% [36].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ

На основе многолетних измерений получено, что в целом на высотах 90–120 км температура изменялась от 100 до 300 К, иногда возрастая до 350 К. В ряде сеансов получены значения температуры ниже 100 К. Регистрация рассеянного сигнала с высоким временным и высотным разрешением показала, что профили температуры на высотах нижней термосферы отличаются большим разнообразием формы [23, 24, 37].

Основные особенности высотного профиля температуры

Примеры характерных высотных профилей температуры в зависимости от истинной высоты z , полученные в разные годы в экспериментах мето-

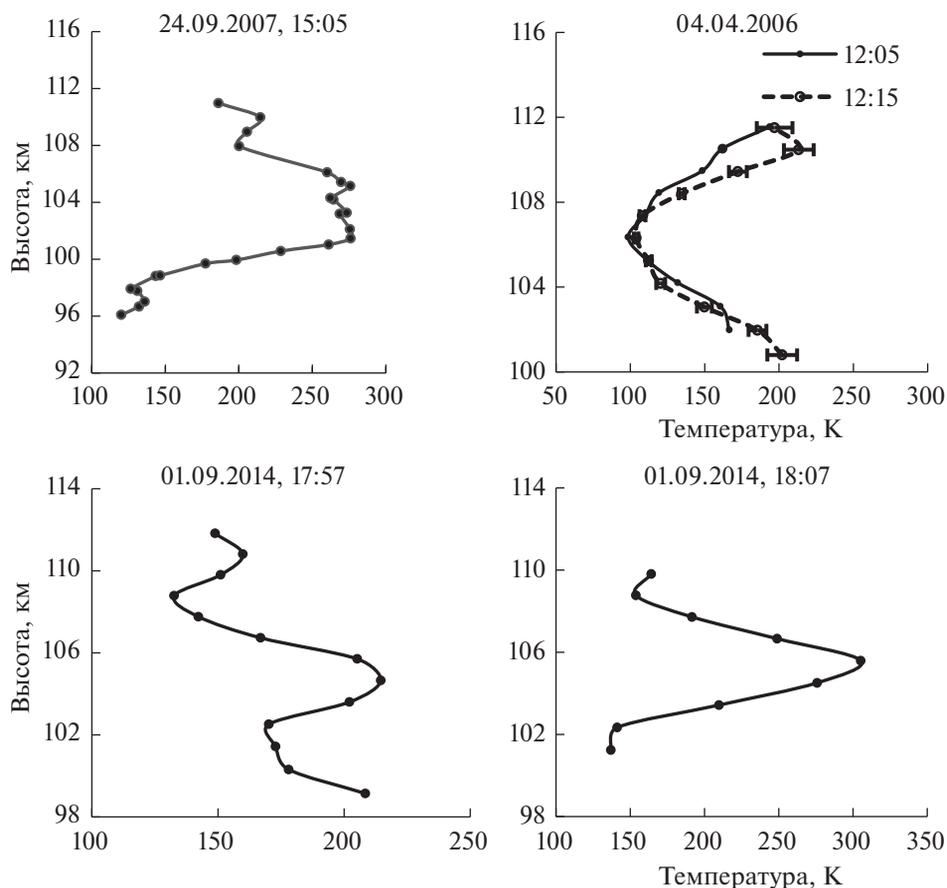


Рис. 4. Примеры характерных высотных профилей температуры с минимумами и максимумами по измерениям 2006 и 2007 гг., усредненные по интервалу времени в 5 мин и диапазону сглаживания в 4 км.

дом ИПН, показаны рис. 4 и 5. На рис. 4 приведены профили, усредненные по интервалу времени в 5 мин и диапазону скользящего сглаживания в 4 км. Это профили, полученные в измерениях 2006, 2007 и 2014 гг., с выраженными минимумами и максимумами температуры. Для расчета профилей температуры, показанных на рис. 4, использовались реальные значения электронной концентрации, измеренные методом ИПН, согласно методике, подробно изложенной в работах [28, 29]. На рис. 5 приведены высотные профили температуры за 02.09.2021 с диапазоном сглаживания времени релаксации по высоте в 0.75 км; каждый приведенный профиль также получен за сеанс измерений длительностью 15 с. Можно выделить несколько характерных типов профиля $T(z)$. Первый тип представляют сравнительно гладкие профили с минимумом или максимумом температуры на некоторой высоте. Такие профили показаны на рис. 4. В работе [38] показано, что отрицательный градиент температуры может служить причиной возникновения гидродинамической неустойчивости. Достаточ-

ным условием ее развития является выполнение критерия $dT/dz < -(10-15)$ К/км.

Отрицательные температурные градиенты неоднократно наблюдались в экспериментах, достигая, а иногда и превышая величину в -20 К/км. В последующие моменты времени наблюдались возмущения атмосферных параметров, проявляющиеся в виде их высотно-временных вариаций [38]. Таким условиям отвечают, например, участки профилей, приведенных на рис. 4. Чередование минимумов и максимумов на профилях обусловлено распространением атмосферных волн в виде акустико-гравитационных и внутренних гравитационных волн (ВГВ) [25, 37]. В результате наблюдаются квазипериодические изменения температуры с ростом высоты с характерным периодом в 4–12 км.

Большую группу составляют нерегулярные профили температуры, примеры которых приведены в работах [20, 37, 38]. Аналогичные профили показаны на рис. 5 (кривые 1). Они получены с использованием высотного профиля электронной концентрации, рассчитанного согласно модели IRI-2016 [30] конкретно для времени прове-

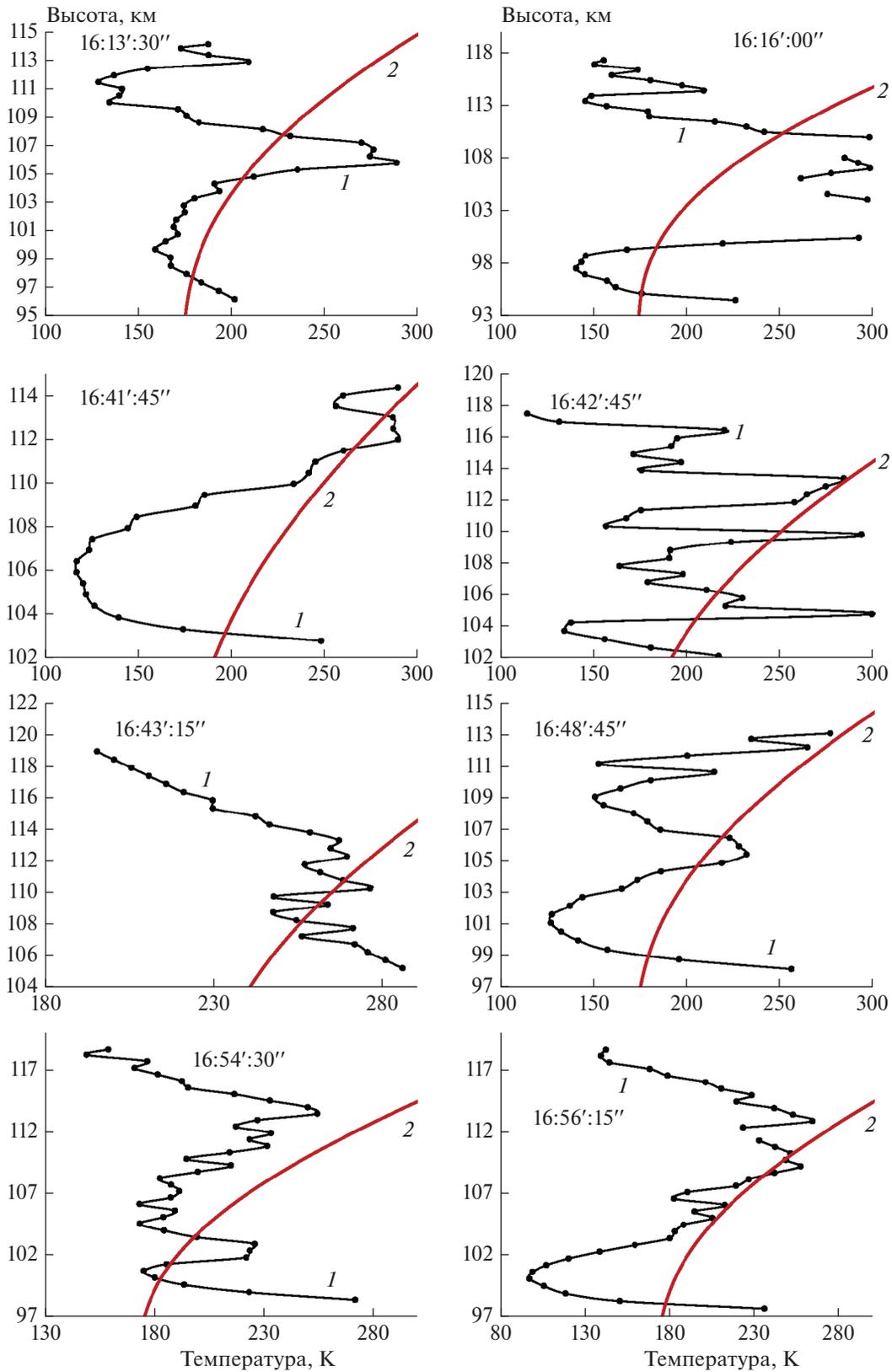


Рис. 5. Высотные профили температуры, полученные в эксперименте 02.09.2021 (кривые 1) диапазоном сглаживания по высоте в 0.75 км; каждый профиль получен за сеанс измерений длительностью 15 с. Кривыми 2 показаны профили, рассчитанные согласно модели MSIS-E-90 для каждого конкретного сеанса измерений.

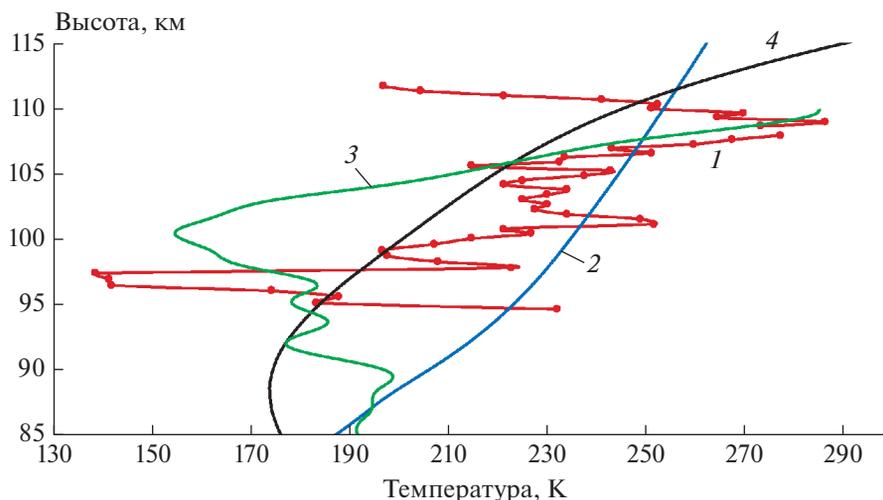


Рис. 6. Сравнение высотных профилей температуры, полученных методом ИПН (кривая 1), измеренных аппаратурой спутника Aura MLS (кривая 2), аппаратурой SABER спутника TIMED (кривая 3) с модельным профилем, рассчитанным согласно MSIS-E-90 (кривая 4).

дения измерений. Кривыми 2 показаны профили температуры, рассчитанные согласно модели MSIS-E-90 [39] для каждого сеанса измерений. Модель MSIS-E-90 является одной из часто используемых эмпирических моделей, описывающих глобальное распределение атмосферных параметров, с помощью которой рассчитываются параметры атмосферы от поверхности земли до высот экзосферы. Она основана на спектрометрических измерениях температуры на ракетах и спутниках и данных радаров некогерентного рассеяния. В целом измеренные методом ИПН профили температуры отличаются от модельных, причем на некоторых высотах отличия могут достигать 100 К. При погрешности измерений температуры, не превышающей 5–10%, можно утверждать, что такая разница между модельным и реальным профилями обусловлена влиянием природных факторов.

На рис. 6 представлено сравнение высотных профилей температуры, полученных методом ИПН (кривая 1), измеренных аппаратурой спутника Aura MLS (кривая 2), аппаратурой SABER спутника TIMED (кривая 3) с модельным профилем, рассчитанным согласно MSIS-E-90 (кривая 4) для сеанса измерений около 13 ч МСК 02.09.2021. Данные аппаратуры SABER [14] взяты для пункта с координатами 55.46° N; 44.92° E, данные аппаратуры Aura [15] – с координатами 56.85° N; 60.62° E. Видно, что профили, полученные разными методами для близких по широте пунктов, в целом заметно различаются, хотя общая тенденция изменения по высоте сохранена. Температурный профиль, полученный методом ИПН, на высотах больше 97 км и меньше 112 км занимает промежуточное положение между профилями,

полученными по спутниковым данным. Глубокий минимум температуры по данным SABER отвечает высоте в 100 км, а полученный методом ИПН сдвинут вниз на 3 км. На некоторых высотах значения температуры у разных профилей близки. Для того чтобы сделать вывод о причине таких различий, авторы планируют провести подобное сравнение по всей имеющейся базе данных по определению температуры, сформированной по измерениям методом ИПН

Одним из важнейших природных факторов, определяющих вариации температуры, является влияние атмосферных волн, распространяющихся в мезосфере и нижней термосфере, на что указывают многие публикации по измерению температуры мезосферы и нижней термосферы [1–10, 40–42]. Мелкомасштабные движения среды также влияют на распределение температуры. Например, на рис. 5 за 02.09.2021 в сеансах 16:42':45" в диапазоне высот 102–118 км температура изменяется с ростом высоты с квазипериодом (масштабом по высоте), равным 2–4 км, а в сеансе 16:43':15" на высотах 107–114 км – с масштабом порядка 1 км. Вероятно, такие высотные изменения температуры связаны с развитием нерегулярной структуры вертикального ветра (вертикальных движений нейтральной компоненты). На высотах нижней ионосферы вплоть до 130 км плазма как пассивная примесь увлекается движением нейтрального газа [43] и скорость плазмы совпадает со скоростью нейтральной среды. В свою очередь, скорость плазмы определяется методом ИПН по измерению фазы сигнала, рассеянного неоднородностями [16, 18]. В работах [44, 45] показано, что высотные профили скорости и температуры, измеренные в одном сеансе, часто нерегу-

лярны, и характер их изменений с высотой может быть как одинаковым, так и противоположным, а периоды вариаций по высоте обоих параметров близки. За 02.09.2021 данные о вертикальной скорости отсутствуют по техническим причинам, однако на основании быстрой в течение минуты смены температурных профилей можно предположить, что в этот период времени должен был происходить интенсивный вертикальный перенос [18].

Выше при обсуждении рис. 4 мы отмечали возможность развития гидродинамических неустойчивостей при отрицательных градиентах температуры, превышающих по величине 10–15 К/км. На рис. 5 в сеансе 16:41':45" температура в нижней линейной части профиля уменьшалась с ростом высоты при градиенте 70 К/км, а через минуту профиль температуры трансформировался в показанный на рис. 5 в сеансе 16:42':45". Перепад температур на соседних высотах достигал 100–150 К. Этот пример можно считать необычным только по величине градиента и перепаду температур, в остальном он типичен для развития неустойчивостей среды при выполнении условия для ее возникновения [38, 42, 44, 45].

Проявление волновых движений во временных вариациях рассеянного сигнала и температуры нижней термосферы

В нижней термосфере распространяются атмосферные волны разных пространственно-временных масштабов, а также существует развитая турбулентность. Горизонтальные и вертикальные движения нейтральной среды и ионосферной плазмы влияют на вариации температуры нижней термосферы во времени, что подтверждается многими исследованиями этой области высот [3, 5, 9, 40, 41, 44]. Многолетние исследования ионосферы методом ИПН показали, что время релаксации рассеянного сигнала флуктуирует по высоте и во времени. Пример вариаций времени релаксации рассеянного сигнала $\tau(z,t)$ в послерассветные часы 13.08.2015 приведен на рис. 7 для высот 100.8, 105 и 112 км. Видно, что значения τ уменьшаются с ростом высоты, что определяется диффузионным характером релаксации ИПН. Видно также влияние атмосферных волн с периодом от 15–20 мин до 2 ч и более. Рост величины τ за интервал времени от 06:15 до 06:45 и за интервал 07:50–08:40 на высотах 105–112 км обусловлен влиянием слоя E_s , образовавшегося в стороне от пункта наблюдения и пересекавшего диаграмму направленности приемной антенны. Естественно считать, что волнообразные вариации времени релаксации должны проявляться и в вариациях температуры. На рис. 8 показаны зависимости температуры от времени (кривые I) на высотах 100 (а, в) и 105 км (б, г), полученные в измерениях

02.09.2021 (рис. 8а и б) и 25.10.2018 (рис. 8в и г). Линиями 2 на каждом рисунке показаны полиномиальные тренды шестого порядка. Использование трендов представляет собой простейший приближенный способ оценки периодов квазиволновых движений. Пропуски в данных обусловлены приближением уровня турбопаузы к высоте 100 км (рис. 8а и 7в) и появлением anomalно низких значений времени релаксации, обусловленных атмосферной турбулентностью, которые при расчете температуры исключались. Каждая точка на рис. 8а, б получена путем усреднения времени релаксации (температуры) за пятиминутный интервал, в то время как данные, представленные на рис. 8в, г, получены при двухминутном усреднении. На рис. 8 наряду с типичными вариациями температуры в 20–50 К видны глубокие ее вариации, достигающие в отдельные моменты времени 150 К. При этом средние (как и медианные) значения температуры 18.10.2018 и 02.09.2021 составили $\langle T \rangle \approx 175$ К на высоте 100 км. На высоте 105 км средние значения температуры заметно различались и были равны $\langle T \rangle \approx 193$ и 180 К в измерениях 18.10.2018 и 02.09.2021 соответственно.

В работе [46] на основе одновременных измерений вертикальной скорости плазмы, температуры и плотности нейтральной атмосферы на высотах 80–110 км проведено моделирование характеристик ВГВ на основе линейной теории их свободного распространения в безграничной изотермической невозмущенной атмосфере. Оно показало, что рассчитанные на основе поляризационных соотношений для низкочастотных волн по измеренным амплитудам вертикальной скорости относительные амплитуды вариаций температуры и плотности атмосферы хорошо соответствуют измерениям для волн с периодами в 15–30 мин. Сопоставление более длительных периодов волновых движений, постоянно наблюдающихся в вариациях температуры, с выводами теории требует решения более сложной задачи с учетом неизомеричности и горизонтальных движений среды.

4. ВАРИАЦИИ ТЕМПЕРАТУРЫ НИЖНЕЙ ТЕРМОСФЕРЫ ВО ВРЕМЯ РАЗНЫХ ПРИРОДНЫХ ЯВЛЕНИЙ

По результатам исследований температуры нижней термосферы методом создания ИПН отметим характерные особенности ее изменения в разных условиях.

Сезонно-суточные вариации температуры

До 2002 г. измерения температуры, как правило, проводились в зимние, осенние и весенние месяцы по 15–20 дней каждый месяц. В последующие годы на стенде СУРА удавалось организо-

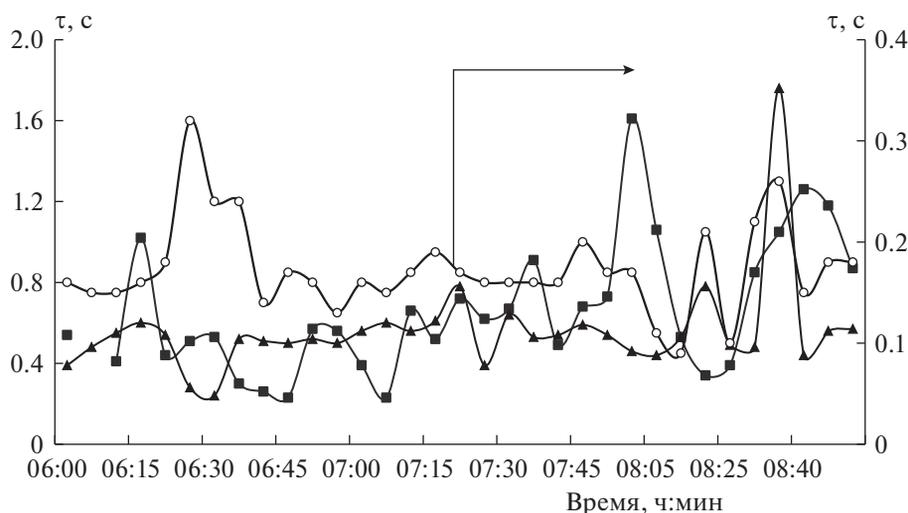


Рис. 7. Изменение времени релаксации рассеянного сигнала (τ) во времени для трех высот: 100 км (треугольники), 105 км (квадраты) и 112 км (кружки) для 13.08.2015.

вать преимущественно летние и осенние эксперименты, связанные с созданием ИПН, в течение нескольких дней в месяц. Основной вывод, следующий из полученных за это время данных, заключается в изменчивости температуры ото дня ко дню и в течение дня, что хорошо видно из рис. 4, 5, 8. Изменчивость температуры обусловлена изменением состояния атмосферы и ионосферы, разными условиями для распространения атмосферных волн, изменением уровня турбопаузы. Этим, на наш взгляд, в основном объясняются различия в результатах измерения температуры в разных наблюдательных пунктах. Существуют различия в профилях температуры в разные сезоны года. По результатам измерений осенью и зимой 1990–1991 гг. отмечался рост температуры на высотах $h < 100$ км [47]. Частично это связано с проявлением турбулентности, частично — с вариациями атмосферных и ионосферных параметров (давления, молекулярного и ионного состава, частоты соударений ионов с нейтралами и др.). В индивидуальных измерениях в разные дни на одной и той же высоте разброс значений температуры может достигать 50–100 К.

Заходно-восходные явления, солнечное затмение

Значительные вариации температуры имеют место при заходно-восходной перестройке ионосферы и во время солнечных затмений. В июне 2000 г., в августе 2001 и 2015 гг. были проведены измерения методом ИПН с 19 ч вечера до 6 ч утра следующего дня. Особенности активной заходно-восходной перестройки динамического режима ионосферы отражены в изменении высотных профилей вертикальной скорости [18, 21–24]. Волнообразный характер высотных профилей

температуры и вертикальной скорости с периодом по высоте порядка 12–15 км во время захода и восхода Солнца связан, как принято считать, с генерацией ВГВ при прохождении солнечного терминатора через пункт наблюдения [48]. Подобные изменения в нижней термосфере происходят и во время затмений Солнца, когда ионосфера находится в состоянии сумерек [27].

Геомагнитная активность

Сравнение результатов измерений в периоды с разной геомагнитной активностью показало, что в относительно спокойные дни при значениях геомагнитного индекса $K_p < 3$ разброс значений температуры относительно среднего значения на высотах 102–104 км составлял от 10 до 20%, а в дни с $K_p = 4.5$ он увеличивался до 40% [36]. В возмущенные дни имела место значительная изменчивость температуры в течение дня.

Профили температуры с глубоким минимумом показаны на рис. 4 (04.04.2006, сеансы 12:05, 12:14) и рис. 5 (02.09.2021, сеансы 16:13':30", 16:16':00", 16:41':45", 16:48':45", 16:56':15"). Вероятно, их можно квалифицировать как температурные инверсии. Температурные инверсии наблюдались лидарами в мезосфере на высотах от 70 до 90 км [49]. Возможно, инверсии могут образовываться и на высотах $h > 100$ км в нижней термосфере [50]. Отрицательные градиенты температуры на нижних ветвях этих профилей превышали адиабатический градиент, что является условием развития неустойчивостей. Подобные температурные профили могут создаваться, когда возникает поток тепла вверх из области диссипации ВГВ, что может способствовать повышению тем-

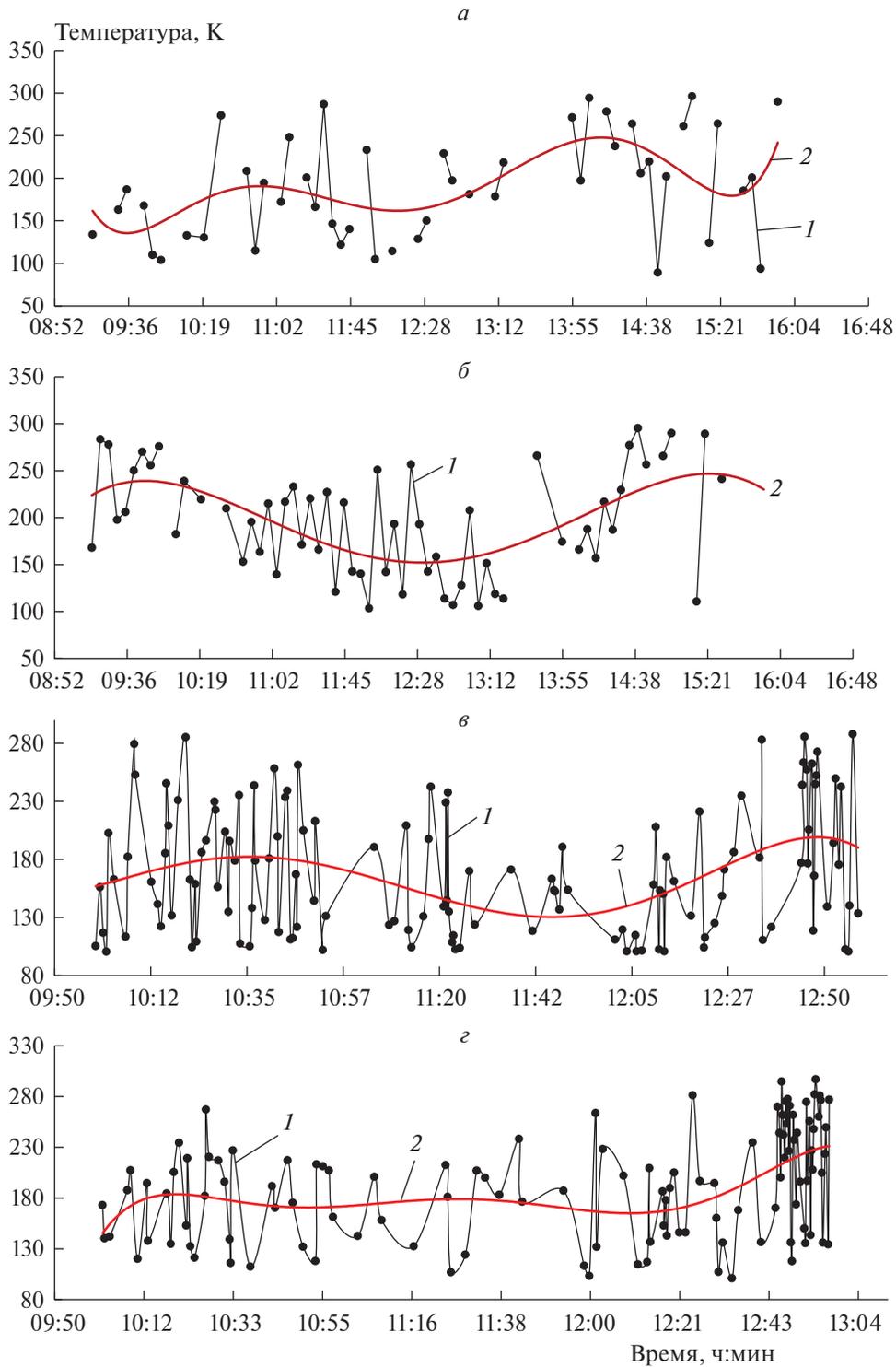


Рис. 8. Временные вариации температуры на высотах 100 (*a*) и 105 км (*б*) для 02.09.2021 и для тех же высот 26.10.2018 (*в* и *г*), полученные в эксперименте (кривые 1). Кривые 2 – полиномиальные тренды шестого порядка.

пературы в нижней части профиля. Это, вероятно, является следствием существования молекулярных или ионных слоев, которые время от времени наблюдаются на этих высотах [50, 51].

И, наконец, большое значение имеет правильное задание высотного профиля электронной концентрации, который играет ключевую роль в методике определения температуры. Возможность из-

мерения электронной концентрации в одном сеансе с температурой позволяет получить реалистичный профиль температуры с минимальной погрешностью измерений [16]. Использование модельного профиля электронной концентрации часто увеличивает погрешность.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подробно описана разработанная и усовершенствованная нами на основе многолетних измерений параметров ионосферы и нейтральной атмосферы методика определения температуры нижней термосферы. Сформулированы требования к проведению измерений методом, основанным на создании ИПН. Приведены основные особенности регистрации сигналов, рассеянных неоднородностями, и обработки данных. Показано, что нижний предел определения температуры по высоте ограничен уровнем турбопаузы, верхний — условием выполнения теплового равновесия. Приведены примеры высотно-временных вариаций температуры. Высотное и временное разрешение порядка 1 км и 15 с, соответственно, позволяют изучать как быстрые, так и медленные процессы в нижней термосфере. Продемонстрирована большая изменчивость температуры на высотах 90–130 км в течение суток и ото дня ко дню, обусловленная распространением атмосферных волн с периодами, составляющими от 5–10 мин до нескольких часов.

Показано, что вертикальные профили температуры обладают большим разнообразием. Получены гладкие монотонные профили, профили с температурным минимумом и максимумом, а также профили с нерегулярным изменением температуры с ростом высоты. На основании наших исследований сделан вывод о том, что нерегулярность профиля может быть связана с процессами, происходящими в нижней термосфере и мезосфере. Такими процессами являются: атмосферная турбулентность, влияющая на температуру ниже уровня турбопаузы, находящегося на высотах 85–110 км; атмосферные волны, в том числе ВГВ с вертикальным масштабом волны 4–15 км, и гидродинамические неустойчивости среды.

Полученные профили температуры в большинстве случаев отличались от эмпирических профилей, рассчитанных согласно модели MSIS-E-90. Одной из причин этого является усредненный характер модели, в которой невозможно учесть быстрые и мелкомасштабные вариации параметров атмосферы. Другая причина различий — использование реального профиля электронной концентрации при определении температуры методом ИПН, включающего мелкомасштабные изменения реального высотного профиля электронной концентрации. В целом результаты измерений температуры методом ИПН на высотах 90–130 км дают

сложную картину ее высотно-временных вариаций, отражающую процессы, происходящие в ионосфере и нейтральной атмосфере.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российским научным фондом по проекту № 20-17-00050. Стенд СУРА поддерживается в рабочем состоянии в рамках выполнения проекта № FSWR-2023-0038 по базовой части госзадания Министерства образования и науки Российской Федерации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Lubken F.-J., von Zahn U., Manson A. et al.* // *J. Atmos. Terr. Phys.* 1990. V. 52. № 10-11. P. 955.
2. *Mertens C.J., Schmidlin F.J., Goldberg R.A. et al.* // *Geophys. Res. Lett.* 2004. V. 31. № 2. P. L03105.
3. *Schmidlin F.J.* // *J. Geophys. Res.* 1991. V. 96. № D12. P. 22673.
4. *Кащеев Б.Л., Лысенко И.А.* // *Ионосферные исслед.* 1989. № 47. С. 44.
5. *Offermann D., Goussev O., Kalicinsky C. et al.* // *J. Atmos. Sol.-Terr. Phys.* 2015. V. 135. № 12. P. 1.
6. *Beig G.* // *J. Geophys. Res. Atmos.* 2011. V. 116. P. A00H12.
7. *Perminov V.I., Semenov A.I., Medvedeva I.V., Zheleznov Y.A.* // *Adv. Space Res.* 2014. V. 54. № 12. P. 2511.
8. *She C.Y., Songsheng Chen, Zhilin Hu et al.* // *Geophys. Res. Lett.* 2000. V. 27. № 20. P. 3289.
9. *Шефов Н.Н., Семенов А.И., Хомич В.Ю.* *Излучение верхней атмосферы — индикатор ее структуры и динамики* РАН. М.: ГЕОС, 2006.
10. *Neuber R., von der Gathen P., von Zahn U.* // *J. Geophys. Res.* 1988. V. 93. № 9. P. 11093.
11. *Kirkwood S.* // *J. Geophys. Res.* 1996. V. 101. № A3. P. 5133.
12. *Nozawa S., Kawahara T.D., Saito N. et al.* // *JGR: Space Phys.* 2014. V. 119. № 1. P. 441.
13. *Kofman W., Lathuillere C., Pibaret B.* // *J. Atmos. Terr. Phys.* 1986. V. 48. № 9–10. P. 837.
14. https://saber.gats-inc.com/browse_data.php
15. https://disc.gsfc.nasa.gov/datasets/ML2T_004/summary
16. *Беликович В.В., Бенедиктов Е.А., Толмачёва А.В., Бахметьева Н.В.* *Исследование ионосферы с помощью искусственных периодических неоднородностей.* Н. Новгород: Изд-во ИПФ РАН, 1999.
17. *Толмачева А.В., Григорьев Г.И.* // *Хим. физика.* 2021. Т. 40. № 5. С. 91.
18. *Бахметьева Н.В., Жемаков И.Н.* // *Хим. физика.* 2022. Т. 41. № 10. С. 65.
19. *Бахметьева Н.В., Григорьев Г.И., Калинина Е.Е.* // *Хим. физика.* 2022. Т. 42. № 4. С. 73.
20. *Tolmacheva A.V., Bakhmetieva N.V., Grigoriev G.I., Egerev M.N.* // *Adv. Space Res.* 2019. V. 64. № 10. P. 1968.
21. *Бахметьева Н.В., Григорьев Г.И., Виноградов Г.Р. и др.* // *Геомагнетизм и аэронавигация.* 2021. Т. 61. № 6. С. 777.

22. Бахметьева Н.В., Бубукина В.Н., Вяхирев В.Д., Калинина Е.Е., Комраков Г.П. // Изв. вузов. Радиофизика. 2016. Т. 59. № 10. С. 873.
23. Бахметьева Н.В., Вяхирев В.Д., Григорьев Г.И. и др. // Геомагнетизм и аэронавигация. 2020. Т. 60. № 1. С. 99.
24. Bakhmetieva N.V., Grigoriev G.I., Tolmacheva A.V., Zhetysaykov I.N. // Atmosphere. 2019. V. 10. № 8. P. 450.
25. Bakhmetieva N.V., Grigoriev G.I. // Atmosphere. 2022. V. 13. № 9. P. 1346.
26. Banks P.M., Kockarts G. Aeronomy; Part A. University of California: Academic Press, 1973.
27. Гуревич А.В. // УФН. 2007. Т. 177. № 11. С. 1145.
28. Беликович В.В., Бахметьева Н.В., Калинина Е.Е., Толмачева А.В. // Изв. вузов. Радиофизика. 2006. Т. 49. № 9. С. 744.
29. Толмачева А.В., Бахметьева Н.В., Вяхирев В.Д., Бубукина В.Н., Калинина Е.Е. // Изв. вузов. Радиофизика. 2011. Т. 54. № 6. С. 403.
30. https://ccmc.gsfc.nasa.gov/modelweb/models/iri2016_vitmo.php
31. Huuskonen A., Nygren T., Jalonen L.L. et al. // Geophys. Res. 1988. V. 93. № A12. P. 14603.
32. Kopp E. // J. Geophys. Res. Space Phys. 1997. V. 102. № A5. P. 9967.
33. Бахметьева Н.В., Беликович В.В., Егерев М.Н., Толмачева А.В. // Изв. вузов. Радиофизика. 2010. Т. 53. № 2. С. 77.
34. Tolmacheva A.V., Bakhmetieva N.V., Grigoriev G.I., Egerev M.N. // Adv. Space Res. 2019.V. 64. № 10. P. 1968.
35. Бенедиктов Е.А., Беликович В.В., Гребнев Ю.Н., Толмачева А.В. // Геомагнетизм и аэронавигация. 1993. Т. 33. № 5. С. 170.
36. Беликович В.В., Бенедиктов Е.А., Толмачева А.В. // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2002. Т. 38. № 1. С. 102.
37. Толмачева А.В., Беликович В.В., Калинина Е.Е. // Геомагнетизм и аэронавигация. 2009. Т. 49. № 2. С. 254–261.
38. Бахметьева Н.В., Григорьев Г.И., Толмачева А.В. // Изв. вузов. Радиофизика. 2010. Т. 53. № 11. P. 695.
39. https://ccmc.gsfc.nasa.gov/modelweb/models/msis_vitmo.php
40. Голубков Г.В., Адамсон С.О., Борчевкина О.П. и др. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 5. С. 531.
41. Tsuda T., Kato S., Yokoi T. et al. // Radio Sci. 1990. V. 25. № 5. P. 1005.
42. Толмачева А.В., Бахметьева Н.В., Григорьев Г.И. // Хим. физика. 2013. Т. 32. № 9. С. 89.
43. Гершман Б.Н. Динамика ионосферной плазмы. М.: Наука, 1974.
44. Tolmacheva A.V., Bakhmetieva N.V., Grigoriev G.I., Kalinina E.E. // Adv. Space Res. 2015. V. 56. № 6. P. 1185.
45. Бахметьева Н.В., Бубукина В.Н., Вяхирев В.Д. и др. // Хим. физика. 2017. Т. 36. № 12. С. 44.
46. Бахметьева Н.В., Беликович В.В., Григорьев Г.И., Толмачева А.В. // Изв. вузов. Радиофизика. 2002. Т. 45. № 3. С. 233.
47. Tolmacheva A.V., Belikovich V.V. // Intern. J. Geomagn. Aeron. 2004. V. 5. GI1008; <https://doi.org/10.1029/2004GI000061>
48. Сомсиков В.М. Солнечный терминатор и динамика атмосферы. Алма-Ата: Наука, 1983.
49. Szweczyk A., Strelnikov B., Rapp M. et al. // Ann. Geophys. 2013. V. 31. № 5. P. 775.
50. Liu X., Maura J., Hagan E., Roble R.G. // J. Geophys. Res. 2000. V. 105. № D10. P. 12381.
51. Delgado R., Friedman J.S., Fentzke J.T. et al. // J. Atmos. Solar Terr. Phys. 2012. V. 74. № 11. P. 11.

УДК 550.510.535

УВЕЛИЧЕНИЕ ОШИБОК ПОЗИЦИОНИРОВАНИЯ С РОСТОМ МОЩНОСТИ СИГНАЛА ГЛОБАЛЬНЫХ НАВИГАЦИОННЫХ СПУТНИКОВЫХ СИСТЕМ

© 2023 г. Г. В. Голубков^{1, 2*}, А. А. Берлин¹, Ю. А. Дьяков^{1, 3}, И. В. Карпов⁴,
А. А. Лушников⁵, И. Г. Степанов¹, М. Г. Голубков¹

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва, Россия

²Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

³Исследовательский центр экологических изменений, Академия Синика, Тайбэй, Тайвань

⁴Калининградский филиал Института земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова Российской академии наук, Калининград, Россия

⁵Геофизический центр Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: golubkov@chph.ras.ru

Поступила в редакцию 04.04.2023;

после доработки 15.05.2023;

принята в печать 22.05.2023

В настоящее время разработчиками глобальных навигационных спутниковых систем (ГНСС) прилагаются значительные усилия для решения ряда фундаментальных проблем. Однако игнорирование исследователями целой совокупности протекающих в ионосфере неравновесных физико-химических процессов, которые влияют на распространение спутниковых сигналов, зачастую не позволяют продвинуться в их решении. В данной работе обсуждены основные химические реакции, протекающие в нижней ионосфере Земли с участием ридберговских состояний молекул O_2 , N_2 и NO . Дано объяснение физической причины временной задержки спутникового сигнала, приводящей к ошибкам позиционирования ГНСС. Предложен квантовый подход, посредством которого осуществляется переход от традиционного представления о распространении радиоволн к движению соответствующих фотонов. В этом случае эффективное время задержки при резонансном рассеянии фотона определяется характерным временем жизни промежуточных автоионизационных состояний колебательно-возбужденных ридберговских комплексов. Величина времени жизни обусловлена наличием сильной неадиабатической связи электронного и ядерного движений в промежуточных состояниях комплекса, которая не зависит от напряженности внешнего поля, создаваемого передатчиком ГНСС.

Ключевые слова: D- и E-слои ионосферы, колебательно-возбужденные ридберговские комплексы, автоионизационные состояния, глобальные навигационные спутниковые системы, ошибки позиционирования, мощность сигнала.

DOI: 10.31857/S0207401X23100072, EDN: PFXHCK

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования физико-химических процессов, протекающих в нижних слоях атмосферы на высотах 30–40 км и обусловленных влиянием различных природных явлений (землетрясений, извержений вулканов, метеорологических возмущений и т.д.), осуществляются с помощью радиозондов, радиопилотов и рядом других способов. На больших высотах используются ракеты и искусственные спутники Земли, в которых измерительные приборы обладают более высокой чувствительностью.

Ракеты с малым весом научной аппаратуры обычно поднимаются до высот 60–120 км и назы-

ваются *метеорологическими*. Приборы здесь размещаются в носовой части ракеты, которая при достижении необходимой высоты отделяется от корпуса ракеты и опускается вниз на поверхность Земли с помощью парашюта. Во время полета специальные датчики автоматически передают результаты измерений на Землю. Для измерений на больших высотах ионосферы (до 750 км и выше) используются баллистические *геофизические* ракеты, в которых научная аппаратура также доставляется на Землю парашютами.

При проведении таких исследований широко применяются глобальные навигационные спут-

никовые системы (ГНСС), среди которых наиболее распространенными являются ГЛОНАСС (Россия), Beidou (Китай) и GPS (США). Эти системы используются для определения местоположения в любой точке земной поверхности с применением специальных навигационных или геодезических приемников. Однако они обладают характерными особенностями, которые затрудняют проведение систематического анализа полученных результатов.

В первую очередь это касается эффекта “временной задержки” спутниковых сигналов [1–3]. Ионосферные задержки сигналов спутниковой навигации и связанные с ними ошибки позиционирования определяются распределением электронной концентрации на трассе спутник–приемник [4]. Длительные исследования вертикальной структуры ионосферы с применением ионозондов позволили накопить обширный экспериментальный материал о распределении электронной концентрации ниже максимума F2-слоя ионосферы (т.е. ниже 400 км от поверхности Земли). Распределение электронов выше этого максимума известно значительно хуже. Отдельные данные о структуре ионосферы выше 400 км были получены в экспериментах по зондированию ионосферы со спутников. Однако этих данных вследствие отсутствия регулярных наблюдений оказалось недостаточно для эмпирического моделирования структуры верхней ионосферы [5]. В настоящее время активно проводятся наблюдения, позволяющие восстановить структуру верхней ионосферы по сигналам спутников GPS, принимаемых как на спутниках, находящихся на околоземных орбитах, так и на наземных станциях. Так, например, в работе [6] была рассмотрена задача о восстановлении профиля электронной концентрации в ионосфере по наблюдениям сигналов спутников GPS, которая решалась методами томографии [7]. Как было отмечено в обзоре [8], исторически этот метод серьезно разрабатывался в России и активно применяется вплоть до настоящего времени [9–14].

Использование методов оценки ионосферных задержек [15–17] и соответствующей корректировки спутниковых сигналов [18, 19] значительно способствует улучшению точности измерений и навигации. Такие исследования представляют собой быстро развивающееся направление работ по изучению околоземного пространства и активно ведутся в ряде научных центров, где накоплен обширный материал по различным алгоритмам восстановления профиля электронной концентрации и созданы методы прогнозирования космической погоды [11–13, 20–30].

Глобальные навигационные спутниковые системы позволяют определять географическое положение точки в пространстве, которое задается с

помощью трех координат. С этой целью должны приниматься постоянно передающиеся сигналы от различных искусственных спутников, вращающихся по 12-часовым орбитам на высотах от 20 до 30 тыс. км. С помощью полученной информации определяется расстояние до каждого спутника, их взаимное расположение и вычисляются координаты точки. Поэтому приемник должен принимать сигналы от не менее чем трех ближайших к нему спутников. Например, для определения координат на поверхности Земли в открытой местности достаточно трех спутников, а для определения высоты над уровнем моря – четырех. Заметим, что двумя основными рабочими гражданскими частотами системы GPS являются

$$L_1 = 1.57542 \text{ ГГц} \text{ и } L_2 = 1.22760 \text{ ГГц.} \quad (1)$$

По данным спутниковых сигналов восстанавливается интегральное содержание электронов на трассе спутник–приемник. Восстановление профиля требует решения обратной задачи на основании систематической априорной информации, которая в настоящее время фактически отсутствует. Как правило, здесь применяется простое теоретическое описание, основанное на упрощенных модельных представлениях о процессах ионизации и диффузии электронов в ионосфере. В рамках таких представлений практически во всех эмпирических подходах используются функциональные зависимости электронной концентрации от высоты.

Рост ошибок позиционирования систем ГНСС в периоды повышения солнечной активности может происходить как в течение короткого (продолжительностью 15–40 мин), так и длительного времени (на протяжении нескольких часов). В первом случае ошибки возникают за счет излучения, приходящего от солнечной вспышки, либо в момент прохождения солнечного терминатора [31, 32]. Второй вариант реализуется через 30–36 ч после момента вспышки и инициируется процессами в ионосфере либо в периоды метеорологических возмущений [33]. При более сильных геомагнитных возмущениях сигнал на приемнике GPS может полностью исчезать на достаточно продолжительное время [14]. Так, например, по данным, полученным в обсерватории Сао-Луис (Бразилия) в период с 16.00 15 сентября по 01.00 16 сентября 2011 года, сигнал GPS на приемнике 5 раз спорадически исчезал на 5–30 мин. При этом горизонтальная ошибка позиционирования на протяжении этих суток существенно превышала величину 50 м [34]. Тем не менее позиционирование по сигналам ГНСС в настоящее время активно развивается и позволяет получать достаточно высокие показатели точности. Это достигается за счет увеличения числа спутников над приемником, коррекции их часов и использования другой дополнительной информации [18, 35].

Все вышесказанное свидетельствует о том, что на данный момент понимание физических причин задержки радиосигналов в ионосфере ограничивается недостатками экспериментальных данных о параметрах среды в возмущенных условиях, а также упрощенным представлением о взаимодействии электромагнитных волн со средой распространения в ионосферной плазме, содержащей ридберговские атомы и молекулы [15, 36–38].

Следующим явлением, заслуживающим внимания, является увеличение мощности сигнала GPS, приходящего на приемник в период повышения солнечной активности. Так, в работе [14] приведены результаты измерений временных зависимостей мощностей сигнала GPS и интегрального числа отказов на приемнике во время геомагнитного возмущения 15 июля 2000 года. Наблюдалось увеличение интенсивности принимаемого сигнала по отношению к мощности сигнала передатчика приблизительно в три раза. Более того, с ростом интенсивности принимаемого сигнала происходило увеличение и интегрального числа отказов. Объяснения причины такого поведения интенсивностей авторами, по существу, не было дано.

Интересные результаты были получены радиозатменным методом, когда сигнал на частоте L_1 передавался со спутника GPS на спутники FORMOSAT-3/COSMIC [39]. Специфическое поведение отношения сигнал/шум наблюдалось на высотах от 60 до 110 км. По нашему мнению, основными физическими причинами возникновения сцинтилляций являются следующие. Во-первых, это связано с хаотичным движением нейтральной частицы среды, приводящим к случайным сдвигам энергетического уровня ридберговского комплекса (так называемый “динамический хаос” [40]). Во-вторых, это пульсации солнечного ветра и иницилируемые ими атмосферные ветры, приводящие к неоднородному распределению плотности нейтральной среды по высоте.

Таким образом, в периоды повышения солнечной активности и формирования геомагнитных возмущений в ионосфере Земли происходят неконтролируемые спорадические нарушения сигналов глобальных навигационных спутниковых систем, что обусловлено групповыми задержками при распространении электромагнитного излучения через среду, а также неконтролируемым фазовым сбоем сигналов, приходящих на приемник. Поэтому в работе навигационных систем широко используются приемные устройства, проводящие усреднение по времени.

Наука о резонансном взаимодействии электромагнитных волн с квантовой средой, содержащей орбитально вырожденные ридберговские молекулярные комплексы, которые заселяются в D- и E-слоях ионосферы в периоды повышения

солнечной активности и ответственны за задержку сигналов спутниковой группировки, в последние годы активно развивается [38]. Радиационные переходы между состояниями этих комплексов приводят к задержке спутниковых сигналов позиционирования и создают дополнительное некогерентное сверхфоковое СВЧ-излучение. Это излучение играет важную роль в ряде современных направлений исследований (аэронавигации, космической погоды, биологии и медицины), а также широко используется в различных научно-технических приложениях, связанных с дистанционным зондированием [41]. Они включают: дистанционную пассивную локацию влажности почв и солености вод мирового океана; дистанционное радиозондирование электромагнитных свойств приповерхностных слоев Земли для определения их структуры и состава; спутниковый мониторинг состояния атмосферы и многие другие.

Поиск решений, обеспечивающих устойчивость работы систем ГНСС, является фундаментальной научно-технической проблемой. Одно из таких решений сводится к повышению мощности передатчика спутникового сигнала, что, по мнению исследователей, значительно расширяет возможности коррекции сигнала. При этом рост мощности передаваемого сигнала может осуществляться не только за счет непосредственного увеличения мощности передатчика, но и в результате применения узконаправленной антенны (фазированной решетки). Это позволяет сконцентрировать излучение передатчика в 200-мильном радиусе на поверхности Земли, т.е. резко уменьшить телесный угол распространения сигнала и значительно увеличить число приходящих фотонов [42–48].

В действительности, наиболее важными факторами воздействия на задержку спутникового сигнала являются природные явления, связанные с возмущением состояний ионосферы и верхней атмосферы. Они принципиально не могут быть объяснены в рамках существующих теоретических подходов (и особенно с помощью широко известной модели Клобучара [49] и ее различных модификаций и приложений [50–55]). Решение проблемы точного позиционирования возможно только с учетом всей совокупности физико-химических процессов, приводящих к задержке спутникового сигнала. Экспериментально радиозатменным методом было доказано, что слой атмосферы, в котором преимущественно это происходит, расположен на высоте от 60 до 110 км над поверхностью Земли [39].

Настоящая работа посвящена физическому обоснованию наблюдаемых явлений, опирающемуся на влияние физико-химических плазменных процессов, протекающих в нижней ионосфере Земли [38]. Раздел 2 статьи посвящен изложению физической причины задержки сигналов

ГНСС, определяющейся динамикой вибронного обмена между основным и колебательно-возбужденными состояниями промежуточного автоионизационного комплекса. В разд. 3 изложена формальная теория рассеяния фотонов на ридберговских комплексах и представлены методы построения волновых функций начального, промежуточного и конечного состояний. Проанализирована структура вибронных поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) орбитально вырожденных ридберговских комплексов $XU^{**}-M$ с учетом колебательно-возбужденных состояний молекул нейтральной среды M , которые состоят преимущественно из молекул азота N_2 и кислорода O_2 . В разд. 4 статьи приведены основные выводы резонансной теории рассеяния фотонов и проанализированы условия заселения промежуточных автоионизационных состояний комплекса $XU^{**}-M$ при поглощении фотона. Перспективы дальнейшего развития теории и разнообразных приложений сформулированы в Заключение.

2. ЗАДЕРЖКА СПУТНИКОВЫХ СИГНАЛОВ

Так как среда распространения сигнала ГНСС в D- и E-слоях ионосферы обладает резонансными квантовыми свойствами по отношению к несущей частоте ν , то для описания распространения сигнала необходим квантовый подход, т.е. переход от представления о распространении радиоволн к движению фотонов [15]. Скорость всех компонентов сигнала GPS, например, здесь кратна стандартной скорости осцилляторов, соответствующей стандартной частоте: 10.23 МГц. Период повторения чипа (Repetition Period) для C/A-кода (Coarse/Acquisition) равен $T = 0.001$ с. Поскольку мощность передатчика W является постоянной величиной и энергия чипа составляет WT , то энергия одного фотона для несущей частоты $\nu = L_1 = 1.57542$ ГГц равна

$$\varepsilon_p = 2\pi\hbar\nu, \quad (2)$$

где один чип содержит

$$N = WT/(2\pi\hbar\nu) \gg 1 \quad (3)$$

фотонов. Так как характерные времена поглощения фотона при резонансном рассеянии на ридберговском комплексе $\sim 10^{-15}-10^{-14}$ с и время жизни электрона в промежуточном резонансном автоионизационном состоянии ридберговского комплекса $\sim 10^{-10}$ с много меньше T , то напряженность электрического поля, создаваемого передатчиком, можно считать постоянной величиной для полного числа фотонов N в чипе. Время прохождения чипа через слой толщиной 30 км составляет $\sim 10^{-5}$ с, а скорость отклика среды значительно выше скорости модуляции несущей частоты.

Поэтому структура сигнала GPS за такие характерные времена сохраняется. Полагая, что длины волн спутникового сигнала относятся к дециметровому диапазону, что много больше размера комплекса, все переходы можно рассматривать в дипольном приближении, представляя оператор электромагнитного взаимодействия с комплексом в виде [15]

$$\mathbf{V} = -\mathbf{fD}, \quad (4)$$

где \mathbf{f} – оператор напряженности поля, а \mathbf{D} – оператор дипольного момента комплекса $XU^{**}-M$.

Для выяснения физической причины задержки сигнала GPS достаточно ограничиться рассмотрением трех основных типов переходов [15]. К первому относится собственное спонтанное СВЧ-излучение нейтральной квантовой среды, которое является некогерентным и распространяется в произвольном направлении. Второй тип – прямой переход $N_0 \rightarrow N_0 + 1$ в нижележащее состояние комплекса $XU^{**}-M$, соответствующий вынужденному излучению фотона на несущей частоте ν . Это приводит к рождению дополнительных фотонов и наблюдаемому экспериментально увеличению мощности принимаемого сигнала GPS. Впервые этот эффект был экспериментально обнаружен в работе [14].

Третий тип переходов отвечает резонансному рассеянию фотона на комплексе $XU^{**}-M$, которое протекает через три стадии. Время первой стадии составляет $\sim 10^{-15}-10^{-14}$ с и отвечает вынужденному поглощению фотона с переходом $L \rightarrow L'$ для $\Delta n = 0$ (n – главное квантовое число) в промежуточные вышележащие вибронные состояния n_ν, L' комплекса. Под вибронными здесь следует понимать электронно-колебательные состояния ридберговского комплекса с главным квантовым числом n_ν , зависящим от колебательного квантового числа ν молекулярного иона XU^+ , и орбитальным моментом L слабосвязанного электрона относительно молекулы M . Время первой стадии в зависимости от величины n соответствует длительности прохождения фотона через электронное облако ридберговского комплекса.

Вторая стадия связана с квантовой динамикой самого комплекса $XU^{**}-M$, где наряду с дискретными энергетический спектр составной системы содержит виртуальные автоионизационные состояния молекулы XU^{**} . Они образуются, когда относительная энергия молекул XU^{**} и M в комплексе, $\varepsilon \sim T_a$, больше энергии связи электрона, т.е. при условии

$$n \geq 1/(2T_a)^{1/2} \geq 30, \quad (5)$$

где T_a – температура нейтральной среды. Здесь и в дальнейшем используется атомная система единиц: $\hbar = e = m_e = 1$, где \hbar – постоянная Планка, m_e и e – масса и заряд электрона.

Завершает процесс за такие же времена третья стадия, т.е. вынужденный переход $L' \rightarrow L''$ в конечное состояние $N_0 - 1 \rightarrow N_0$. Причем резонансное рассеяние фотонов на орбитально вырожденных ридберговских комплексах, включающих целый набор промежуточных состояний, принципиально отличается от традиционной схемы в квантовой электродинамике [56], которая не может приводить к временной задержке. Таким образом, квантовая теория искажения спутниковых сигналов должна включать вклады всех трех типов переходов.

Для качественного объяснения особенностей распространения сигнала GPS достаточно ограничиться случаем резонансного (релеевого) упругого рассеяния (когда квантовое состояние ридберговского комплекса $XU^{**}-M$ не изменяется) и проанализировать резонансную структуру силы осциллятора поглощения фотона. В результате дипольный матричный элемент $D_{n_v}(L \rightarrow L')$ становится суперпозицией прямого и двухстадийного (резонансного) процессов, приобретая обычный вид резонансного контура Фано [57]:

$$D_{n_v}(L \rightarrow L') = D_{n_v}^{(0)}(L \rightarrow L') \times \left[(q_{n_v} + \delta_{n_v})^2 / (1 + \delta_{n_v}^2) \right]^4. \quad (6)$$

Здесь q_{n_v} – профильный индекс, $\delta_{n_v} = 4\pi\Delta\nu/\Gamma_{n_v}$ – приведенный сдвиг несущей частоты, Γ_{n_v} – полная ширина промежуточного вибронного уровня, включающая электростатическую и полевую составляющие. Видно, что сдвиг частоты рассеивающегося фотона $\Delta\nu$ и время задержки $\delta\tau$ в промежуточном состоянии, связанное с уширением автоионизационных дискретных уровней с $\nu = 1$, определяются при резонансном рассеянии фотона сильной неадиабатической связью электронного и ядерного движений в промежуточном комплексе $XU^{**}-M$.

Предварительные оценки при однократном резонансном рассеянии фотона дают следующие значения для сдвига частоты и временной задержки: $\Delta\nu \sim 10^{-2}$ ГГц и $\delta\tau \sim 10^{-11}-10^{-10}$ с соответственно. Наблюдаемая величина времени задержки формируется при прохождении спутникового сигнала через атмосферный слой на высоте 80–110 км, где в результате происходит не менее 10^6 актов рассеяния группы N фотонов. Это хорошо согласуется с расчетами работы [58], так как общее число ридберговских комплексов в столбе высотой H , расположенном в этом слое, и

площадью, приходящейся на антенну приемника, в 10 см^2 , для нормальных геомагнитных условий составляет $\sim 10^7-10^8$. Учитывая, что скорость распространения сигнала существенно превышает характерные скорости молекул внутри комплекса, достаточно ограничиться их квазистатистическим описанием. Тогда, принимая для броуновского движения нормальное распределение и учитывая, что вероятность w одного события при резонансном рассеянии фотона составляет $\sim 10^{-3}$, для характерного числа актов взаимодействия, равного 10^6 , имеем $\Delta\tau \sim 10^{-8}-10^{-7}$ с. Другими словами, ридберговские комплексы $XU^{**}-M$ являются своеобразными “ловушками” для фотонов.

Особенности распространения сигнала в D- и E-слоях ионосферы и возникающие в результате горизонтальные и вертикальные ошибки позиционирования: $\Delta L \sim \Delta\tau c$ (c – скорость света в вакууме), формируются за счет многократного перерассеяния фотонов на промежуточных ридберговских комплексах. Время задержки $\Delta\tau$ должно быть пропорционально как полному числу m_{rad} излучающих ридберговских квазимолекул в заданном атмосферном столбе, так и интенсивности дополнительного СВЧ-излучения I_{tot} , индуцированного внешним электрическим полем радиопередатчика [58], т.е.

$$\Delta\tau(\nu, n_e^0, T_e^0) \sim m_{rad}(\nu, n_e^0, T_e^0) \sim \delta I_{tot}(\nu, n_e^0, T_e^0). \quad (7)$$

Здесь n_e^0 и T_e^0 – концентрация и температура свободных электронов на высоте 110 км. Интенсивность излучения δI_{tot} , в свою очередь, напрямую зависит от мощности передатчика (или напряженности создаваемого им электрического поля), которая, согласно (4), должна возрастать с увеличением поля, т.е. приводить к повышению ошибки позиционирования.

3. ФОРМАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ РЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ ФОТОНОВ

Ридберговские молекулы обладают одним возбужденным слабосвязанным электроном, состояние которого характеризуется энергией уровня и угловым моментом ℓ относительно ионного остова. Энергии уровней с большими угловыми моментами не зависят от ℓ (орбитально вырожденные состояния). Статистически наиболее устойчивыми оказываются именно эти состояния, когда основное время электрон проводит на больших расстояниях от ионного остова. Процесс, приводящий к образованию таких состояний, называется ℓ -перемешиванием [57]. В верхней атмосфере он протекает быстро и является практически необратимым, т.е. наибольшее число ридберговских частиц в

плазме оказывается в орбитально вырожденных состояниях.

Описание состояний орбитально вырожденных ридберговских комплексов $XU^{**}-M$ начинается с введения в теорию вибранных ППЭ $U_{n_v,L}(\mathbf{R}, \xi_M, u)$, где вектор \mathbf{R} есть расстояние между частицами XU^{**} и M , u — их относительная скорость, а вектор ξ_M задает ориентацию молекулы M в системе координат, связанной с молекулой XU^{**} .

Дипольный матричный элемент перехода из начального состояния $n_v L$ в промежуточное вышележащее состояние $n_v L_{int}$ ридберговского комплекса $XU^{**}-M$, представляющего собой первичный акт поглощения фотона, имеет вид

$$\mathbf{D}_{n_v(L \rightarrow L_{int})} = \langle \Psi_{n_v,L}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \xi_M) | \mathbf{r} | \Psi_{n_v,L_{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \xi_M, u) \rangle. \quad (8)$$

Здесь \mathbf{r} — координата слабосвязанного электрона, отсчитанная от центра масс молекулы XU^{**} , $\Psi_{n_v,L_{int}}$ — зависящая от относительной скорости u полная волновая функция промежуточного автоионизационного состояния комплекса, описывающая динамику поведения ридберговского электрона, движущегося в двухцентровом силовом поле квантовой системы “ридберговская молекула XU^{**} + нейтральная молекула среды M ”. Правило отбора для таких переходов имеет вид $\Delta L = \pm k$ (k — целое число) и определено в [57], что связано с нарушением центральной симметрии для ридберговской частицы XU^{**} .

Поскольку радиационные процессы в такой постановке задачи являются квазистатическими, частота поглощения и излучения для прямых и обратных ($L_i \rightleftharpoons L_f$) переходов определяется выражением [59]

$$v_v(\mathbf{R}, \xi_M) = \frac{1}{2\pi} |U_{n_v,L_i}(\mathbf{R}, \xi_M) - U_{n_v,L_f}(\mathbf{R}, \xi_M)|. \quad (9)$$

Так как основное время в ридберговском комплексе слабосвязанный электрон проводит на больших расстояниях $r \sim n^2$ от ионного остова, где справедливо квазиклассическое приближение [57], для описания его движения целесообразно воспользоваться асимптотической теорией и рассматривать движение молекулы M в адиабатическом по вращению приближении. Тогда, как это обычно делается, угловая ориентация молекулы M относительно оси квазимолекулы считается фиксированной. Последующее усреднение по ориентациям молекул проводится на последнем этапе расчета при определении вероятности процесса. Кроме того, в формуле (9) предполагается, что в основной области переходов, при $R \sim n_v$, псевдопересечений ППЭ с различными значениями главных квантовых чисел n_v и $n_{v'}$ не происходит.

Полная вибронная волновая функция начального состояния

Полные вибронные волновые функции двух-центральной квантовой системы, $\Psi_{n_v,L}$, в формальной теории рассеяния удовлетворяют точному соотношению для оператора сдвига уровней τ :

$$\tau | \Phi_{n_v,L} \rangle = \mathbf{V}_{e^-M} | \Psi_{n_v,L} \rangle, \quad (10)$$

где \mathbf{V}_{e^-M} — оператор e^-M -взаимодействия, $\Phi_{n_v,L}$ — нормированная на единицу базисная волновая функция изолированной ридберговской молекулы XU^{**} в L -представлении. Оператор τ , в свою очередь, удовлетворяет интегральному уравнению

$$\tau = \mathbf{V}_{e^-M} \mathbf{G}_{XU^{**}M}(E) \tau, \quad (11)$$

где $\mathbf{G}_{XU^{**}M}$ — зависящий от кинетической энергии гриновский оператор ридберговской молекулы, который будет определен в следующем разделе. Из решения однородного уравнения для оператора сдвига уровней (11), записанного в виде

$$\tau = \mathbf{K} \sum_v | \chi_v \rangle [\tilde{\mathbf{G}}(E - E_v)] \langle \chi_v | \tau, \quad (12)$$

находятся вибронные ППЭ орбитально вырожденных ридберговских комплексов для различных колебательно-возбужденных состояний $| \chi_v(\rho_M) \rangle$ нейтральных молекул среды. Первый множитель в правой части (12) есть \mathbf{K} -матрица рассеяния медленного электрона на нейтральной молекуле среды M , оператор $\tilde{\mathbf{G}}$ представляет собой полюсную часть гриновского оператора ридберговской молекулы, в которой E — полная энергия системы, отсчитанная от основного состояния молекулярного иона, а E_v — энергия колебательного возбуждения нейтральной молекулы среды. В матричной форме уравнение (12) записывается как

$$\tau_{LLM,vv} = \sum_{L'v'} K_{LL'M,vv'} \alpha_{v'} \text{ctg}(\pi v_{v'}) \tau_{L'LM,v'v'}. \quad (13)$$

Величина $v_v = 1/[2(E_v - E)]^{1/2}$ — эффективное главное квантовое число, α_v — зависящий от колебательного квантового числа v импульс электрона, равный $\alpha_v = (2/R - 1/v_v^2)^{1/2}$. Решение системы уравнений (9) на собственные значения энергии для двух колебательных состояний: $v = 0$ и $v' = 1$ в пренебрежении LL' -связью имеет вид

$$(\text{tg} \pi v_v - \alpha_v K_{LLM,vv})(\text{tg} \pi v_{v'} - \alpha_{v'} K_{LLM,v'v'}) = \alpha_v \alpha_{v'} (K_{LLM,vv'})^2, \quad (14)$$

где диагональные по L матричные элементы связаны с характеристиками $v \rightarrow v'$ -рассеяния следующим образом [57]:

$$K_{LLM, \nu\nu'} = a_{\nu\nu'} \delta_{L0} - \frac{L(L+1) - 3M^2}{L(L+1)(2L-1)(2L+3)} Q_{\nu\nu'} \times \\ \times (1 - \delta_{L0}) - \frac{\pi(\alpha_{\nu\nu'})^{1/2}}{(2L-1)(2L+1)(2L+3)} \times \\ \times \left[\beta_{\nu\nu'} + \frac{L(L-1) - 3M^2}{(2L-1)(2L+3)} \beta'_{\nu\nu'} \right]. \quad (15)$$

Формула (15) связывает матричные элементы адиабатической амплитуды s -рассеяния, $a(\rho_M)$, и соответствующие элементы квадрупольного момента Q , изотропной (β) и анизотропной (β') компонент тензора поляризуемости. Скалярная величина ρ_M есть межатомное расстояние в нейтральной молекуле.

Заметим также, что интегральное уравнение (12) позволяет представить волновую функцию ридберговского комплекса в виде

$$|\Psi_{n,L}\rangle = \mathbf{V}_{eM}^{-1} \boldsymbol{\tau} |\Phi_{n,L}\rangle = \mathbf{G}_{XY^{**}M} \boldsymbol{\tau} |\Phi_{n,L}\rangle \quad (16)$$

и выразить ее через матричные элементы оператора сдвига уровней $\boldsymbol{\tau}$.

Для орбитально вырожденных состояний ППЭ не зависят от ориентации нейтральной молекулы среды и характеризуются в лабораторной системе координат двумя векторами: $\boldsymbol{\rho}$ и \mathbf{R} . Вектор $\boldsymbol{\rho}$ задает межатомное расстояние и ориентацию ридберговской молекулы; вектор \mathbf{R} определяет межмолекулярное расстояние вдоль оси z . Усреднение по ориентациям ридберговской молекулы проводится после стадии расчета элементов \mathbf{K}_{eM} -матрицы с учетом дальнего взаимодействия, которое контролируется ведущими членами асимптотического разложения амплитуд рассеяния электрона на молекуле M , а также зависит от тензора поляризуемости молекулы M , ее дипольного и квадрупольного моментов. Кроме того, в теории строения ридберговских комплексов удобно использовать вибранный базис, в котором вместо межатомных расстояний ρ_M в молекуле M задаются ее колебательные квантовые числа, так как в адиабатическом по вращению базисе разрывается связь между вращательными и радиационными переходами в ридберговских состояниях квазимолекулы [57].

Построение вибранных ППЭ атмосферных ридберговских комплексов $XY^{**}-M$ необходимо для нахождения положений и формы вибранных минимумов сечений процессов ℓ -перемешивания ридберговских молекул N_2 , O_2 в D- и E-слоях ионосферы Земли, где время задержки спутниковых сигналов позиционирования должно быть минимальным. Эта информация требуется для построения поуровневой кинетики формирования фотоионизационной плазмы [38], что особенно

важно для территорий, расположенных вблизи экватора.

Проблемы теории, которые связаны с трансформацией потенциальных кривых при учете валентных и ионных конфигураций, а также возможности появления сложной волнообразной структуры потенциальных кривых при достаточно больших значениях n и угловых моментов электрона ℓ вследствие множества псевдопересечений ридберговских и орбитально вырожденных ППЭ, позволяют перейти к представлению "квантового хаоса" [40]. Заметим также, что излучение ридберговских комплексов $XY^{**}-M$ в дециметровом диапазоне соответствует радиационным переходам без изменения главного квантового числа: $\Delta n = 0$ [60]. При этом полная волновая функция для каждого значения L является суперпозицией всех возможных значений углового момента электрона ℓ (от 3 до $n-1$). Правила отбора для разрешенных дипольных переходов $\ell \rightarrow \ell \pm 1$ имеют вид $L \rightarrow L'$, где величина L' изменяется от $L+1$ до n . В результате полная интенсивность излучения складывается из парциальных величин с заданным значением момента L . Они образуются при пересечении прямой, соответствующей заданной частоте ν , со всеми зависящими от n линиями $L \rightarrow L'$ -излучения [60].

Волновая функция промежуточного автоионизационного состояния

Полная вибранный волновая функция $\Psi_{n,L_{int}}(u)$ промежуточного автоионизационного состояния системы $XY^{**}-M$, зависящая от относительной скорости u этих молекул, по аналогии с (10) представляется в виде

$$|\Psi_{n,L}(u)\rangle = \mathbf{V}_{eM}^{-1} \boldsymbol{\tau} |\Phi_{n,L}(u)\rangle = \\ = \mathbf{G}_{XY^{**}M}(E) \boldsymbol{\tau} |\Phi_{n,L}(u)\rangle. \quad (17)$$

Здесь полная энергия системы

$$E = -\frac{1}{2n^2} + E_k, \quad (18)$$

а кинетическая энергия E_k записывается как

$$E_k = \frac{M_c u^2}{2}, \quad (19)$$

где M_c – приведенная масса частиц XY^{**} и M .

Отличие (17) от (11) заключается в том, что оператор $\mathbf{V}_{eM}(u)$ здесь описывает e^- - M -взаимодействие электрона с молекулой M , которая движется с заданной скоростью u в системе координат, связанной с ридберговской молекулой XY^{**} . При этом волновая функция $\Phi_{n,L}(u)$ записана в L -представлении и нормирована на δ -функцию

от энергии E_k относительного движения. При определении оператора $\mathbf{V}_{e^-M}(u)$ достаточно считать ридберговский электрон свободным и пренебречь зависимостью от u . Такое представление справедливо, если длина волны электрона λ мало меняется на длине, равной размеру b эффективной области взаимодействия с нейтральной частицей M , т.е. при условии

$$b \frac{d\lambda}{dr} \ll \lambda \quad (20)$$

или

$$\frac{b}{(p_e R)^2} \ll 1,$$

где p_e – классический импульс электрона в кулоновском поле.

Центральную роль в выражении (17) играет гриновский оператор $\mathbf{G}_{XY^{**}M}(E)$, который по определению представляет собой свертку [61], т.е.

$$\mathbf{G}_{XY^{**}M}(\mathbf{R}, \mathbf{R}', E) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{k_{max}} \mathbf{G}_{XY^{**}}(E - E_k) \times \times \frac{\sin\{\mathbf{k}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')\}}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|} k dk. \quad (21)$$

Здесь $\mathbf{G}_{XY^{**}}$ есть гриновский оператор изолированной молекулы XY^{**} , а величины E_k и k_{max} определяются следующими выражениями:

$$E_k = k^2/2M_c, \quad k_{max} = \left[2M_c \left(E + \frac{1}{R} \right) \right]^{1/2}. \quad (22)$$

В случае положительной энергии $E > E_k$ оператор $\mathbf{G}_{XY^{**}}$ в выражении (21) описывает движение электрона в сплошном спектре. Область изменения импульса k сталкивающихся частиц включает виртуальные переходы в ионизационный континуум и переходы между его состояниями. Этот оператор удовлетворяет приведенному уравнению Дайсона [56]:

$$\mathbf{G}_{A^{**}}(E) = \mathbf{G}^{(c)}(E) + \mathbf{G}^{(c)}(E) \mathbf{T}^{(c)}(E) \mathbf{G}^{(c)}(E), \quad (23)$$

где $\mathbf{G}^{(c)}$ – кулоновская функция Грина, $\mathbf{T}^{(c)}$ – матрица столкновений электрона с ридберговской молекулой XY^{**} . Заметим, что полюса кулоновской функции Грина здесь строго компенсируются, т.е. спектр собственных значений определяется полюсами $\mathbf{T}^{(c)}$ -матрицы, которая удовлетворяет системе интегральных уравнений [57]

$$\mathbf{T}^{(c)} = \mathbf{t} + \mathbf{t} \sum_q |q\rangle \langle q| \text{ctg}[\pi v_q(\epsilon)] \mathbf{T}^{(c)}, \quad (24)$$

$$\mathbf{t} = \mathbf{V}_{e^-XY^+} + \mathbf{V}_{e^-XY^+} \mathbf{G}_0 \mathbf{t}.$$

Оператор \mathbf{t} в (24) является матрицей реакций, которая описывает электростатическое взаимодей-

ствие электрона с ионным остовом XY^+ . Волновые функции $|q\rangle = |\ell m v\rangle$ в (24) есть кулоновские базисные функции, а m – проекция углового момента электрона ℓ на ось молекулы XY^{**} . Функция $v_q(\epsilon)$ зависит от главного квантового числа n и определяется как

$$v_q(\epsilon_n) = (-2\epsilon_n)^{-1/2}, \quad (25)$$

где

$$\epsilon_n = E - E_k = -\frac{1}{2n^2}. \quad (26)$$

При переходе в сплошной спектр функция $\text{ctg}\{\pi v(\epsilon)\} = -i$.

Так как состояния с различными угловыми моментами ℓ для заданного значения m смешиваются, то полная нормированная волновая функция орбитально вырожденного состояния молекулы XY^{**} определяется следующей суперпозицией [62]:

$$\Psi_{nm}^{(L)}(\mathbf{r}, R, v) = \sum_{\ell \geq \ell^*}^{n-1} A_{n\ell m}(R, v) \Phi_{n\ell m}^{(L)}(\mathbf{r}, R, v), \quad (27)$$

где $\ell^* \geq 3$, а коэффициенты $A_{n\ell m}$, соответственно, равны [62]

$$A_{n\ell m}(R, v) = \frac{\Phi_{n\ell m}^{(L)}(\mathbf{R}, R, v)}{\sum_{\ell \geq \ell^*}^{n-1} |\Phi_{n\ell m}^{(L)}(\mathbf{R}, R, v)|^2}. \quad (28)$$

Парциальная функция $\Phi_{n\ell m}^{(L)}$ здесь нормирована на единицу для каждого из значений R и v . Таким образом, в выражении (17) появляются резонансные члены при рассеянии электрона на молекуле XY^{**} и, соответственно, возникает конечное время жизни электрона в ионизационном континууме. При этом волновая функция $\Psi_{n, L_{mi}}(u)$ промежуточного автоионизационного состояния комплекса выражается через характеристики резонансного рассеяния электрона на молекуле XY^{**} . Следствием этого обстоятельства является задержка фотона в промежуточном состоянии нейтральной средой.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Согласно общей теории рассеяния [56], вероятность упругого процесса при однократном взаимодействии фотона с орбитально вырожденным комплексом $XY^{**}-M$ пропорциональна, с учетом (4) и (6), квадрату модуля амплитуды перехода:

$$W_{n_{v=0}}(v, L_i \rightarrow L_f) \sim |M_{n_{v=0}}(v, L_i \rightarrow L_f)|^2, \quad (29)$$

где матричный элемент резонансного перехода $M_{n_{v=0}}$ определяется как

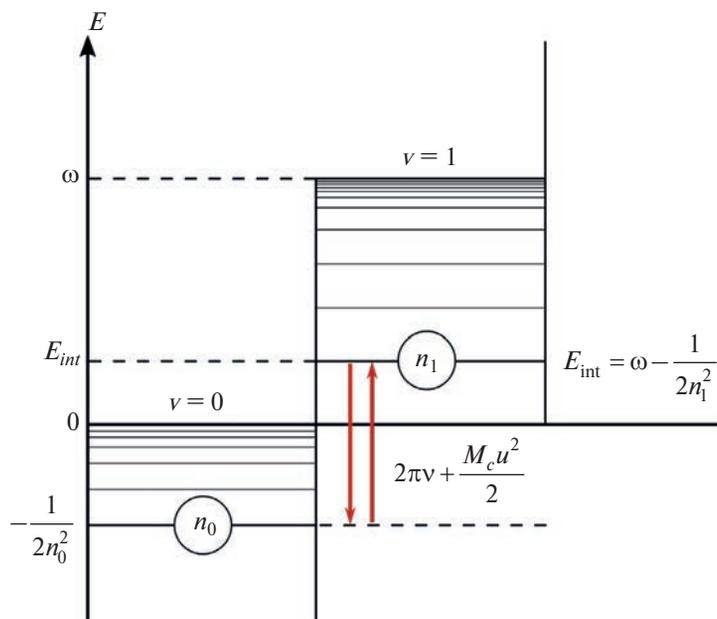


Рис. 1. Схематическое изображение прямых и обратных переходов между возбужденными состояниями n_0 и n_1 ридберговского комплекса $XY^{**}-M$ под действием фотонов с частотой ν .

$$M_{n_{v=0}}(\nu, L_i \rightarrow L_f) = fD_{n_{v=0}}(\nu, L_i \rightarrow L_f) + f^2 \frac{D_{n_{v=0}}(\nu, L_i \rightarrow L_{int})D_{n_{v=0}}(\nu, L_{int} \rightarrow L_f)}{\nu^2 + \gamma_f^2(n_{v=1} \rightarrow n_{v=0})/4}, \quad (30)$$

где γ_f — приведенная ширина вибронного автоионизационного состояния для колебательного квантового числа $\nu = 1$. Из выражения (30) следует, что с ростом мощности передатчика (или напряженности создаваемого им поля) вероятность упругого рассеяния (29) значительно возрастает. Тем более что при напряженностях

$$f > \left(\nu^2 + \frac{\gamma_f^2}{4} \right) |D_n(\nu)|^{-1} \quad (31)$$

второе резонансное слагаемое в (30) будет вносить основной вклад в формирование времени задержки сигнала. Тогда ошибка позиционирования с ростом напряженности будет возрастать как $\sim f^4$.

Рассмотрим теперь более подробно условия заселения ридберговских промежуточных автоионизационных состояний комплекса (см. рис. 1). Обозначим энергию комплекса $XY^{**}-M$, отсчитанную от границы сплошного спектра ($E = 0$), через

$$E_{int} = \omega - \frac{1}{2n_1^2} > 0, \quad (32)$$

где ω — частота колебаний, n_1 — эффективное главное квантовое число автоионизационного

состояния для случая $\nu = 1$. С другой стороны, эта энергия равна

$$E_{int} = -\frac{1}{2n_0^2} + \frac{M_c u^2}{2} + 2\pi\nu > 0, \quad (33)$$

где n_0 — главное квантовое число исходного состояния для $\nu = 0$. Объединяя эти выражения для энергии E_{int} , имеем следующее условие:

$$\omega - \frac{1}{2n_1^2} = -\frac{1}{2n_0^2} + \frac{M_c u^2}{2} + 2\pi > 0. \quad (34)$$

Заметим, что величины ω и ν в (34) являются фиксированными, а значения главного квантового числа n_1 задаются спектром вибронных состояний квазимолекулы $XY^{**}-M$ [59]. Поэтому соотношение (34) определяет область изменения возможных значений n_0 и относительных скоростей u .

Действительно, если ввести величины n_0^{min} и n_0^{max} , задающие область предельных значений исходных главных квантовых чисел n_0 , и соответствующие им значения относительных скоростей u_{max} и u_{min} , то из соотношения (34) можно получить следующее точное равенство:

$$u_{max}^2 - u_{min}^2 = \frac{1}{M_c} \left[\frac{1}{(n_0^{min})^2} - \frac{1}{(n_0^{max})^2} \right]. \quad (35)$$

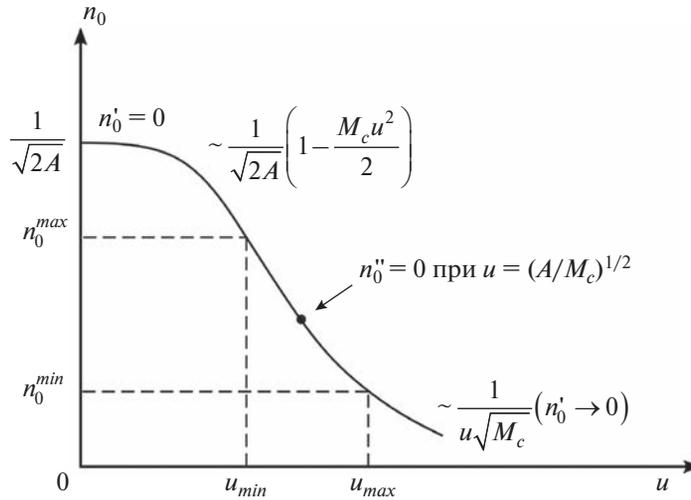


Рис. 2. Зависимость исходных главных квантовых чисел n_0 от скорости u нейтральной частицы M в системе координат, связанной с ридберговской молекулой XY^{**} .

Равенство (35) может быть использовано в качестве контроля точности при проведении конкретных расчетов.

Проанализируем более подробно аналитические свойства функции

$$n_0(u) = (M_c u^2 + 2A)^{-1/2}, \quad (36)$$

в которой положительная величина A определяется выражением

$$A = 2\pi v - E_{int}. \quad (37)$$

Первая производная

$$n_0' = -2M_c u / (M_c u^2 + 2A)^{3/2} \quad (38)$$

обращается в нуль при $u = 0$, а для больших скоростей $u \rightarrow \infty$ – ведет себя как

$$n_0' \approx -2/M_c^{1/2} u^2. \quad (39)$$

Вторая производная

$$n_0'' = \frac{4M_c(M_c u^2 - A)}{(M_c u^2 + 2A)^{5/2}} \quad (40)$$

обращается в нуль (точка перегиба) при значении $u = (A/M_c)^{1/2}$.

Для малых значений скорости u функция $n_0(u)$ представляется в виде

$$n_0 \approx \frac{1}{\sqrt{2A}} \left(1 - \frac{M_c u^2}{2A} \right), \quad (41)$$

а при больших значениях u она описывается простой гиперболической зависимостью: $\sim 1/u\sqrt{M_c}$. Точка перегиба, как показано на рис. 2, находится между значениями скоростей u_{max} и u_{min} . Отме-

тим также, что при выборе главного квантового числа n_1 следует иметь в виду только первое (нижнее) ридберговское автоионизационное состояние закрытого канала ($v = 1$).

Усреднение вероятности процесса по относительным скоростям u в интервале от u_{min} до u_{max} должно проводиться только на завершающем этапе расчета с нормированной на единицу функцией распределения нейтральных частиц в плазме. Эта функция зависит от концентрации и температуры медленных электронов и нейтральных компонент слабоионизованной плазмы в ионосферном слое на высотах от 60 до 110 км, в котором наблюдается наиболее сильное воздействие резонансной среды на распространение электромагнитных волн на распространение электромагнитных волн на распространение спутниковых систем [38, 39].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе обсуждены основные химические реакции, протекающие в нижней ионосфере Земли с участием ридберговских состояний молекул O_2 , N_2 и NO . К ним относятся реакции диссоциативной рекомбинации, ассоциативной ионизации, обмена и тушения ридберговских состояний, приводящие к образованию неравновесной двухтемпературной плазмы. Наиболее важной реакцией в D- и E-слоях ионосферы является реакция ℓ -перемешивания, которая ответственна за формирование резонансных квантовых свойств среды распространения радиоволн. Это обусловлено образованием в плазме орбитально вырожденных состояний ридберговских комплексов, частоты переходов между которыми

являются резонансными по отношению к несущим частотам спутниковых сигналов ГНСС.

Дано объяснение физической причины временной задержки спутникового сигнала, приводящей к ошибкам позиционирования ГНСС. Предложен квантовый подход, посредством которого осуществляется переход от традиционного представления о распространении радиоволн к движению соответствующих фотонов. В этом случае эффективное время задержки при резонансном рассеянии фотона определяется характерным временем жизни промежуточных автоионизационных состояний колебательно-возбужденных ридберговских комплексов $XU^{**}-M$. Величина времени жизни обусловлена наличием сильной неадиабатической связи электронного и ядерного движений в промежуточных состояниях комплекса, которая не зависит от напряженности внешнего поля, создаваемого передатчиком ГНСС.

Приведенные результаты представляют большой интерес для ряда современных направлений исследований по влиянию грозовой активности на работу ГНСС, структуре и свойствам плазменных неоднородностей в ионосфере, а также определение состава атмосферы далеких экзопланет. Например, при грозовой активности происходит воздействие электрических полей облаков на плазмохимические процессы в D-слое ионосферы, что должно приводить к заметному увеличению ошибок позиционирования [58]. Это связано с тем, что заряженные униполярно после разрядов линейной молнии электрические поля облаков на высотах 90–100 км приводят к резкому возрастанию на два-три порядка концентрации электронов [63].

Некоторое время назад австралийские ученые с помощью радиотелескопа MWA обнаружили в магнитосфере плазменные трубы, которые формируются вдоль магнитных силовых линий Земли и расположены на высотах 450–700 км, т.е. выше D- и E-слоев ионосферы [64]. Эти трубы представляют собой плазменные неоднородности в ионосфере, которые могут существенно влиять на ошибки позиционирования ГНСС в различных географических областях на поверхности Земли [65]. Однако их природа еще недостаточно изучена и требует специального рассмотрения.

Следующим перспективным направлением является обнаружение атмосфер экзопланет, сходных по структуре и газовому составу с атмосферой Земли [66]. Так как традиционные методы анализа спектров поглощения в инфракрасном диапазоне к явному успеху не привели, для получения сигнатуры излучения далеких планет целесообразно перейти к СВЧ-диапазону, ориентируясь на особенности некогерентного излучения D- и E-слоев ионосферы Земли на частотах 1.4 и 5 ГГц. Указанием на возможность проведения таких

экспериментов могут служить предварительные результаты, полученные радиотелескопом АТА (Allen Telescope Array) в Калифорнии [67]. Более того, поскольку излучение этих планет расположено на фоне интенсивного свечения их звезд, для выявления истинной сигнатуры СВЧ-излучения планеты потребуется привлечь вейвлет-анализ [68].

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 122040500060–4) и при финансовой поддержке Министерством науки и технологии Тайваня (грант MOST 111-2111-M-001-008).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Nilsson J.O., Skog I., Händel P. // Proc. 10th Intern. Conf. Inf. Sci. Signal Proc. Appl. (ISSPA 2010). IEEE, 2010. P. 324; <https://doi.org/10.1109/ISSPA.2010.5605534>
2. Skog I., Händel P. // IEEE Trans. Intell. Transp. Syst. 2011. V. 12. № 4. P. 1014; <https://doi.org/10.1109/TITS.2011.2126569>
3. Yang C.K., Shim D.S. // TransNav. Int. J. Marine Navigat. Safety Sea Transp. 2013. V. 7. № 2. P. 199; <https://doi.org/10.12716/1001.07.02.06>
4. Radievsky A., Shagimuratov I.I., Zakharenkova I.E. // Proc. II Intern. Conf. "Atmosphere, Ionosphere, Safety" (AIS-2010). Book of Abstr / Ed. Karpov I.V. Kaliningrad: Baltic Federal University, 2010. P. 239.
5. Stankov S.M., Jakowski N., Heise S. et al. // J. Geophys. Res.: Space Phys. 2003. V. 108. № A5. P. 1164; <https://doi.org/10.1029/2002JA009570>
6. Yizengaw E., Dyson P.L., Essex E.A. // Adv. Space Res. 2006. V. 38. № 11. P. 2318; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2006.09.029>
7. Kunitsyn V.E., Tereshchenko E.D. Ionospheric Tomography. Berlin, Heidelberg: Springer, 2003; <https://doi.org/10.1007/978-3-662-05221-1>
8. Куницын В.Е., Терещенко Е.Д., Андреева Е.С. и др. // УФН. 2010. Т. 180. № 5. С. 548; <https://doi.org/10.3367/UFNr.0180.201005k.0548>
9. Nesterov I.A., Kunitsyn V.E. // Adv. Space Res. 2011. V. 47. № 10. P. 1789; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2010.11.034>
10. Klimenko M.V., Klimenko V.V., Despirak I.V. et al. // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 2018. V. 180. P. 78; <https://doi.org/10.1016/j.jastp.2017.12.017>
11. Afraimovich E.L., Perevalova N.P., Voyeikov S.V. // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 2003. V. 65. № 11–13. P. 1245; <https://doi.org/10.1016/j.jastp.2003.08.007>
12. Afraimovich E.L., Edemskiy I.K., Voeykov S.V. et al. // Ann. Geophys. 2009. V. 27. № 4. P. 1521; <https://doi.org/10.5194/angeo-27-1521-2009>
13. Afraimovich E.L., Edemskiy I.K., Leonovich A.S. et al. // Geophys. Res. Lett. 2009. V. 36. № 15. L15106; <https://doi.org/10.1029/2009GL039803>
14. Afraimovich E.L., Astafieva E.I., Bergardt O.I. et al. // Radiophys. Quant. Electr. 2004. V. 47. № 7. P. 453; <https://doi.org/10.1023/B:RAQE.0000047237.67771.bc>

15. Голубков Г.В., Манжелей М.И., Эпельбаум Л.В. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 5. С. 63; <https://doi.org/10.7868/S0207401X18050084>
16. Голубков Г.В., Манжелей М.И., Берлин А.А. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 3. С. 86; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21030055>
17. Ольхов О.А., Шестаков Д.В. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 7. С. 85; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21070062>
18. Kim M., Kim J. // Remote Sens. 2021. V. 13. № 1. 151; <https://doi.org/10.3390/rs13010151>
19. Zou X., Li Z., Wang Y. et al. // Remote Sens. 2021. V. 13. № 15. 2925; <https://doi.org/10.3390/rs13152925>
20. Montenbruck O., Schmid R., Mercier F. et al. // Adv. Space Res. 2015. V. 56. № 6. P. 1015; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2015.06.019>
21. Rodriguez-Solano C.J., Hugentobler U., Steigenberger P. // Adv. Space Res. 2012. V. 49. № 7. P. 1113; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2012.01.016>
22. Sošnica K., Thaller D., Dach R. et al. // J. Geodesy. 2015. V. 89. № 7. P. 725; <https://doi.org/10.1007/s00190-015-0810-8>
23. Pulinets S., Ouzounov D., Davidenko D. et al. // E3S Web Conf. 2020. V. 196. 03004; <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202019603004>
24. Bogdanov V., Gavrilov V., Pulinets S. et al. // E3S Web Conf. 2020. V. 196. 03005; <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202019603005>
25. Kintner P.M., Ledvina B.M., De Paula E.R. // Space Weather. 2007. V. 5. № 9. S09003; <https://doi.org/10.1029/2006SW000260>
26. Thaelert S., Steigenberger P., Montenbruck O. et al. // GPS Solut. 2019. V. 23. № 4. 92; <https://doi.org/10.1007/s10291-019-0882-7>
27. Steigenberger P., Thaelert S., Montenbruck O. // Adv. Space Res. 2020. V. 66. № 12. P. 2773; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2020.03.026>
28. Hegarty C.J. // Springer Handbook of Global Navigation Satellite Systems. Cham: Springer Intern. Publ., 2017. P. 197; https://doi.org/10.1007/978-3-319-42928-1_7
29. Johnston G., Riddell A., Hausler G. // Springer Handbook of Global Navigation Satellite Systems. Cham: Springer Intern. Publ., 2017. P. 967; https://doi.org/10.1007/978-3-319-42928-1_33
30. Бахметьева Н.В., Жемяков И.Н. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 10. С. 65; <https://doi.org/10.31857/S0207401X2210003X>
31. Голубков Г.В., Адамсон С.О., Борчевкина О.П. и др. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 5. С. 53.; <https://doi.org/10.31857/S0207401X22050053>
32. Borchevskina O.P., Adamson S.O., Dyakov Y.A. et al // Atmosphere. 2021. V. 12. № 9. 1116; <https://doi.org/10.3390/atmos12091116>
33. Borchevskina O.P., Kurdyayeva Y.A., Dyakov Y.A. et al. // Atmosphere. 2021. V. 12. № 11. 1384; <https://doi.org/10.3390/atmos12111384>
34. Голубков Г.В., Голубков М.Г., Манжелей М.И. // Докл. АН. 2012. Т. 447. № 5. С. 503.
35. Куприянов А.О., Морозов Д.А. Позиционирование по сигналам глобальных навигационных спутниковых систем в абсолютном режиме. М.: МИИГАиК, 2017.
36. Golubkov G.V., Golubkov M.G., Manzhelii M.I. et al. // The Atmosphere and Ionosphere: Elementary Processes, Monitoring, and Ball Lightning / Eds. Bychkov V.L., Golubkov G.V., Nikitin A.I. N.Y.: Springer, 2014. P. 1; https://doi.org/10.1007/978-3-319-05239-7_1
37. Голубков Г.В., Манжелей М.И., Берлин А.А. и др. // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 1. С. 5; <https://doi.org/10.7868/S0207401X16010039>
38. Kuverova V.V., Adamson S.O., Berlin A.A. et al. // Adv. Space Res. 2019. V. 64. № 10. P. 1876; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2019.05.041>
39. Su S.-Y., Tsai L.-C., Liu C.H. et al. // Adv. Space Res. 2019. V. 64. № 10. P. 2137; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2019.06.039>
40. Безуглов Н.Н., Голубков Г.В., Ключарев А.Н. // Хим. физика. 2017. Т. 36. № 12. С. 21; <https://doi.org/10.7868/S0207401X17100028>
41. Golubkov G.V., Manzhelii M.I., Berlin A.A. et al. // Atmosphere. 2020. V. 11. № 6. 650; <https://doi.org/10.3390/atmos11060650>
42. Поваляев А.А. Спутниковые радионавигационные системы: время, показания часов, формирование измерений и определение относительных координат. М.: Радиотехника, 2008.
43. Иванов А.В. Нелинейная многомерная обработка сигналов спутниковых радионавигационных систем в комплексах самолетовождения. Кн. 2. М.: Радиотехника, 2013.
44. Иванов А.В. // Радиотехника. 2014. № 7. С. 55.
45. Степанов О.А. Методы обработки навигационной измерительной информации. С.Пб: Университет ИТМО, 2017.
46. Кинкулькин И.Е. Глобальные навигационные спутниковые системы: алгоритмы функционирования аппаратуры потребителя. М.: Радиотехника, 2018.
47. Радионавигационные технологии. Выпуск 8 / Под ред. Перова А.И. М.: Радиотехника, 2019.
48. Стрелков С.П., Кондрашин К.Г., Константинова Е.А. и др. Спутниковые системы и технологии позиционирования. Астрахань: Астраханский государственный архитектурно-строительный университет, 2020.
49. Klobuchar J. // IEEE Trans. Aerospace Electr. Syst. 1987. V. AES-23. № 3. P. 325; <https://doi.org/10.1109/TAES.1987.310829>
50. Ansari K., Bae T.S. // Intern. J. Satell. Commun. Network. 2021. V. 39. № 6. P. 626; <https://doi.org/10.1002/sat.1405>
51. Liu W., Shi X., Zhu F. et al. // Adv. Space Res. 2019. V. 63. № 8. P. 2358; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2019.01.004>
52. Ho Y.H., Abdullah S., Mokhtar M.H. // Proc. 2013 IEEE Intern. Conf. Space Sci. Commun. (IconSpace). IEEE, 2013. P. 33; <https://doi.org/10.1109/IconSpace.2013.6599428>

53. *Clare A., Lin T., Lachapelle G.* // *Adv. Space Res.* 2017. V. 59. № 11. P. 2740; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2016.07.002>
54. *Bolla P., Borre K.* // *J. Geodesy.* 2019. V. 93. № 3. P. 437; <https://doi.org/10.1007/s00190-018-1172-9>
55. *Bidikar B., Chapa B.P., Kumar M.V. et al.* // *Satellites Missions and Technologies for Geosciences.* IntechOpen, 2020. P. 1; <https://doi.org/10.5772/intechopen.92295>
56. *Берестецкий Б.Н., Лифищ Е.М., Путаевский Л.П.* Квантовая электродинамика. М.: Физматлит, 2002.
57. *Голубков Г.В., Иванов Г.К.* Ридберговские состояния атомов и молекул и элементарные процессы с их участием. М.: Эдиториал УРСС, 2001.
58. *Голубков Г.В., Голубков М.Г., Манжелей М.И.* // *Хим. физика.* 2014. Т. 33. № 2. С. 64; <https://doi.org/10.7868/S0207401X14020058s>
59. *Golubkov G.V., Golubkov M.G., Ivanov G.K.* // *The Atmosphere and Ionosphere: Dynamics, Processes and Monitoring* / Eds. Bychkov V.L., Golubkov G.V., Nikitin A.I. N.Y.: Springer, 2010. P. 1; https://doi.org/10.1007/978-90-481-3212-6_1
60. *Голубков Г.В., Голубков М.Г., Манжелей М.И.* // *Хим. физика.* 2012. Т. 31. № 2. С. 31.
61. *Голубков Г.В., Девдариани А.З., Голубков М.Г.* // *ЖЭТФ.* 2002. Т. 122. Вып. 6. С. 1146.
62. *Голубков Г.В., Голубков М.Г.* // *Хим. физика.* 2014. Т. 33. № 2. С. 42; <https://doi.org/10.7868/S0207401X14020046s>
63. *Арделян Н.В., Бычков В.Л., Голубков Г.В. и др.* // *Хим. физика.* 2018. Т. 37. № 7. С. 59; <https://doi.org/10.1134/S0207401X18070038>
64. *Loi S.T., Murphy T., Cairns I.H. et al.* // *Geophys. Res. Lett.* 2015. V. 42. № 10. P. 3707; <https://doi.org/10.1002/2015GL063699>
65. *Dmitriev A.V., Jayachandran P.T., Tsai L.-C.* // *J. Geophys. Res.: Space Phys.* 2010. V. 115. № A12. A12244; <https://doi.org/10.1029/2010JA015380>
66. *Benneke B., Seager S.* // *Astrophys. J.* 2012. V. 753. № 2. P. 100; <https://doi.org/10.1088/0004-637X/753/2/100>
67. *Welch W.J., Fleming M., Munson C. et al.* // *Publ. Astron. Soc. Pacif.* 2017. V. 129. № 974. P. 1; <https://doi.org/10.1088/1538-3873/aa5d4f>
68. *Alperovich L., Eppelbaum L., Zheludev V. et al.* // *J. Geophys. Eng.* 2013. V. 10. № 2. 025017; <https://doi.org/10.1088/1742-2132/10/2/025017>

СВЯЗАННАЯ ГЕНЕРАЦИЯ АКУСТИЧЕСКИХ И ГРАВИТАЦИОННЫХ ВОЛН ТРОПОСФЕРНЫМИ ТЕПЛОВЫМИ ИСТОЧНИКАМИ

© 2023 г. С. П. Кшевецкий^{1, 3, 4*}, Ю. А. Курдяева^{2, 3}, Н. М. Гаврилов³

¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия

²Калининградский филиал Института земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова Российской академии наук, Калининград, Россия

³Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

⁴Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: SPKshev@gmail.com

Поступила в редакцию 31.05.2023;

после доработки 17.06.2023;

принята в печать 20.06.2023

Теоретически исследуются генерация акустико-гравитационных волн метеорологическими источниками тепла в тропосфере и распространение этих волн до высот верхней атмосферы. Выведены уравнения, описывающие по отдельности генерацию и распространение акустической и гравитационной волн локальным источником тепла. Тепловой источник волн представлен в виде парциальных источников гравитационных и акустических волн. Получена оценка мощности этих парциальных источников и показано, что их мощности различаются примерно вдвое, независимо от формы, размеров и частоты теплового источника. Показано, что генерация гравитационных волн не может происходить без соответствующей генерации акустических: эти волны генерируются только совместно. Разделение задачи о волнах от источника тепла на две отдельные (от гравитационного и акустического источников) проиллюстрировано прямым моделированием этих волн. Обсуждается применение полученных результатов к проблеме параметризации акустико-гравитационных волн в моделях общей циркуляции и климатических моделях.

Ключевые слова: внутренние гравитационные волны, акустические волны, верхняя атмосфера, тропосфера, метеорология.

DOI: 10.31857/S0207401X23100096, EDN: PGOETF

1. ВВЕДЕНИЕ

Современные исследования [1–9] вариаций волн и параметров ионосферы показывают, что атмосферные волны, генерируемые различными тропосферными источниками, достигая высот верхней атмосферы, могут отдавать свой импульс и энергию атмосферному газу. Они существенно влияют на динамические процессы в верхних слоях атмосферы и ионосферы. Диссипирующие волны могут создавать струйные течения, а также влиять на тепловой баланс верхних слоев атмосферы [5, 10, 11].

Процессы выделения/поглощения тепла при фазовых переходах воды в атмосфере при образовании и эволюции облаков и других метеорологических явлениях являются мощными энергетическими источниками акустико-гравитационных волн (АГВ). Нагрев атмосферного газа при конвективном тепловыделении может вызывать движение атмосферного газа с локальным нарушением условия статической устойчивости атмо-

сферы и последующим развитием волновых процессов вследствие развития неустойчивости.

Несмотря на то, что генерация волн тропосферными тепловыми источниками является процессом обычным, элементарная физика процесса генерации волн тепловым источником все еще недостаточно изучена. Такой процесс имеет некоторые особенности, которые могут быть критическими для понимания механизмов формирования волновой картины в атмосфере и проявлении различных эффектов. Особенности генерации волн тепловыми источниками важно также учитывать для правильной интерпретации экспериментальных наблюдений волн в атмосфере и ионосфере и при численном моделировании.

Численное моделирование АГВ является сложной задачей, с которой, однако, неплохо справляются современные модели атмосферных нестационарных процессов высокого разрешения, например, AtmoSym [12]. Недостатком таких моделей является вычислительная трудоемкость.

Для численного исследования глобальных атмосферных процессов обычно применяют крупномасштабные модели, как менее требовательные к вычислительным ресурсам. В глобальных численных моделях атмосферы влияние внутренних гравитационных волн (ВГВ) на верхние слои атмосферы учитывается путем параметризации волновых эффектов. Так, например, глобальная модель WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model) [13] включает в себя параметризацию стационарных орографических внутренних гравитационных волн и параметризацию фронтальных и конвективных гравитационных волн [14]. Однако эта параметризация содержит неточности, связанные с отсутствием детального понимания волн, генерируемых фронтальными системами, и воздействия этих волн на атмосферу. Модель SMLTM (Spectral mesosphere/lower thermosphere model) [15] учитывает сезонные колебания фоновой температуры и содержит дискретную многокомпонентную параметризацию гравитационных волн. Авторы работы [16], моделирующие приливные волны, генерируемые в тропосфере и стратосфере с помощью SMLTM, отмечают, что климатологические исследования спектров гравитационных волн дают информацию о сезонных изменениях общего волнового воздействия на атмосферу, но эта информация не может быть напрямую использована в параметризациях дискретного спектра гравитационных волн. Для разработки более эффективных параметризаций действия АГВ в моделях общей циркуляции атмосферы необходимо более глубокое понимание особенностей генерации и распространения этих волн. Теоретическому изучению особенностей генерации акустических и гравитационных волн посвящены, в частности, работы [17–19].

В данной работе выполнено аналитическое исследование общей задачи о генерации АГВ локальным источником тепла на тропосферных высотах. Теоретически показано, что генерация внутренних гравитационных волн источником тепла не может происходить без генерации акустических волн (АВ) тем же источником. Для лучшего понимания процесса генерации волн исходная задача о генерации волн тепловым источником разделена на две — о генерации гравитационных волн и о генерации акустических волн по отдельности. По заданному произвольному источнику тепла вычислены парциальные источники акустических и гравитационных волн. Показано, что мощности этих парциальных источников имеют один порядок величины, независимо от частоты и формы источника тепла. С целью исследования амплитуд и энергий, генерируемых акустических и гравитационных волн, выполнено численное моделирование генерации и распространения этих волн по отдельности.

Показано, что парциальные источники акустических и гравитационных волн не являются чисто тепловыми, а содержат также источники

массы. Последние для акустических и гравитационных волн имеют противоположные знаки и в сумме равны нулю, т.е. закон сохранения массы выполняется. Но эти источники массы простираются до больших высот, несмотря на то, что тепловой источник локализован на тропосферных высотах. То есть, парциальные источники акустических и гравитационных волн не являются локализованными, простираются до больших высот, что создает некоторые физические эффекты, интересные для изучения.

Полученные в расчетах формулы для парциальных источников акустических и гравитационных волн, генерируемых тропосферными тепловыми источниками, позволяют оценить эффективность генерации волн каждого типа по отдельности. Анализ формул показывает, что эти волны всегда возникают вместе и параметры их взаимосвязаны.

2. ГЕНЕРАЦИЯ АГВ ТЕПЛОВЫМИ ИСТОЧНИКАМИ

Математическая постановка задачи о распространении АГВ от тепловых источников в тропосфере

Рассмотрим вопрос о генерации АВ и ВГВ тропосферными источниками тепла. В теоретическом исследовании мы будем использовать двумерные гидродинамические уравнения, описывающие распространение волн от источника тепла. Двумерные формулы более компактны, но это упрощение не оказывает существенного влияния на качественные результаты.

В нижней атмосфере амплитуды волн обычно малы из-за высокой плотности газа, поэтому можно использовать уравнения линейной волновой теории [20] и записать рассматриваемую систему в виде

$$(\rho_0 \Psi)_t + (\rho_0 U)_x + (\rho_0 W)_z = 0,$$

$$(\rho_0 U)_t + \rho_0 g H (\Psi + \Phi)_x = 0,$$

$$(\rho_0 W)_t + (\rho_0 g H (\Psi + \Phi))_z + \rho_0 g \Psi = 0,$$

$$(\rho_0 \Phi)_t + (\gamma - 1)((\rho_0 U)_x + (\rho_0 W)_z) + \frac{\alpha}{H} \rho_0 W = \rho_0 Q_\Phi(x, z, t), \quad (1)$$

где $\Psi = \frac{\rho(x, z, t) - \rho_0(z)}{\rho_0(z)}$ и $\Phi = \frac{T(x, z, t) - T_0(z)}{T_0(z)}$ —

относительные отклонения плотности и температуры от фоновой плотности атмосферы $\rho_0(z) = \frac{\rho_0(z)}{H(z)} \exp\left(\int_0^z \frac{dz}{H(z)}\right)$ и фоновой температуры

$T_0(z)$, соответственно; $H(z) = \frac{RT_0(z)}{g\mu(z)}$ — высота

однородной атмосферы, характеризующая масштаб стратификации плотности (R – универсальная газовая постоянная, $\mu(z)$ – молекулярный вес); γ – показатель адиабаты; g – ускорение свободного падения; U и W – компоненты массовой скорости газа вдоль горизонтальной оси x и вертикальной оси z ; $\alpha = \left(\gamma - 1 + \gamma \frac{dH(z)}{dz} \right)$. В правую часть последнего уравнения системы (1) входит величина, связанная со скоростью нагрева/охлаждения, $Q_\Phi(x, z, t)$. Эта величина (далее – источник) может учитывать нагрев и охлаждение газа вследствие фазовых переходов воды в атмосфере.

Дополним систему уравнений (1) стандартным нижним граничным условием на поверхности Земли:

$$W(x, z = 0, t) = 0. \tag{2}$$

Введем функцию-столбец

$$\lambda(x, z, t) = \begin{pmatrix} \Psi(x, z, t) \\ U(x, z, t) \\ W(x, z, t) \\ \Phi(x, z, t) \end{pmatrix}.$$

Для удобства запишем систему уравнений (1) в виде одного матричного уравнения:

$$\rho_0 \frac{\partial \lambda}{\partial t} + \rho_0 \hat{L} \lambda = \rho_0(z) Q(x, z, t), \tag{3}$$

где

$$\hat{L} \lambda = \begin{pmatrix} (\rho_0 U)_x + (\rho_0 W)_z \\ \rho_0 g H (\Psi + \Phi)_x \\ (\rho_0 g H (\Psi + \Phi))_z + \rho_0 g \Psi \\ (\gamma - 1) ((\rho_0 U)_x + (\rho_0 W)_z) + \frac{\alpha}{H} \rho_0 W \end{pmatrix},$$

$$Q(x, z, t) = \begin{pmatrix} Q_\Psi \\ Q_U \\ Q_W \\ Q_\Phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ Q_\Phi \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Рассмотрим λ просто как функцию пространственных переменных x и z . Введем скалярное произведение двух произвольных функций-столбцов:

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ U_1 \\ W_1 \\ \Phi_1 \end{pmatrix}, \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} \Psi_2 \\ U_2 \\ W_2 \\ \Phi_2 \end{pmatrix},$$

которое определяется формулой

$$\langle \lambda_1, \lambda_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \rho_0(z) (U_1 U_2 + W_1 W_2 + g H(z) \times \frac{(\Psi_1 + \Phi_1)(\Psi_2 + \Phi_2)}{\gamma}) dz dx + \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \rho_0(z) g H(z) \times \frac{(\Phi_1 - (\gamma - 1) \Psi_1)(\Phi_2 - (\gamma - 1) \Psi_2)}{\gamma \alpha(z)} dz dx. \tag{5}$$

Обозначим гильбертово функциональное пространство, порожденное скалярным произведением (5), как Σ . Все элементы гильбертова пространства Σ , в силу определения этого функционального пространства, удовлетворяют условию $\langle \lambda_1, \lambda_2 \rangle < \infty$ [21]. Соответственно, $\|\lambda\| = \langle \lambda, \lambda \rangle^{1/2}$.

Рассмотрим столбцы-функции $\lambda(x, z, t)$ и введем норму

$$\|\lambda\|_M = \left(\int_0^{\infty} \left(\|\lambda\|^2 + \left\| \frac{\partial \lambda}{\partial t} \right\|^2 + \left\| \frac{1}{\rho_0(z)} \hat{L} \lambda \right\|^2 \right) dt \right)^{1/2}.$$

Пусть M – Банахово пространство [21] столбцов-функций $\lambda(x, z, t)$ с нормой $\|\lambda\|_M$, удовлетворяющих нижнему граничному условию (2). Задача о генерации и распространении АГВ в атмосфере математически ставится следующим образом: в Банаховом пространстве M ищется элемент $\lambda(x, z, t)$, удовлетворяющий в слабом смысле уравнению (3).

Понятие слабого решения изложено, например, в работе [21]. Для данной задачи слабое решение определяется следующим образом. Ищется $\lambda(x, z, t) \in M$, удовлетворяющий интегральному соотношению

$$\langle \lambda_s(x, z, t = 0), \lambda(x, z, t = 0) \rangle + \int_0^{\infty} \left\langle \lambda(z, z, t), \left(\frac{\partial \lambda_s(x, z, t)}{\partial t} + \hat{L} \lambda_s(x, z, t) + Q(x, z, t) \right) \right\rangle dt = 0 \tag{6}$$

для любой дифференцируемой по всем переменным функции-столбца $\lambda_s(x, z, t)$, удовлетворяющей граничному условию (2) и обращающейся в ноль при $t \rightarrow \infty$ и отличной от нуля только в конечной области пространства, зависящей от $\lambda_s(x, z, t)$.

Поскольку мы интересуемся генерацией волн, то начальное условие возьмем в виде $\lambda(x, z, t = 0) = 0$; это условие соответствует отсутствию волн в начальный момент времени. Детали исследования гидродинамических уравнений для стратифицированного газа, доказательство существования решения и численные методы решения имеются в работе [20] для случая конечной области атмосферы и без внешних источников. Результаты этой работы легко обобщаются на случай полубеско-

нечной атмосферы, и с внешними источниками. Решения уравнения (1) можно также рассматривать как параметрически зависящую от времени t кривую в гильбертовом пространстве Σ . Известное выражение для волновой энергии [22] можно записать в удобном виде $E = \frac{1}{2} \langle \lambda, \lambda \rangle$.

Условие $E(t) = \frac{1}{2} \langle \lambda(t), \lambda(t) \rangle < \infty$ будет выполнять роль верхнего граничного условия в поставленной полубесконечной задаче о генерации и распространения волн. Нижнее граничное условие содержится в определении Банахова пространства M , в котором ищется решение.

**Случай бесконечной изотермической атмосферы.
Аналитическое решение задачи о генерации
и распространении АГВ**

Рассмотрим случай бесконечной изотермической атмосферы, т.е. $H = \text{const}$ и $\rho_0(z) = \rho_0(0) \times \exp(-z/H)$. В рамках такой модели было впервые выведено дисперсионное соотношение для АГВ и возникли основные понятия об атмосферных акустических и гравитационных волнах. Поэтому весь анализ можно выполнить строго.

Задача о распространении волн в бесконечной атмосфере ставится аналогично задаче о распространении волн в полубесконечной атмосфере из предыдущего раздела. Только в выражении (5) интеграл по переменной z берется в пределах от $(-\infty)$ до ∞ и нижнее граничное условие (2) в этом случае не требуется, поскольку условие $E(t) = \frac{1}{2} \langle \lambda, \lambda \rangle < \infty$ выполняет роль верхнего и нижнего граничных условий, а также роль граничных условий на бесконечности по горизонтали.

В случае бесконечной изотермической атмосферы можно выполнить обобщенное преобразование Фурье по пространственным переменным и перейти от $\lambda(x, z, t)$ к фурье-образу $\hat{\lambda}(k_x, k_z, t)$, определяемому формулой

$$\hat{\lambda}(k_x, k_z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda(x, z, t) e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-z/2H} dx dz, \quad (7)$$

где k_x, k_z – горизонтальная и вертикальная компоненты волнового вектора k соответственно.

Тогда уравнение (3) преобразуется в систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$i \frac{d\hat{\lambda}(k_x, k_z, t)}{dt} + \hat{L}(k_x, k_z) \hat{\lambda}(k_x, k_z, t) = \tilde{Q}(k_x, k_z, t). \quad (8)$$

Уравнения (8) эквивалентны уравнениям (3) и описывают эволюцию волн в k -пространстве или k -представлении. Здесь $\hat{L}(k_x, k_z)$ – матричный

4×4 оператор, получающийся из выражения (4) при фурье-преобразовании. В правые части уравнений (8) входит величина, $\tilde{Q}(k_x, k_z, t)$, которая представляет собой фурье-образ источника в выражении (3) и определяется формулой

$$\tilde{Q}(k_x, k_z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(x, z, t) e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-z/2H} dx dz, \quad (9)$$

аналогичной формуле (7).

Изучим задачу на собственные значения

$$\hat{L}(k_x, k_z) \Pi = \omega \Pi \quad (10)$$

для матрицы $\hat{L}(k_x, k_z)$. Собственные значения ω матрицы $\hat{L}(k_x, k_z)$ действительны, различны и совпадают с корнями $\pm\omega_A, \pm\omega_G$ дисперсионного соотношения для АГВ [22, 23]. Нижние индексы “А”, “G” отмечают решения для акустических и внутренних гравитационных волн.

Собственные векторы Π_A^\pm, Π_G^\pm матрицы $\hat{L}(k_x, k_z)$ линейно независимы и образуют базис в пространстве четырехмерных столбцов. Они совпадают с поляризационными соотношениями для акустической и гравитационной волн:

$$\begin{aligned} \Pi_A^\pm &= \begin{pmatrix} a_1(k_x, k_z) \\ \pm a_2(k_x, k_z) \\ \pm a_3(k_x, k_z) \\ a_4(k_x, k_z) \end{pmatrix} = \\ &= \frac{H}{g} \begin{pmatrix} (-iHK_z + 1)\omega_A^2 - (\gamma - 1)k_x^2 g H \\ \mp \omega_A g k_x H (i\gamma K_z H - 1) \\ \pm \omega_A H (-\omega_A^2 + Hk_x^2 g \gamma) \\ -(\gamma - 1)H (i\omega_A^2 K_z - k_x^2 g) \end{pmatrix}, \\ \Pi_G^\pm &= \begin{pmatrix} b_1(k_x, k_z) \\ \pm b_2(k_x, k_z) \\ \pm b_3(k_x, k_z) \\ b_4(k_x, k_z) \end{pmatrix} = \\ &= \frac{H}{g} \begin{pmatrix} (-iHK_z + 1)\omega_G^2 - (\gamma - 1)k_x^2 g H \\ \mp \omega_G g k_x H (i\gamma K_z H - 1) \\ \pm \omega_G H (-\omega_G^2 + Hk_x^2 g \gamma) \\ -(\gamma - 1)H (i\omega_G^2 K_z - k_x^2 g) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $K_z = k_z - \frac{i}{2H}$. В соотношениях (11) частоты ω_A, ω_G предполагаются явно выраженными через k_x, k_z , при этом $\omega_A > 0, \omega_G > 0$.

Общее решение системы уравнений (8) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \lambda(k_x, k_z, t) &= \hat{\lambda}_A(k_x, k_z, t) + \hat{\lambda}_G(k_x, k_z, t). \\ \hat{\lambda}_A(k_x, k_z, t) &= A^+(k_x, k_z, t)\Pi_A^+(k_x, k_z) + \\ &+ A^-(k_x, k_z, t)\Pi_A^-(k_x, k_z), \\ \hat{\lambda}_G(k_x, k_z, t) &= G^+(k_x, k_z, t)\Pi_G^+(k_x, k_z) + \\ &+ G^-(k_x, k_z, t)\Pi_G^-(k_x, k_z). \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь функции $A^\pm(k_x, k_z, t)$, $G^\pm(k_x, k_z, t)$ – решения обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dA^\pm(k_x, k_z, t)}{dt} \pm i\omega_A(k_x, k_z)A^\pm(k_x, k_z, t) &= \\ &= \tilde{Q}_A^\pm(k_x, k_z, t), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{dG^\pm(k_x, k_z, t)}{dt} \pm i\omega_G(k_x, k_z)G^\pm(k_x, k_z, t) &= \\ &= \tilde{Q}_G^\pm(k_x, k_z, t). \end{aligned} \quad (14)$$

Поскольку уравнение (13) содержит частоту акустических волн $\omega_A(k_x, k_z)$, но не содержит частоты гравитационных волн, то мы можем интерпретировать выражение (13) как уравнение для акустических волн. Аналогично, уравнение (14) содержит частоту гравитационных волн $\omega_G(k_x, k_z)$, но не содержит частоты акустических волн, и мы можем интерпретировать выражение (14) как уравнение для гравитационных волн.

При выводе уравнений (13) и (14) в их правых частях этих уравнений появляются функции $\tilde{Q}_A^\pm(k_x, k_z, t)$ и $\tilde{Q}_G^\pm(k_x, k_z, t)$, которые можно рассматривать в качестве источников акустических и гравитационных волн соответственно. Для источников, $\tilde{Q}_A^\pm(k_x, k_z, t)$ и $\tilde{Q}_G^\pm(k_x, k_z, t)$, АВ и ВГВ волн справедливы следующих выражения:

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_A^\pm(k_x, k_z, t) &= \frac{1}{2} \left(\frac{b_4\tilde{Q}_\Psi - b_1\tilde{Q}_\Phi}{a_1b_4 - a_4b_1} \pm \frac{b_3\tilde{Q}_U - b_2\tilde{Q}_W}{a_2b_3 - a_3b_2} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \frac{-b_1\tilde{Q}_\Phi}{a_1b_4 - a_4b_1}, \\ \tilde{Q}_G^\pm(k_x, k_z, t) &= \frac{1}{2} \left(\frac{a_4\tilde{Q}_\Psi - a_1\tilde{Q}_\Phi}{b_1a_4 - b_4a_1} \pm \frac{b_3\tilde{Q}_U - b_2\tilde{Q}_W}{b_2a_3 - b_3a_2} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \frac{-a_1\tilde{Q}_\Phi}{b_1a_4 - b_4a_1}. \end{aligned} \quad (15)$$

Решения уравнений (15) имеют вид

$$\begin{aligned} A^\pm(k_x, k_z, t) &= \\ &= \exp(\mp i\omega_A t) \int_0^t \exp(\pm i\omega_A t') \tilde{Q}_A^\pm(k_x, k_z, t') dt', \\ G^\pm(k_x, k_z, t) &= \\ &= \exp(\mp i\omega_G t) \int_0^t \exp(\pm i\omega_G t') \tilde{Q}_G^\pm(k_x, k_z, t') dt'. \end{aligned} \quad (16)$$

Из формул (15) и (16) видно, что источники \tilde{Q}_A^\pm и \tilde{Q}_G^\pm акустических и гравитационных волн, соответственно, одного и того же порядка. Это связано со сходством поляризационных соотношений Π_A^\pm, Π_G^\pm для акустических и гравитационных волн. Этот вывод не зависит от частоты теплового источника $Q_\Phi(x, z, t)$. Далее приводится строгое вычисление мощностей источников акустических и гравитационных волн. Будет показано, что мощности этих источников всегда не сильно различаются.

Из факта, что мощности источников АВ и ВГВ одного порядка, все же не следует, что амплитуды или энергии генерируемых акустических и гравитационных волн являются величинами одного порядка и не зависят от частоты теплового источника. Действительно, если энергия теплового источника $Q_\Phi(x, z, t)$ обусловлена метеорологическими процессами, то он имеет характерное время изменения τ , заведомо большее, чем обратная частота Вэйсяля–Брента, N , [23], т.е. выполняется соотношение $\tau N \gg 1$. Соответственно, характерное время τ изменения источника заведомо больше частоты акустической отсечки Ω_A и $\tau\Omega_A \gg 1$. Несложно показать, что в этом случае значение интеграла выражении (16) для акустических волн “зарезается” быстро осциллирующим множителем $\exp(\pm i\omega_A t')$ в подынтегральном выражении в формуле (16), и, таким образом, амплитуды генерируемых акустических волн меньше амплитуд гравитационных волн и зависят от частоты источника.

Физически это объясняется следующим образом. Каждая гармоника акустических волн быстро осциллирует со временем и постоянно изменяет знак. Во время положительной фазы волна растет под воздействием источника, но затем наступает отрицательная фаза, и источник работает против волны и гасит ее. В результате акустическая волна значительной амплитуды при медленно изменяющемся источнике образоваться не может

В качестве простейшего примера рассмотрим выражение для источника в виде

$$\tilde{Q}_A^\pm(k_x, k_z, t) = C \exp(i\sigma_1 t) \exp(-\sigma_2 t),$$

где $\sigma_1 = 1/\tau$ характерная частота источника и σ_2 – скорость затухания источника. Предполагается, что $\sigma_1 \gg \sigma_2$. Вычисляя интеграл в выражении (16), получаем

$$A_A^\pm(k_x, k_z, t) = \frac{-iC}{(\pm\omega_A - \sigma) + i\sigma_2} \left[e^{(i\sigma_1 - i\sigma_2)t} - e^{\mp i\omega_A t} \right]. \quad (17)$$

Из формулы (17) видно, что низкочастотный источник возбуждает как вынужденное возмущение, $\frac{-iC}{(\pm\omega_A - \sigma) + i\sigma_2} e^{(i\sigma_1 - i\sigma_2)t}$, на частоте источни-

ка, так и свободно распространяющуюся акустическую волну, $\frac{-iC}{(\pm\omega_A - \sigma) + i\sigma_2} e^{\mp i\omega_A t}$, остающуюся после выключения источника. Вынужденное возмущение мы относим к акустическим возмущениям потому, что оно удовлетворяет уравнению (13) для АВ. Вынужденное возмущение всегда появляется в паре со свободно распространяющейся акустической волной и исчезает после выключения источника, в то время как свободно распространяющаяся волна остается и после выключения источника.

Мы также видим, что спектр свободно распространяющихся акустических волн, генерируемых низкочастотным источником, широкий. Амплитуда генерируемых гармоник акустических волн медленно затухает с ростом частоты гармоник. Амплитуда генерируемых АВ оценивается как амплитуда источника, $\tilde{Q}_A^\pm(k_x, k_z, t')$, умноженная на $\left| \frac{1}{\omega_A - \sigma} \right|$, где σ – характерная частота источника, амплитуда которого равна $\frac{\max \left| \tilde{Q}_A^\pm(k_x, k_z, t') \right|}{\omega_A + \sigma}$.

Если частота источника попадает в диапазон частот внутренних гравитационных волн, то амплитуда ВГВ, $G^\pm(k_x, k_z, t)$, линейно растет со временем, пока источник активен. Реальные метеорологические конвективные источники обычно непериодичны и амплитуда гравитационной волны оценивается как произведение амплитуды источника на время его активности. Тепловые метеорологические источники с частотами ниже частоты Вейселя–Брента генерируют в основном внутренние гравитационные волны. Но они также обязательно генерируют и инфразвуковые волны, амплитуда которых меньше амплитуды гравитационных волн.

Выше выполнен анализ решения уравнений в \mathbf{k} -представлении. Для перехода к обычному, координатному представлению необходимо выполнить обратное преобразование Фурье. Тогда из уравнений (13) и (14) следуют уравнения для акустических и гравитационных волн по отдельности в обычном, координатном представлении, а выражение (16) даст аналитические решения этих уравнений в координатном представлении.

Акустические и внутренние гравитационные волны в терминах поляризационных соотношений

Рассмотрим выражения (12) для акустических и гравитационных волн. В этих выражениях функции $A^+(k_x, k_z, t)$, $A^-(k_x, k_z, t)$, $G^+(k_x, k_z, t)$, $G^-(k_x, k_z, t)$ определяются начальным условием и

внешними источниками. Поляризационные соотношения Π_A^\pm и Π_G^\pm показывают, что гидродинамические переменные (колебания температуры, плотности, компоненты гидродинамической скорости) у волны связаны между собой, причем эта связь зависит от типа волны. Из формул (12) следуют уравнения, связывающие гидродинамические переменные в акустической и гравитационной волнах:

$$\begin{cases} a_4(k_x, k_z) \tilde{\Psi}_A(k_x, k_z, t) = a_1(k_x, k_z) \tilde{\Phi}_A(k_x, k_z, t) \\ a_3(k_x, k_z) \tilde{U}_A(k_x, k_z, t) = a_2(k_x, k_z) \tilde{W}_A(k_x, k_z, t), \\ b_4(k_x, k_z) \tilde{\Psi}_G(k_x, k_z, t) = b_1(k_x, k_z) \tilde{\Phi}_G(k_x, k_z, t) \\ b_3(k_x, k_z) \tilde{U}_G(k_x, k_z, t) = b_2(k_x, k_z) \tilde{W}_G(k_x, k_z, t). \end{cases} \quad (18)$$

Здесь $\tilde{\Psi}_A(k_x, k_z, t)$, $\tilde{\Psi}_G(k_x, k_z, t)$, $\tilde{\Phi}_A(k_x, k_z, t)$, $\tilde{\Phi}_G(k_x, k_z, t)$, $\tilde{U}_A(k_x, k_z, t)$, $\tilde{U}_G(k_x, k_z, t)$, $\tilde{W}_A(k_x, k_z, t)$, $\tilde{W}_G(k_x, k_z, t)$ – фурье-образы функций $\Psi_A(x, z, t)$, $\Psi_G(x, z, t)$, $\Phi_A(x, z, t)$, $\Phi_G(x, z, t)$, $U_A(x, z, t)$, $U_G(x, z, t)$, $W_A(x, z, t)$, $W_G(x, z, t)$, которые можно вычислить. Сумма акустической и гравитационной волн должна давать полную наблюдаемую АГВ, поэтому дополним систему уравнений (18) соответствующими соотношениями:

$$\begin{cases} \tilde{\Psi}_A(k_x, k_z, t) + \tilde{\Psi}_G(k_x, k_z, t) = \tilde{\Psi}(k_x, k_z, t), \\ \tilde{\Phi}_A(k_x, k_z, t) + \tilde{\Phi}_G(k_x, k_z, t) = \tilde{\Phi}(k_x, k_z, t), \\ \tilde{U}_A(k_x, k_z, t) + \tilde{U}_G(k_x, k_z, t) = \tilde{U}(k_x, k_z, t), \\ \tilde{W}_A(k_x, k_z, t) + \tilde{W}_G(k_x, k_z, t) = \tilde{W}(k_x, k_z, t). \end{cases} \quad (19)$$

Система уравнений (18) и (19) вместе дает замкнутую систему уравнений, позволяющую выделить в гидродинамических полях вклад акустических и гравитационных волн по отдельности. Для этого нужно совместно решить уравнения (18), (19).

Производя обратное фурье-преобразование соотношений (18), приходим к уравнениям связи гидродинамических переменных для волн различных типов в обычных, пространственных переменных:

$$\begin{cases} \hat{l}_{4A} \Psi_A(x, z, t) = \hat{l}_{1A} \Phi_A(x, z, t) \\ \hat{l}_{3A} U_A(k_x, k_z, t) = \hat{l}_{2A} W_A(x, z, t), \\ \hat{l}_{4G} \Psi_G(x, z, t) = \hat{l}_{1G} \Phi_G(x, z, t) \\ \hat{l}_{3G} U_G(x, z, t) = \hat{l}_{2G} W_G(x, z, t). \end{cases} \quad (20)$$

Уравнения (20) сложные и являются псевдодифференциальными, так как в a_i и b_i входят частоты $\omega_A(k_x, k_z)$, $\omega_G(k_x, k_z)$, которые содержат корни квадратные от сложных алгебраически функций переменных k_x, k_z . Операторы \hat{l}_{1A} , \hat{l}_{2A} , \hat{l}_{3A} , \hat{l}_{4A} , \hat{l}_{1G} , \hat{l}_{2A} , \hat{l}_{3G} , \hat{l}_{4G} здесь явно не выписаны, поскольку они

громоздкие, но их несложно вычислить исходя из (18) и (11).

Если мы хотим использовать уравнения (20) для выделения вкладов АВ и ВГВ в гидродинамических полях, то должны добавить к ним естественные уравнения, аналогичные (19):

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}_A(x, z, t) + \tilde{\Psi}_G(x, z, t) &= \tilde{\Psi}(x, z, t), \\ \tilde{\Phi}_A(x, z, t) + \tilde{\Phi}_G(x, z, t) &= \tilde{\Phi}(x, z, t), \\ \tilde{U}_A(x, z, t) + \tilde{U}_G(x, z, t) &= \tilde{U}(x, z, t), \\ \tilde{W}_A(x, z, t) + \tilde{W}_G(x, z, t) &= \tilde{W}(x, z, t). \end{aligned} \quad (21)$$

Тогда получается замкнутая система уравнений, позволяющая в любой момент времени t по известным волновым полям $\Phi(x, z, t)$, $\Psi(x, z, t)$, $U(x, z, t)$, $W(x, z, t)$ вычислить вклад акустических и гравитационных волн по отдельности в общую волновую картину.

Точные уравнения (20), в которых явно выписаны операторы \hat{l}_{iA} и \hat{l}_{iG} , сложны и громоздки. В частных случаях они существенно упрощаются. Например, в работах [24–27] изучалась связь гидродинамических переменных в АВ и ВГВ в приближении длинных волн, когда $k_x^2 \ll k_z^2 + 1/4H^2$. Было показано, что в этом случае скалярные переменные в акустической волне связаны простым приближенным соотношением вида

$$\frac{\partial f_A}{\partial z} - \rho_0 \Psi_A = 0, \quad f_A = \frac{H}{\alpha} \rho_0 [\Phi_A - (\gamma - 1) \Psi_A]. \quad (22)$$

Во внутренней гравитационной волне в этом же приближении скалярные переменные связаны следующим соотношением:

$$\frac{\partial P_G}{\partial z} - \rho_0 \Psi_G = 0, \quad P_G = \rho_0 g [\Phi_G + \Psi_G]. \quad (23)$$

Соотношение (23) часто называют приближением квазистатики, оно широко применяется в моделировании внутренних гравитационных волн. Соотношение (22) приведено в работах [24–27]. Соотношение (23) можно также вывести из требования ортогональности, в смысле скалярного произведения (5), гидродинамических переменных АВ к переменным ВГВ. Ортогональность переменных акустической волны к переменным внутренней гравитационной волны следует из самосопряженности оператора \hat{L} , определенного в выражении (4), по отношению к скалярному произведению (5).

Упрощенные уравнения, связывающие компоненты гидродинамической скорости у волны каждого типа, аналогичные соотношениям (22), (23), но для скоростей, также представлены в работах [24–27]. В данной работе они нам не интересны, и поэтому здесь не рассматриваются.

Решение задачи о генерации и распространении акустико-гравитационных волн можно рассматривать как параметризованную временем t кривую $\lambda(t)$ в гильбертовом пространстве Σ , введенном ранее. Соотношения (20) выделяют в Σ инвариантные ортогональные подпространства Σ_A и Σ_G , соответствующие акустическим и гравитационным волнам. Это можно трактовать как расщепление пространства Σ на инвариантные ортогональные подпространства (Σ_A и Σ_G). Акустическая волна в такой интерпретации есть кривая $\lambda_A(t)$ в Σ_A , а гравитационная волна – кривая $\lambda_G(t)$ в Σ_G . То есть, математически разделение задачи о распространении акустико-гравитационных волн на отдельные задачи о распространении акустических и гравитационных волн можно трактовать как разделение исходной задачи на отдельные задачи на инвариантных ортогональных подпространствах Σ_A и Σ_G .

Разделение задачи о генерации волн тепловым источником на задачу о генерации АВ и задачу о генерации ВГВ; парциальные источники АВ и ВГВ

Изложенный алгоритм выделения вкладов акустических и гравитационных волн в общей волновой картине, основанный на уравнениях (20), (21), можно применить к внешним источникам волн и выделить части, ответственные за генерацию акустических и гравитационных волн, по отдельности. В этом случае в уравнения (20), (21) подставляются соответствующие источники для каждой из гидродинамических переменных. Мы будем называть эти вычисляемые источники парциальными источниками акустических и гравитационных волн, поскольку в сумме они равны заданным внешним источникам.

Если вместо уравнений (20) использовать приближенные соотношения (22) и (23) и применить их к тепловому источнику $Q_\Phi(x, z, t)$, то для парциальных источников акустических и гравитационных волн получаем выражения:

$$\begin{aligned} Q_{A,\Phi}(x, z, t) &= \frac{\gamma - 1}{\gamma} Q_\Phi(x, z, t), \\ Q_{G,\Phi}(x, z, t) &= \frac{1}{\gamma} Q_\Phi(x, z, t), \\ Q_{A,\Psi}(x, z, t) &= -Q_{G,\Psi}(x, z, t) = \\ &= \frac{1}{\gamma} \left(Q_\Phi(x, z, t) - \frac{1}{H} \int_{-\infty}^z Q_\Phi(x, z', t) dz' \right). \end{aligned} \quad (24)$$

Соотношения (24) выведены для безграничной атмосферы, тем не менее можно считать, что $Q_\Phi(x, z, t) = 0$ при $z \leq 0$, и что $Q_\Phi(x, z, t)$ “исчезает” несколько выше поверхности Земли. Тогда форму-

лы можно применить и к полубесконечной атмосфере. Очевидно, что $Q_{A,\Phi}(x, z, t) + Q_{G,\Phi}(x, z, t) = Q_{\Phi}(x, z, t)$, $Q_{A,\Psi}(x, z, t) + Q_{G,\Psi}(x, z, t) = 0$.

Обратим внимание, что изначально задан источник тепла $Q_{\Phi}(x, z, t)$, но при этом вычисленные парциальные источники акустических и гравитационных волн содержат также источники массы $Q_{A,\Psi}(x, z, t)$ и $Q_{G,\Psi}(x, z, t)$, которые в сумме равны нулю. Появление этих источников массы обусловлено тем, что колебания плотности в акустической и гравитационной волнах согласованы с колебаниями температуры. Поскольку $Q_{A,\Psi}(x, z, t) + Q_{G,\Psi}(x, z, t) = 0$, то нарушения закона массы не происходит, несмотря на появления источников массы.

Сравнительная оценка мощностей парциальных источников акустических и гравитационных волн

Поскольку для парциальных источников АВ и ВГВ имеются явные формулы (3), то можно оценить и сравнить мощности этих источников. Изменение энергии волны $\lambda(x, z, t)$ внешними источниками, определенными в столбце $Q(x, z, t)$, за одну секунду характеризуется выражением $\langle \lambda, Q \rangle$ и зависит не только от источника Q , но и от волнового поля в момент времени t . Если начальное волновое возмущение отсутствует, то, на небольших временах, $\lambda = Qt$, и выражение для мощности приобретает особенно простой вид $-\langle Q, Q \rangle$. Мы будем применять это выражение, $\langle Q, Q \rangle$, для оценки мощностей источников в любой момент времени, а не только при малых t , потому что оно характеризует именно источники, и не зависит от волнового поля.

Таким образом, для оценки мощностей парциальных источников можно предложить следующие формулы:

$$\begin{aligned} N_A &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{H}{g}} \langle Q_A, Q_G \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{gH^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_0 \left(\frac{Q_{A,\Phi}^2}{\gamma-1} + Q_{A,\Psi}^2 \right) dx dz, \\ N_G &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{H}{g}} \langle Q_G, Q_G \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{gH^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_0 \left(\frac{Q_{G,\Phi}^2}{\gamma-1} + Q_{G,\Psi}^2 \right) dx dz. \end{aligned} \quad (25)$$

Размерности в формулах (25) для мощностей отрегулированы с помощью множителей $\sqrt{\frac{H}{g}}$. Поскольку интерес представляют сравнительные мощности, то эти, введенные в формулы общие

множители, не влияют на относительные величины, и не важны.

Нет необходимости вычислять интегралы в выражении (25), поскольку можно привлечь очевидную дополнительную формулу:

$$N = N_A + N_G = \frac{1}{2} \sqrt{gH^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_0 \left(\frac{Q_{\Phi}^2}{\gamma-1} \right) dx dz. \quad (26)$$

В результате совместного рассмотрения выражений (24), (25) и (26) приходим к формулам

$$N_A = \frac{(\gamma-1)}{\gamma} N, \quad N_G = \frac{1}{\gamma} N, \quad \frac{N_A}{N_G} = (\gamma-1). \quad (27)$$

Таким образом, для случая тепловых внешних источников мощности парциальных источников акустических и гравитационных волн всегда различаются примерно вдвое, и это не зависит от их формы и частоты. Применим полученные формулы (24) для численного расчета отдельной генерации акустических и гравитационных волн, создаваемых тропосферным источником тепла $Q_{\Phi}(x, z, t)$.

3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ АКУСТИЧЕСКИХ И ГРАВИТАЦИОННЫХ ВОЛН ТРОПОСФЕРНЫМ ИСТОЧНИКОМ ТЕПЛА

Модельный тропосферный источник тепла

Для численного отдельного расчета генерации и распространения акустических и гравитационных волн, создаваемых тропосферным источником тепла, применим численную модель атмосферных процессов высокого разрешения "AtmoSym", основанную на решении системы нелинейных гидродинамических уравнений для атмосферного газа в поле тяжести. Уравнения модели приведены в статье [28]. Хотя модель "AtmoSym" нелинейная, но на высотах ниже 100 км амплитуда рассматриваемых волн мала, и нелинейность уравнений практически не сказывается.

Поскольку формулы (24) выведены для изотермической атмосферы, то будем задавать в "AtmoSym" фоновую температуру постоянной до высоты 120 км, а выше — используем модель стратификации с ростом температуры. На рис. 1 представлена зависимость $H(z) = \frac{RT_0}{g\mu(z)}$ для используемой в расчетах модели стратификации.

Модельный тропосферный источник тепла в расчетах задан гауссовой функцией в виде

$$Q_{\Phi}(x, z, t) = A \exp \left\{ -\left(\frac{x - x_c}{l_x^2} \right)^2 - \left(\frac{z - z_c}{l_z^2} \right)^2 \right\} \sin(\omega t) \times \begin{cases} 1, & \text{если } t < t_0 \\ \exp\left(\frac{t_0 - t}{\tau}\right), & \text{если } t \geq t_0 \end{cases} \quad (28)$$

Здесь A – амплитуда источника, которая специально выбрана малой, чтобы, по крайней мере, до высоты, не превышающей 100 км, обеспечить как малые амплитуды волн, так и выполнение принципа линейной суперпозиции. Частота источника составляет $\omega = \frac{2\pi}{T}$, где $T = 0.5$ ч; параметры $l_x = 8$ км, $l_z = 2$ км. Они определяют размеры рассматриваемого источника и выбраны так, чтобы примерно соответствовали небольшому облаку. Параметр x_c определяет положение центра источника относительно горизонтальной оси X , z_c – положение центра источника относительно вертикальной оси Z и равен $z_c = 6$ км. Параметр $t_0 = 1$ ч задает характерное время работы источника, $\tau = 10$ мин определяет скорость выключения источника.

Тепловые источники с более сложным поведением можно построить путем сложения нескольких источников вида (28) с различными параметрами. Поскольку амплитуда волн в нижней атмосфере мала, то волновую картину для сложных источников можно получить сложением волновых картин от источников вида (28). Следовательно, для изучения волн от разнообразных тепловых источников на тропосферных высотах (28) достаточно формул (27) и (28).

В расчетах ниже используются парциальные источники акустических и гравитационных волн, вычисленные в выражении (24) по источнику тепла $Q_{\Phi}(x, z, t)$, описанного формулой (28). Результаты расчетов представлены далее.

Волновые поля для акустических и гравитационных волн на высотах ниже 50 км

Рассмотрим распространение волн вверх из тропосферы в верхнюю атмосферу на высотах ниже 50 км. Волны на таких высотах практически не подвержены действию нелинейности и диссипации, и поэтому для них выполняется принцип линейной суперпозиции и возможно разделение теплового источника на сумму источников, излучающих ВГВ и АВ по отдельности.

На рис. 2 представлены волновые возмущения температуры на высотах ниже 50 км, создаваемые

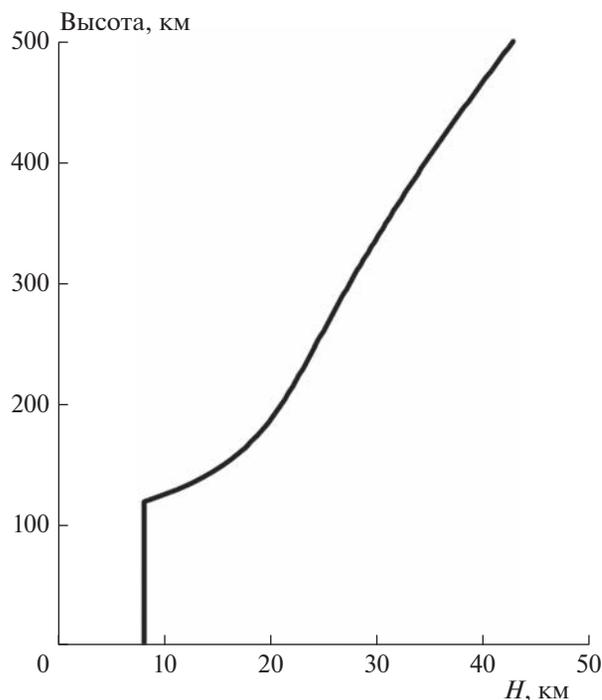


Рис. 1. Высота однородной атмосферы H в зависимости от высоты z для используемой в расчетах модели стратификации.

парциальными источниками гравитационных и акустических волн, соответственно, для следующих моментов времени: $t = 10$ мин, 40 мин, 1 ч, 2 ч.

Формулы (24) для разделения теплового источника на источники акустических и гравитационных волн приближенные и выведены в предположении, что горизонтальный масштаб волн значительно больше вертикального. Обсудим качество произведенного приближенного разделения волн. На рис. 2а–г мы видим типичную картину распространения гравитационных волн, когда они распространяются вдоль “лучей”, выходящих из источника под углом к горизонту в некотором диапазоне углов. На рис. 2д–з видна волновая картина, типичная для акустических волн: волновой фронт примерно перпендикулярен направлению распространения волн. Скорость распространения АВ на рис. 2 близка к скорости звука. К моменту времени $t = 1$ ч АВ “достигают” горизонтальных границ области интегрирования уравнений, и частично “уходят” через горизонтальные границы; используемые граничные условия на горизонтальных границах это допускают.

При $t > 1$ ч в центре картин акустических волн появились структуры, похожие на гравитационные волны. Акустические волны к этому времени уже почти “покинули” расчетную область, и ам-

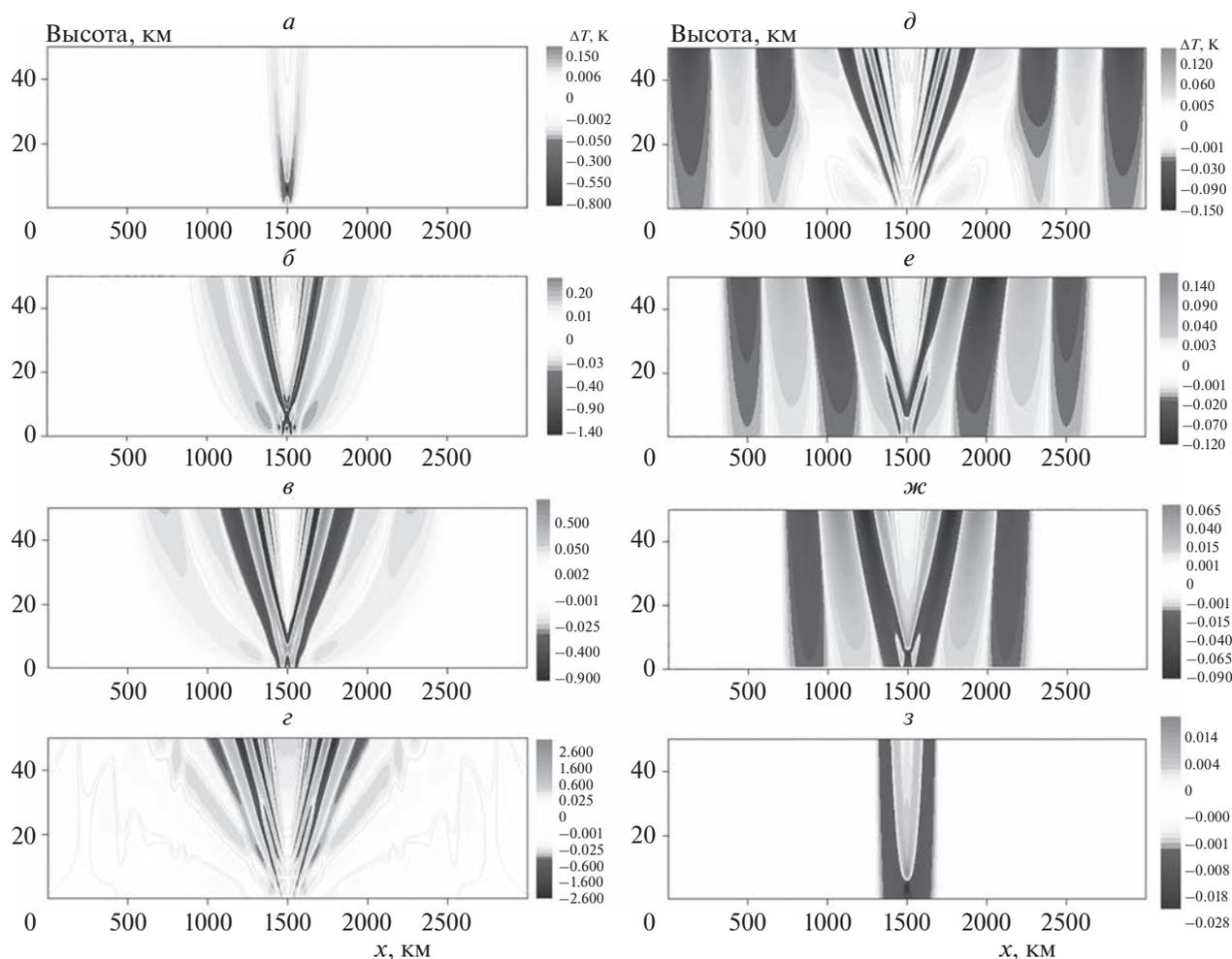


Рис. 2. Поля волновых возмущений температуры атмосферы (K) в интервале высот 0–50 км для следующих моментов времени: $t = 10$ мин (а, з), 40 мин (б, ж), 1 ч (в, е), 2 ч (г, д). Слева – для источника, излучающего гравитационные волны; справа – для акустического источника (см. формулы (28)).

плитуды волн в правой колонке меньше амплитуд волн в левой колонке более чем на порядок; следовательно, этот эффект может быть проигнорирован без обсуждения. Можно сделать вывод, что разделение гравитационных и акустических волн выполнено успешно. Мы допускаем что, на рис. 2 для гравитационных волн, могут присутствовать также акустические волны, но они не видны по причине крайней малости амплитуд этих волн.

Рисунок 2 показывает, что амплитуды генерируемых гравитационных волн, по крайней мере, на порядок превышают амплитуды акустических волн. Это заключение верно и для трехмерного случая.

Сравним энергии генерируемых волн. Энергии волн пропорциональны квадрату их амплитуд. Амплитуды гравитационных волн – на порядок большие, но область пространства, занимаемая акустическими волнами, в несколько раз

больше. Можно примерно оценить по графикам для $t = 1$ ч области пространства, занимаемые гравитационными и акустическими волнами по отдельности. Получается, что энергии гравитационных волн примерно на порядок больше энергий акустических волн.

Проведенное сравнение амплитуд вычисленных волн подтвердило теоретический вывод о том, что низкочастотные источники могут генерировать акустические волны лишь небольшой амплитуды. Простые соображения показывают, что сравнительная оценка энергий генерируемых волн справедлива и для трехмерного случая.

Можно заметить, что АВ и ВГВ возникают не только в области локализации источника, но и несколько выше теплового источника (28). Это также видно из формул (24) для парциальных источников волн.

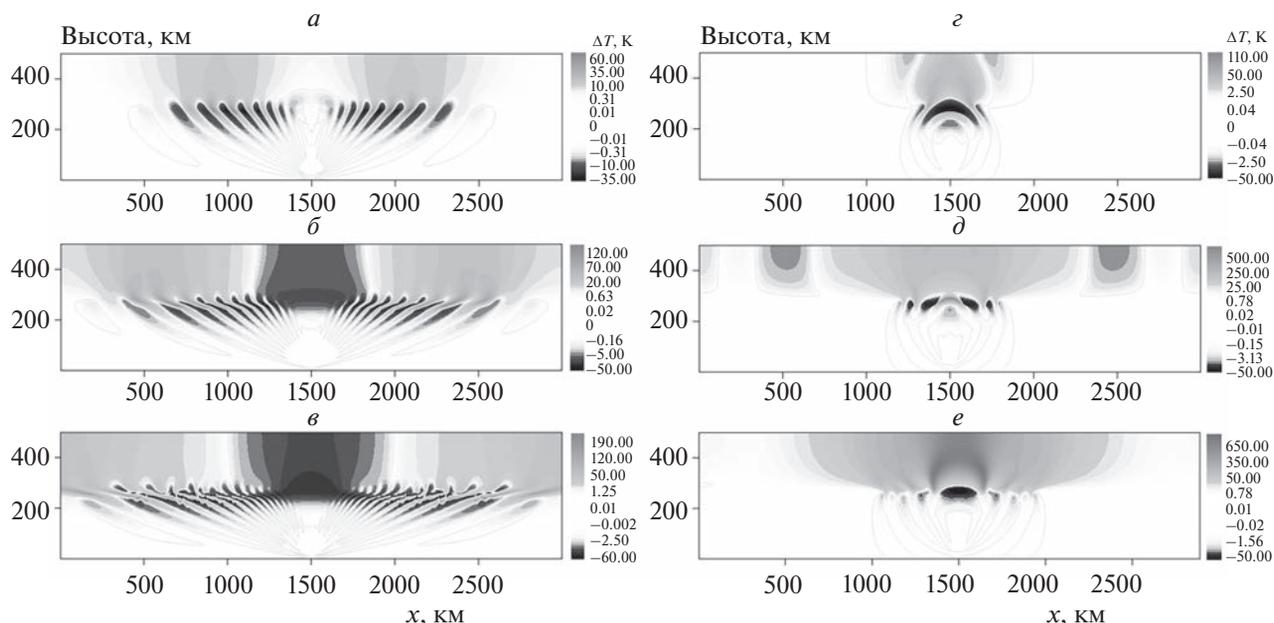


Рис. 3. Поля волновых возмущений температуры атмосферы (K) в интервале высот 0–500 км. Слева – для гравитационных волн в следующие моменты времени: $t = 55$ мин (а), 1 ч 13 мин (б), 1 ч 34 мин (в); справа – для акустических волн в следующие моменты времени: $t = 16$ мин (z), 20 мин (д), 26 мин (е). Источники волн характеризуются формулами (28).

Волновые поля для акустических и гравитационных волн на высотах ниже 500 км

Волны в изотермической атмосфере

На рис. 3 представлены результаты раздельного расчета распространения АВ и ВГВ от теплового источника в изотермической атмосфере. Поскольку модель “AtmoSym” нелинейная, то на больших высотах (выше 250 км) существенно проявляют себя нелинейные эффекты, где волны разрушаются, диссипируют и нагревают атмосферу. Из рис. 3 для гравитационных волн видны области охлаждения атмосферы на больших высотах, возникающие после “ухода” волн. Следует заметить, что в реальной атмосфере температура растет с ростом высоты выше 100 км, а плотность убывает с высотой не так сильно, как в изотермическом случае. Поскольку с увеличением высоты амплитуда волн растет примерно обратно пропорционально $\rho^{1/2}$, то в изотермической атмосфере на больших высотах нелинейные эффекты проявляются значительно сильнее, чем в реальной атмосфере. Расчеты распространения акустических волн (рис. 3z–e) выполнены только до момента времени $t = 26$ мин. Это обусловлено тем, что на больших временах и на больших высотах волны “разрушаются”, и приходится использовать очень малые шаги по времени, что делает дальнейшие расчеты неэффективными.

Ниже 200–250 км амплитуды волн невелики, и наблюдаются типичные картины распростране-

ния ВГВ и АВ по отдельности. Гравитационные волны распространяются вдоль направления “лучей”, выходящих из источника, под углом к горизонту. Фазовый фронт акустических волн примерно перпендикулярен направлению распространения этих волн.

Общая картина распространения волн от теплового источника, находящегося на высотах ниже 200–250 км образуется просто суммированием волновых картин для гравитационных и акустических волн. По результатам мы можем заключить, что разделение исходного теплового источника на источники ВГВ и АВ выполнено успешно.

Также отметим, что рис. 3a–в справа демонстрируют распространение акустических, и только акустических, волн от низкочастотного источника (24). Таким образом, построена модель (24) низкочастотного источника, который генерирует только акустические волны, несмотря на низкую частоту источника, и не излучает гравитационные волны. Уменьшение частоты построенного источника не изменит этого его свойства. Однако источник (24) сложный, и содержит как источник тепла, так и источник массы.

На высотах ниже 50 км амплитуды акустических волн, генерируемых низкочастотным источником, были, по крайней мере, на порядок меньше амплитуд гравитационных волн, что давало основания пренебрегать акустическими волнами. Однако выше 50 км амплитуды акустических волн все же сравниваются с амплитудами грави-

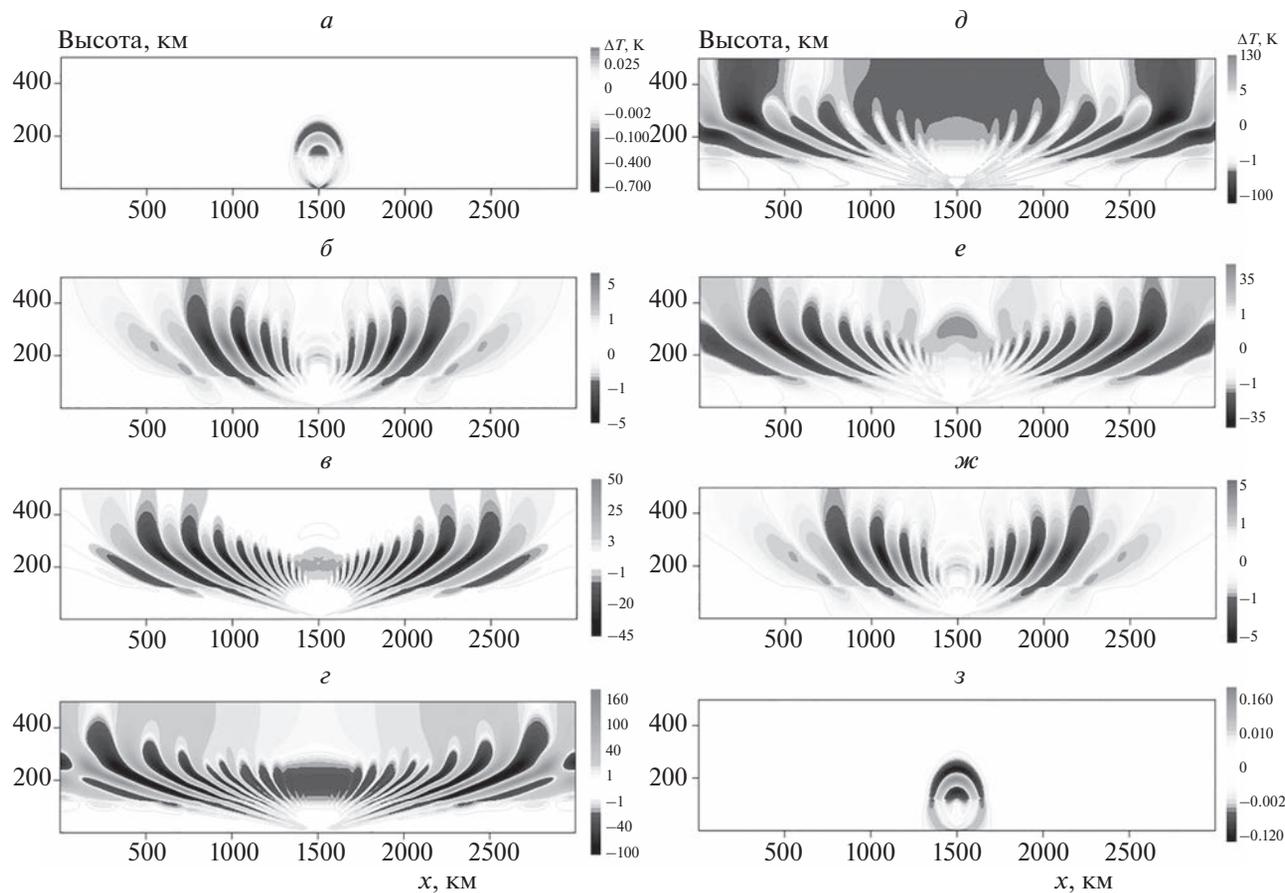


Рис. 4. Поля волновых возмущений температуры атмосферы (К) в интервале высот 0–500 км для следующих моментов времени: $t = 10$ мин (а, з), 40 мин (б, ж), 1 ч 20 мин (в, е), 2 ч (г, д). Слева – для источника, излучающего гравитационные волны; справа – для акустического источника (см. формулы (28)).

тационных волн, и нагрев атмосферы АВ не уступает нагреву ВГВ, причем нагрев акустическим волнами происходит над источником. В то же время гравитационные волны, распространяясь на большие расстояния, воздействуют на атмосферу на расстояниях порядка 1000 км и более от источника. Следовательно, суммарная передача энергии атмосфере от гравитационных волн может быть больше.

Волны в неизотермической атмосфере с реалистичной стратификацией

На рис. 4 представлены результаты расчета распространения волн от построенных парциальных источников волн (24) в неизотермической атмосфере. Зависимость H от z для используемой модели атмосферы приведена на рис. 1. В этой модели стратификация – изотермическая до высоты 120 км, но выше – фоновая температура растет.

Общая картина распространения волн от теплового источника на высотах ниже 200 км образуется просто суммированием волновых картин

рис. 4. Выше 200 км существенную роль играют нелинейные эффекты, и общую волновую картину простым сложением не получить.

На высотах ниже 50 км амплитуды АВ, генерируемых низкочастотным источником, были, по крайней мере, на порядок меньше амплитуд ВГВ, что давало основания пренебрегать акустическими волнами. Однако мы видим, что на высотах >150 км амплитуды волн от парциальных акустического и гравитационного источников практически сравнялись. Более того, волновые картины (например, при $t = 20$ мин) на высотах >120 км похожи, несмотря на то, что ниже распространение волн от различных источников сильно различается.

Рисунок 4 показывает, что неизотермичность значительно влияет на свойства волн и их распространение. На высотах ниже 120 км (где атмосфера в модели – изотермическая) волны, излучаемые построенными парциальными источниками (24) для акустических и гравитационных волн существенно различаются, и наблюдаемые волновые картины типичны для гравитационных и акустических волн. Амплитуда АВ примерно на

порядок меньше амплитуды ВГВ. На высотах >120 км это существенное отличие волн от построенных источников АВ и ВГВ стирается. И, несмотря на малость амплитуд акустических волн на высотах источника, ситуация меняется при достижении волнами верхней атмосферы, где пренебрегать акустическими волнами уже нельзя.

Необходимо добавить важное замечание, что разделение (27) теплового источника на парциальные источники акустических и гравитационных волн не учитывает неизотермичность атмосферы выше 120 км. Формулы (24) для парциальных источников показывают, что компоненты $Q_{A,\Psi}(x, z, t)$, $Q_{G,\Psi}(x, z, t)$ этих источников не равны нулю на больших высотах, и при $z \rightarrow \infty$

$$Q_{A,\Psi}(x, z, t) = -Q_{G,\Psi}(x, z, t) \rightarrow \frac{1}{\gamma} \left(\frac{-1}{H} \int_{-\infty}^{\infty} Q_{\Phi}(x, z', t) dz' \right). \quad (29)$$

То есть, эти компоненты парциальных источников не локальны. Таким образом, учет неизотермичности атмосферы может повлиять на $Q_{A,\Psi}(x, z, t)$ и $Q_{G,\Psi}(x, z, t)$ на больших высотах. Это может быть важным для более точного разделения АВ и ВГВ в неизотермической атмосфере. Однако в задачу настоящей работы изучение этого вопроса не входит.

В данном исследовании не учитывалось влияние ветра на распространение волн. Ветер может препятствовать проникновению инфразвуковых волн в верхнюю атмосферу.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Хорошо известно, что метеорологические процессы являются одним из основных источников акустико-гравитационных волн в тропосфере. Достигая высот верхней атмосферы, АВ влияют на тепловой баланс и общую циркуляцию атмосферы. Эти волны обычно учитываются в глобальных и климатических моделях посредством параметризаций.

Процессы выделения/поглощения тепла при фазовых переходах воды являются основными источниками энергии в метеорологических процессах. С целью более детального изучения процессов генерации волн тепловыми метеорологическими источниками на тропосферных высотах рассмотрена общая задача о генерации волн источниками тепла. В случае волн малой амплитуды в изотермической атмосфере задача о генерации волн решена аналитически; показано, что тепловой источник всегда генерирует гравитационные и акустические волны одновременно. Явно выделены в решении вклады АВ и ВГВ.

Показано, что у акустических волн колебания плотности и температуры связаны некоторым соотношением. У гравитационной волны колебания температуры и плотности связаны другим соотношением. Эта связь гидродинамических переменных у волны каждого типа приводит к тому, что генерация ВГВ источником тепла невозможна без одновременной генерации инфразвуковых волн и наоборот. Источник тепла может генерировать волны только парами: гравитационные и акустические волны вместе.

Выведенные соотношения, связывающие гидродинамические переменные у волны каждого типа, позволяют в произвольно заданном источнике волн выделить вклады, парциальные источники, ответственные за генерацию акустических и гравитационных волн по отдельности. В частности, по модели теплового источника волн построены парциальные источники, ответственные за генерацию акустических и гравитационных волн по отдельности. Оценены мощности парциальных источников АВ и ВГВ; они различаются примерно вдвое, независимо от частоты, формы и масштабов метеорологических источников.

Показано также что, несмотря на то, что тепловые источники локализованы на тропосферных высотах, парциальные источники акустических и гравитационных волн не являются локализованными, и содержат составляющие источники массы, отличные от нуля на всех высотах выше теплового источника. Последние в парциальных источниках акустических и гравитационных волн в сумме равны нулю, и в общем масса сохраняется. Такой механизм генерации АВ и ВГВ позволяет объяснить эффект быстрого появления гравитационных волн на больших высотах, противоречащий известному факту медленного вертикального распространения этих волн. Формулы для парциальных источников показывают, что гравитационные волны генерируются тепловым тропосферным источником сразу и на больших высотах. При этом производимое ВГВ возмущение параметров атмосферы на больших высотах полностью компенсируется возмущением, производимым акустическими волнами, которые тоже генерируются тропосферным тепловым источником, в том числе и на больших высотах. Вследствие этой взаимной компенсации генерируемых волн волновые возмущения сначала не наблюдаются. Позже взаимная компенсация волновых возмущений (АВ и ВГВ) нарушается в результате быстрого распространения акустических волн от места их возникновения, и мы наблюдаем быстрое появление гравитационных волн на значительных высотах.

С помощью численных экспериментов проведена сравнительная оценка амплитуды и энергии гравитационных и акустических волн, генерируе-

мых тепловыми источниками. Показано, что если характерное время изменения источника больше периода Ваясья—Брента, то на небольших высотах амплитуды и энергии гравитационных волн более чем на порядок превышают амплитуды генерируемых инфразвуковых волн. Тем не менее, когда волны распространяются в верхнюю атмосферу, то амплитуды акустических и гравитационных волн примерно сравниваются. Поэтому игнорирование вклада инфразвуковых волн при интерпретации экспериментальных результатов может приводить к неверным выводам о динамических процессах.

Полученные результаты также могут быть полезны для улучшения параметризации нагрева верхней атмосферы волнами, распространяющимися с тропосферных высот, и для улучшения параметризаций передаваемого атмосфере волнами импульса. При построении параметризационных схем необходимо принимать во внимание не только гравитационные, но и акустические волны, даже если тропосферные тепловые источники волн — низкочастотные.

Работа выполнена при поддержке Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2021-583).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Artru J., Ducic V., Kanamori H. et al.* // *Geophys. J. Int.* 2005. V. 160. № 3. P. 840; <https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.2005.02552.x>
2. *Borchevskina O., Karpov I., Karpov M.* // *Atmosphere.* 2020. V. 11. № 9. P. 1017; <https://doi.org/10.3390/atmos11091017>
3. *Chernigovskaya M.A., Shpynev B.G., Ratovsky K.G.* // *J. Atmos. Sol. Terr. Phys.* 2015. V. 136. № 3. P. 235; <https://doi.org/10.1016/j.jastp.2015.07.006>
4. *Fritts D.C., Vadas S.L., Wan K. et al.* // *Ibid.* 2006. V. 68. № 3–5. P. 247; <https://doi.org/10.1016/j.jastp.2005.04.010>
5. *Plougonven R., Zhang F.* // *Rev. Geophys.* 2014. V. 52. № 1. P. 1; <https://doi.org/10.1002/2012RG000419>
6. *Plougonven R., Snyder Ch.* // *J. Atmos. Sci.* 2007. V. 64. № 7. P. 2502; <https://doi.org/10.1175/JAS3953.1>
7. *Гаврилов Н.М., Коваль А.В., Погорельцев А.И. и др.* // *Изв. РАН. Физика атмосферы и океана.* 2013. Т. 49. № 4. С. 401; <https://doi.org/10.7868/S0002351513040032>
8. *Голубков Г.В., Адамсон С.О., Борчевкина О.П. и др.* // *Хим. физика.* 2022. Т. 41. № 5. С. 531; <https://doi.org/10.31857/S0207401X22050053>
9. *Бахметьева Н.В., Григорьев Г.И., Калинина Е.Е.* // *Хим. физика.* 2023. Т. 42. № 4. С. 73; <https://doi.org/10.31857/S0207401X23040039>
10. *Karpov I., Kshevetskii S.* // *J. Atmos. Sol. Terr. Phys.* 2017. V. 164. P. 89; <https://doi.org/10.1016/j.jastp.2017.07.019>
11. *Kshevetskii S.P., Gavrilov N.M.* // *J. Atmos. Sol. Terr. Phys.* 2005. V. 67. № 11. P. 1014; <https://doi.org/10.1016/j.jastp.2005.02.013>
12. *Кшевецкий С.П., Гаврилов Н.М.* // *Изв. РАН. Физика атмосферы и океана.* 2014. Т. 50. № 1. С. 76; <https://doi.org/10.7868/S0002351513050040>
13. *Gettelman A., Mills M.J., Kinnison D.E. et al.* // *J. Geophys. Res. Atmos.* 2019. V. 124. P. 12380; <https://doi.org/10.1029/2019JD030943>
14. *Richter J.H., Sassi F., Garcia R.R.* // *J. Atmos. Sci.* 2010. V. 67. P. 136; <https://doi.org/10.1175/2009JAS3112.1>
15. *Akmaev R.A., Forbes J.M., Hagan M.E.* // *Geophys. Res. Lett.* 1996. V. 23. № 16. P. 2173; <https://doi.org/10.1029/96GL01977>
16. *Akmaev R.A., Yudin V.A., Ortland D.A.* // *Ann. Geophys.* 1997. V. 15. № 9. P. 1187; <https://doi.org/10.1007/s00585-997-1187-7>
17. *Кшевецкий С.П., Курдяева Ю.А., Гаврилов Н.М.* // *Изв. РАН. Физика атмосферы и океана.* 2023. Т. 59. № 1. С. 44; <https://doi.org/10.31857/S0002351523010078>
18. *Бахметьева Н.В., Григорьев Г.И., Калинина Е.Е.* // *Хим. физика.* 2022. Т. 41. № 5. С. 441; <https://doi.org/10.31857/S0207401X22050028>
19. *Лебедь И.В.* // *Хим. физика.* 2022. Т. 41. № 4. С. 81; <https://doi.org/10.31857/S0207401X22040045>
20. *Кшевецкий С.П.* // *Журн. вычисл. математики и мат. физики.* 2001. Т. 41. № 2. С. 295.
21. *Richtmayer R.D.* Principles of advanced mathematical physics. V. 1. New York: Springer-Verlag, 1978.
22. *Gossard E.E., Hooke W.H.* Waves in the atmosphere. N.Y.: Elsevier Scientific Publ. Co., 1975.
23. *Дикий Л.А.* Теория колебаний земной атмосферы. Л.: Гидрометеиздат, 1969.
24. *Брежнев Ю.В., Кшевецкий С.П., Лебле С.Б.* // *Изв. РАН. Физика атмосферы и океана.* 1994. Т. 30. № 1. С. 86.
25. *Кшевецкий С.П.* // *Изв. РАН. Физика атмосферы и океана.* 1992. Т. 28. № 5. С. 558.
26. *Кшевецкий С.П.* // *Гидромеханика.* 1992. № 65. С. 29.
27. *Кшевецкий С.П.* О длинных акустико-гравитационных волнах в атмосфере с произвольной стратификацией плотности. М.: Деп. ВИНТИ № 4746-B91. 1991.
28. *Kshevetskii S.P., Kurdayeva Y.A., Gavrilov N.M.* // *Adv. Space Res.* 2022. V. 70. № 11. P. 3706; <https://doi.org/10.1016/j.asr.2022.08.034>

УДК 537.525

ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ ОБЛАКА ИЗ ЗАРЯЖЕННЫХ МИКРОЧАСТИЦ В ГАЗОРАЗРЯДНОЙ ПЛАЗМЕ

© 2023 г. Д. Н. Поляков¹, В. В. Шумова^{1, 2*}, Л. М. Василяк¹

¹Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Москва, Россия

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: cryolab@ihed.ras.ru

Поступила в редакцию 23.03.2023;

после доработки 12.04.2023;

принята в печать 20.04.2023

Предложена модель расчета коэффициентов поверхностного натяжения сферического облака из заряженных микрочастиц в плазме. Рассчитаны коэффициенты поверхностного натяжения кулоновских сфер, полученных в тлеющем разряде низкого давления в неоне при температурах 77 и 295 К для частиц диаметром 4 и 2 мкм соответственно. Определена потенциальная энергия микрочастиц на поверхности сферы. В проведенных расчетах применялась гидродинамическая модель полохительного столба разряда с заряженными микрочастицами. Полученные значения коэффициента поверхностного натяжения кулоновских сфер по величине на несколько порядков меньше, чем у шаровых молний. Предложена гипотеза образования кулоновских сфер в атмосфере Земли.

Ключевые слова: комплексная плазма, кулоновская сфера, потенциальная энергия, поверхностное натяжение, стандартная атмосфера, газовый разряд, шаровая молния.

DOI: 10.31857/S0207401X23100126, EDN: PDKVOK

1. ВВЕДЕНИЕ

Образующиеся в атмосферных слоях с пониженной плотностью воздуха (стратосфере и мезосфере Земли) скопления аэрозолей из заряженных частичек конденсированного вещества аналогичны левитирующим облакам, наблюдаемым в эксперименте с комплексной (пылевой) плазмой [1]. В различных слоях атмосферы на разной высоте аэрозоли представлены частичками льда, воды, космической и вулканической пыли и грунта. В зависимости от высоты аэрозоли могут заряжаться в условиях слабоионизованной плазмы, возникающей при воздействии космических частиц, быстрых электронов и протонов, поступающих из радиационного пояса Земли, и в плазме, образованной электрическими явлениями в атмосфере [2–7]. Заряженные аэрозоли могут формировать облака, взаимодействующие с ионизованной компонентой атмосферы и локальными электрическими полями глобальной электрической цепи Земли [8, 9]. Примером заряженных облаков в нижней мезосфере являются серебристые облака, образующиеся при низкой температуре воздуха из частичек льда.

В лабораторных условиях комплексная плазма образуется, например, при взаимодействии микро- и наночастиц конденсированного вещества с

плазмой различного вида газовых разрядов [1]. Взаимодействуя с плазмой, частички заряжаются и формируют заряженные облака различной формы. В подобных комплексной плазме средах можно моделировать термодинамические свойства [1, 10], например поверхностное натяжение [11]. Поверхностное натяжение проявляется в заряженном облаке как следствие реализации принципа минимума энергии, когда для уменьшения величины поверхностной энергии поверхность облака стремится к уменьшению площади до минимально возможной величины. Эта тенденция приводит к трансформации формы облака с жидкостной структурой к форме сферы.

В лабораторных условиях сферы из заряженных микрочастиц (кулоновские сферы) наблюдаются в плазме газовых разрядов низкого давления при различных температурах газа [10, 12, 13]. Их время существования определяется временем жизни окружающей плазмы и наличием электрического поля. При среднем и атмосферном давлении похожие долгоживущие плазменные образования сферической формы наблюдаются в природных условиях вблизи поверхности Земли и в нижней атмосфере (на высоте до 4 км) в виде шаровой молнии [14, 15]. Светящиеся полусферы из твердых частиц и заряженных капель воды, со-

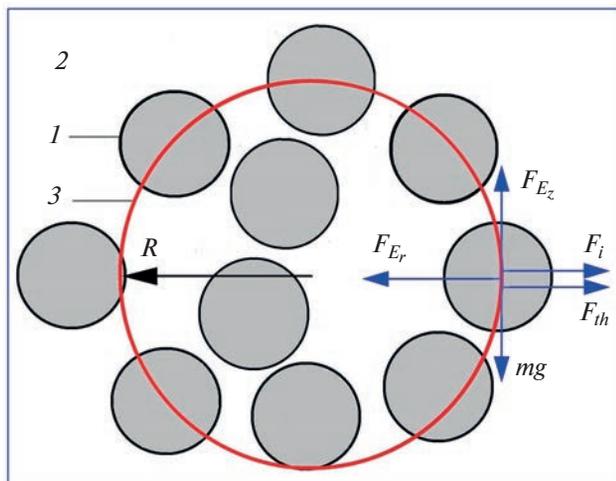


Рис. 1. Кулоновская сфера (сечение): 1 – микрочастица с массой m , 2 – плазма, 3 – условная поверхность радиусом R ; F_{th} – сила термофореза, F_{Er} – сила радиального электрического поля, F_i – сила ионного увлечения и F_{Ez} – сила аксиального электрического поля.

прикасающиеся с поверхностью Земли, наблюдаются в эпицентральных областях во время и после сейсмических событий [16]. Долгоживущие плазменные образования – плазмоиды и искусственные шаровые молнии – получают также в лабораторных условиях в электрических разрядах при атмосферном давлении [15], а также в слабоионизованной газоразрядной плазме при взаимодействии с ударной волной [17].

Можно предположить, что некоторые природные шаровые молнии [15], как и кулоновские шары, состоят из заряженных частиц. Так, в работе [18] на основе оптического спектра светящегося шара, наблюдаемого после удара молнии в землю, было установлено, что в состав таких шаровых молний входят возбужденные и заряженные частицы различных компонентов почвы. Образующиеся в грозовых условиях шаровые молнии и кулоновские шары можно представить как результат самоорганизации заряженных частичек конденсированного вещества внутри плазменной области, образующейся под воздействием сильного электрического поля или при контакте с плазмой, сопутствующей различным атмосферным электрическим явлениям, наблюдаемым при разной плотности и на разной высоте атмосферы.

Цели данной работы – оценка коэффициента поверхностного натяжения кулоновских сфер из микрочастиц различного диаметра на основе данных экспериментов с комплексной газоразрядной плазмой при температурах 295 и 77 К и сопоставление полученных результатов с данными для шаровой молнии.

2. ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ КУЛОНОВСКОЙ СФЕРЫ

Поверхностное натяжение мы моделируем в сфере, образованной микрочастицами 1 и левитирующей в плазме 2 положительного столба тлеющего разряда (рис. 1). Простая схема плазмы положительного столба разряда подробно рассмотрена в работе [19]. На рис. 1 кулоновская сфера показана в сечении. Взаимодействие заряженных компонентов и электрических полей в комплексной плазме происходит посредством кулоновских сил [1, 20], поэтому поверхностное натяжение в нашем случае имеет электростатическую природу. Левитация (преодоление силы тяжести mg) отрицательно заряженной микрочастицы с массой m в плазме в вертикальном направлении z реализуется при воздействии на нее силы аксиального электрического поля F_{Ez} (рис. 1).

Хрестоматийный подход к описанию поверхностного натяжения с точки зрения классической термодинамики для комплексной плазмы применим ввиду отсутствия в данной системе состояния термодинамического равновесия. Комплексная плазма в газовом разряде – это сильно неидеальная плазма с большой разницей температур ее компонент: электронов, ионов, газа и микрочастиц. По этой причине мы должны ввести ряд допущений. В основе используемой нами модели для определения поверхностного натяжения лежит расчет коэффициента поверхностного натяжения через суммарную величину потенциальной энергии микрочастиц, расположенных на границе сферического облака [11].

Термодинамические функции для комплексной плазмы в этом случае являются аналогами. Так, аналогом поверхности раздела фаз служит поверхность раздела между облаком микрочастиц и окружающей плазмой. Принимается, что ионы, частицы газа и микрочастицы находятся в состоянии термодинамического равновесия. Микрочастицы в облаке находятся в жидкой фазе, где микрочастица является частицей жидкой фазы. Такое введение определения состояния облака основывается на результатах экспериментов [21, 22], в которых было обнаружено, что облако из микрочастиц при внешнем воздействии ведет себя как жидкость с поверхностным натяжением. При отрыве микрочастиц эффективная поверхность облака уменьшается, а облако принимает форму вытянутой капли жидкости [21]. Отрыв микрочастицы от поверхности облака аналогичен разбрызгиванию частицы жидкости. При разделении облака надвое обе части принимают форму сферы [22]. В таком случае можно считать, что энергия, уносимая микрочастицей, аналогична свободной поверхностной энергии вещества. Тогда последняя эквивалентна потенциальной энергии U микрочастицы на поверхности облака и так же, как

свободная поверхностная энергия, уменьшается с уменьшением радиуса сферы. Поскольку сформулировать определение поверхности разрыва для одной частицы не представляется возможным, рассчитаем поверхностное натяжение через условную поверхность сферы. Условной поверхностью сферы служит поверхность S (рис. 1) радиусом R и площадью S , проходящая через микрочастицы 2, находящиеся на краю пылевой структуры.

В данной конфигурации полная поверхностная энергия кулоновской сферы может быть записана как $W = NU$, где N – количество микрочастиц на условной поверхности сферы. В этом случае величина коэффициента поверхностного натяжения, определяемая как

$$\sigma = W/S = NU/4\pi R^2,$$

является удельной поверхностной энергией сферы. Потенциальную энергию частицы на поверхности облака удобно записать через результирующую радиальную силу [10, 23]:

$$U = -\int_0^R F_{res}(r) dr.$$

Сила $F_{res}(r)$ равна сумме максимально воздействующих на облако радиальных сил: силы F_{th} термофореза, силы F_{Er} радиального электрического поля и силы F_i ионного увлечения (рис. 1). Для определения этих сил использована диффузионно-дрейфовая модель плазмы положительного столба разряда с микрочастицами [11, 24, 25]. Основные столкновительные реакции в плазме, учитываемые в модели, приведены в работах [24, 25]. В модели учитываются тепловыделение в плазме и диссипация ее энергии на стенках разряда и микрочастицах, в том числе за счет тушения возбуждения метастабильных состояний газа. Температура электронов, транспортные коэффициенты и коэффициенты для реакций возбуждения и ионизации с участием электронов и их температуры получены с подключением к схеме расчёта параметров плазмы программного пакета BOLSIG+ совместно с базой данных LXCat. Электростатическая природа силы поверхностного натяжения пылевой сферы, определяемая кулоновским потенциалом взаимодействия между заряженными микрочастицами и плазмой, учитывается через величину заряда на микрочастицах. Заряд определяется в модели расчета сил в комплексной плазме через выполнение условия ее электронейтральности [11, 19, 20, 25]. В отличие от работы [11], в настоящих расчетах учитываются поправка на дополнительное тепло, рассеянное в газе при нагреве микрочастиц за счет метастабильных атомов [26], и наши новые результаты экспериментов по образованию кулоновских сфер при комнатной температуре.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Коэффициент поверхностного натяжения рассчитан для кулоновских сфер, состоящих из микрочастиц диаметром 2 и 4 мкм, полученных в условиях наших экспериментов с комплексной плазмой при температурах 295 и 77 К соответственно. Расчет потенциальной энергии микрочастицы на поверхности кулоновской сферы показал тенденцию роста ее величины с увеличением размера сферы. Потенциальная энергия U частицы возрастает от $1.34 \cdot 10^{-16}$ до $3.8 \cdot 10^{-15}$ Дж при увеличении R от 0.326 до 0.57 см при температуре эксперимента $T_{exp} = 295$ К. При $T_{exp} = 77$ К потенциальная энергия U увеличивается от $0.73 \cdot 10^{-16}$ до $9.8 \cdot 10^{-16}$ Дж при увеличении радиуса облака от 0.07 до 0.145 см. Отметим, что средняя величина U хорошо согласуется с величиной энергии отрыва микрочастицы от облака. Величине энергии отрыва микрочастицы от облака эквивалентна кинетическая энергия микрочастицы в электродинамической ловушке Пауля, равная $6 \cdot 10^{-17}$ Дж [27, 28].

Полученные значения коэффициента поверхностного натяжения заряженных сферических облаков σ находятся в пределах $(0.49 \div 46.3) \cdot 10^{-8}$ Дж \cdot м $^{-2}$ и $(0.08 \div 4.51) 10^{-8}$ Дж \cdot м $^{-2}$ в экспериментах при температурах 77 и 295 К соответственно. Отметим, что с полученными значениями хорошо согласуется величина $9.8 \cdot 10^{-9}$ Дж \cdot м $^{-2}$, полученная в работе [11] по оценке энергии разрыва связей микрочастиц в результате разделения пылевой сферы на две части в экспериментах в воздухе комнатной температуры при давлении $P_{exp} = 13\text{--}26$ Па [29].

Образования, аналогичные кулоновским сферам, полученным в лаборатории в тлеющем разряде низкого давления, могут наблюдаться в средних атмосферных слоях на высотах 40–60 км. Отметим, что плотности газа на данных высотах эквивалентны давлениям газа в комплексной плазме электрических разрядов в лабораторных экспериментах. Эти давления приведены к давлениям при температурах, соответствующих высотам стандартной атмосферы. Например, условия, близкие к экспериментам с кулоновскими сферами, в устройстве с тлеющим разрядом при давлениях 0.4–3 Торр авторы работы [30] использовали для моделирования плазмы красных спрайтов, которые наблюдаются в атмосфере выше 50 км.

В этой связи интересно сравнить полученные значения поверхностного натяжения для пылевых сфер и шаровых молний и рассмотреть их в зависимости от высоты стандартной атмосферы, $h(P, T)$. Соответствие между давлением эксперимента P_{exp} и его приведенным значением к давлению $P(h)$ стандартной атмосферы при температуре $T(h)$ в точке на геометрической высоте h определяется выражением

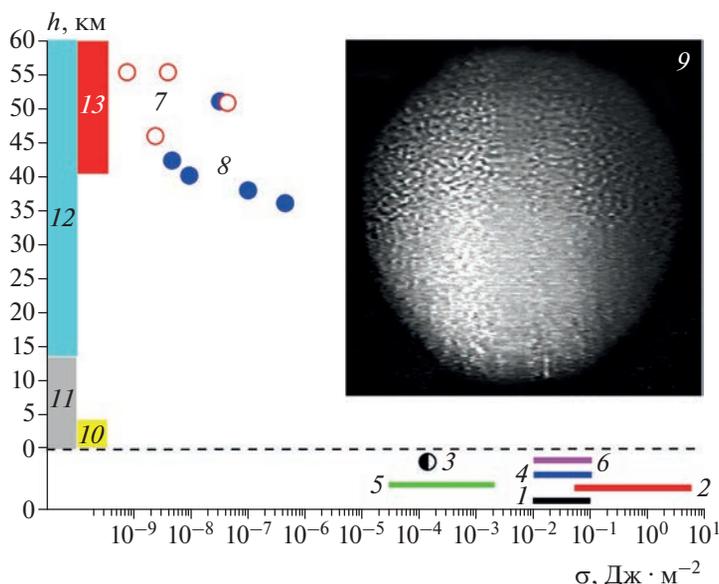


Рис. 2. Коэффициент поверхностного натяжения (σ) шаровых молний на высоте стандартной атмосферы $h = 0$: 1 – данные работы [14], 2 – [31], 3 – [32], 4 – [33], 5 – [34], 6 – [35], а также кулоновских сфер при разной температуре эксперимента: 7 – 295 К, 8 – 77 К; 10–13 – электрические явления в атмосфере Земли на разной высоте стандартной атмосферы: 10 – шаровые молнии, 11 – грозовые молнии, 12 – голубые джеты, 13 – спрайты; 9 – изображение плотной пылевой сферы с концентрацией микрочастиц $\sim 10^7 \text{ см}^{-3}$ при криогенной температуре (77 К). Линии 1, 2, 4–6 показывают диапазоны величин σ , приведенные в соответствующих ссылках.

$$P(h) = T(h) P_{\text{exp}} / T_{\text{exp}}$$

На рис. 2 показаны значения коэффициентов поверхностного натяжения для шаровых молний, приведенные в работах Стаханова [14] – 1, Тигнер [31] – 2, Синкевича [32] – 3, Смирнова [33] – 4, Шавлова [34] – 5 и Петрушова [35] – 6 в сравнении со значениями, полученными для пылевых сфер при разной температуре эксперимента: 7 – при 295 К и 8 – 77 К. Значения коэффициента поверхностного натяжения для шаровых молний при давлении нормальной атмосферы $\sim 10^5 \text{ Па}$ лежат в очень широких пределах: $3 \cdot 10^{-5} \div 5.7 \text{ Дж/м}^2$ [14, 31–35]. Разброс наблюдаемых величин поверхностного натяжения шаровых молний определяется условиями газодинамической устойчивости, соответствующими разным их размерам, концентрациям зарядов и условиям воздействия атмосферных течений. Пример изображения объекта (9) нашего исследования представлен на рис. 2. Это изображение плотной пылевой сферы с концентрацией микрочастиц $\sim 10^7 \text{ см}^{-3}$, полученное при криогенной температуре разряда. Для сопоставления данных с возможными источниками плазмы в рассматриваемом диапазоне высот атмосферы на оси ординат обозначены области 10–13, соответствующие различным электрическим явлениям, наблюдаемым в атмосфере [7].

Полученные данные показывают, что кулоновские сферы (точки 7 и 8 на рис. 2) имеют коэффициент поверхностного натяжения на не-

сколько порядков меньше, чем у шаровых молний, и по этой причине не могут существовать автономно. Для кулоновских сфер величина поверхностного натяжения зависит от потенциала электростатической ловушки, образованной плазмой электрического разряда. Автономное существование кулоновских сфер вне плазмы невозможно. Это следует из теоремы Ирншоу, согласно которой статическая система электрических зарядов – в нашем случае кулоновская сфера – неустойчива в отсутствие внешних сил. Таким образом, ее существование может поддерживаться только в среде, где потоки частиц плазмы и электрические поля образуют динамическое равновесие. Из рис. 2 видно, что источником плазмы на рассматриваемой высоте могут служить спрайты и голубые джеты. Таким образом, существование и время жизни кулоновской сферы в атмосфере будут определяться присутствием электрических полей и продолжительностью поддержания необходимой концентрации плазмы электрического разряда. С учетом электростатической природы поверхностного натяжения кулоновских сфер, для значений σ , приведённых на рис. 2, наблюдается физически верная тенденция, показывающая увеличение значения σ при уменьшении высоты атмосферы. Растущая величина коэффициента поверхностного натяжения может обеспечить автономность существования кулоновской сферы аналогично шаровым молниям.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена модель расчета коэффициентов поверхностного натяжения для кулоновских сфер, наблюдаемых экспериментально в тлеющем разряде постоянного тока. Определена потенциальная энергия заряженной микрочастицы на поверхности кулоновской сферы. Кулоновские сферы, аналогичные полученным в лаборатории, гипотетически могут существовать в атмосфере Земли в плазме электрических разрядов. Полученные значения коэффициента поверхностного натяжения кулоновских сфер сопоставлены со значениям коэффициента поверхностного натяжения, полученными для шаровых молний. Малая величина поверхностного натяжения кулоновских сфер исключает их автономное существование вне газоразрядной плазмы.

Работа выполнена при поддержке Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание № 075-01129-23-00).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fortov V.E., Morfill G.E. Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space. Boca Raton: CRC Press, 2009.
2. Арделян Н.В., Бычков В.Л., Голубков Г.В., Голубков М.Г., Космачевский К.В. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 7. С. 59.
3. Голубков Г.В., Бычков В.Л., Арделян Н.В., Космачевский К.В., Голубков М.Г. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 7. С. 23.
4. Голубков Г.В., Арделян Н.В., Бычков В.Л., Космачевский К.В. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 7. С. 65.
5. Голубков Г.В., Дмитриев А.В., Суворова А.В., Голубков М.Г. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 10. С. 72.
6. Голубков М.Г., Суворова А.В., Дмитриев А.В., Голубков Г.В. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 10. С. 69.
7. Surkov V.V., Hayakawa M. // Surv. Geophys. 2020. V. 41. P. 1101.
8. Williams E.R. // Atmos. Res. 2009. V. 91. P. 140.
9. Мареев Е.А. // УФН. 2010. Т. 180. № 5 С. 527.
10. Поляков Д.Н., Василяк Л.М., Шумова В.В. // Прикл. физика. 2018. № 4. С. 11.
11. Polyakov D.N., Shumova V.V., Vasilyak L.M. // Phys. Lett. A. 2021. V. 389. P. 127082.
12. Arp O., Block D., Piel A. // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 93. P. 165004.
13. Polyakov D.N., Shumova V.V., Vasilyak L.M. // Plasma Sources Sci. Technol. 2019. V. 28. P. 065017.
14. Стаханов И.П. О физической природе шаровой молнии. М.: Энергоатомиздат, 1985.
15. Бычков В.Л. Естественные и искусственные шаровые молнии в атмосфере Земли. М.: МАКС Пресс, 2021.
16. Голубков Г.В., Бычков В.Л., Готовцев В.О. и др. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 4. С. 51.
17. Синкевич О.А. // Теплофизика высоких температур. 1997. Т. 35. № 4. С. 651.
18. Cen J., Yuan P., Xue S. // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 112. P. 035001.
19. Polyakov D.N., Shumova V.V., Vasilyak L.M. // Plasma Sources Sci. Technol. 2021. V. 30. P. 07LT01.
20. Шумова В.В., Поляков Д.Н., Василяк Л.М. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 12. С. 37.
21. Балабанов В.В., Василяк Л.М., Ветчинин С.П. и др. // ЖЭТФ. 2001. Т. 119. Вып. 1. С. 99.
22. Василяк Л.М., Ветчинин С.П., Зимнухов В.С., Поляков Д.Н., Фортвов В.Е. // ЖЭТФ. 2003. Т. 123. вып. 3. С. 493.
23. Шумова В.В., Поляков Д.Н., Василяк Л.М. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 8. С. 71.
24. Шумова В.В., Поляков Д.Н., Василяк Л.М. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 8. С. 70.
25. Polyakov D.N., Shumova V.V., Vasilyak L.M. // Plasma Sources Sci. Technol. 2022. V. 31. P. 074001.
26. Шумова В.В., Поляков Д.Н., Василяк Л.М. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 10. С. 23.
27. Syrovatka R.A., Deputatova L.V., Filinov V.S. et al. // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1147. P. 012118.
28. Mihalcea B.M., Filinov V.S., Syrovatka R.A., Vasilyak L.M. // Phys. Rep. 2023. V. 1016. P. 1.
29. Василяк Л.М., Ветчинин С.П., Поляков Д.Н., Фортвов В.Е. // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. Вып. 5. С. 1166.
30. Sorokin D.A., Tarasenko V.F., Baksht E.K., Vinogradov N.P. // Eur. J. Environ. Earth Sci. 2022. V. 22. P. 42.
31. Turner D.J. // Philos. Trans. Roy. Soc. London, Ser. A.: 1994. V. 347. № 1682. P. 83.
32. Синкевич О.А. // Теплофизика высоких температур. 1997. Т. 35. № 6. С. 968.
33. Смирнов Б.М. // УФН. 1992. Т. 162. № 8. С. 43.
34. Shavlov A.V. // Phys. Lett. A. 2009. V. 373. P. 3959.
35. Петрушов Н.А., Григорьев А.И., Ширяева С.О. // Электронная обработка материалов. 2016. Т. 52. №. 6. С. 49.

УДК 551.510

УЧЕТ НЕОДНОРОДНОСТИ ТРАССЫ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С-ДИАПАЗОНА НАД МОРЕМ

© 2023 г. А. И. Родионов^{1, 2}, И. Д. Родионов^{1, 2}, И. П. Родионова^{1, 2}, Д. В. Шестаков^{1, 2},
В. В. Егоров³, В. Л. Шаповалов¹, А. П. Калинин^{4*}

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук,
Москва, Россия

²Акционерное общество “Научно-технический центр “Реагент”, Москва, Россия

³Институт космических исследований Российской академии наук, Москва, Россия

⁴Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: kalinin@ipmnet.ru

Поступила в редакцию 11.04.2023;

после доработки 12.05.2023;

принята в печать 22.05.2023

Ультрафиолетовый (УФ) С-диапазон обеспечивает высокую помехоустойчивость и возможность работы аппаратуры в тропосфере в дневное время, так как озоновый слой атмосферы практически полностью поглощает УФ-С-излучение Солнца. Одним из главных преимуществ этого диапазона в сравнении с видимым, инфракрасным и даже радиодиапазоном является слабое рассеяние ультрафиолета на аэрозольных частицах пыли, снега, града, водяных каплях тумана и дождя. В настоящей работе предложен метод определения оптической толщины атмосферы при распространении УФ-С-излучения по наклонной трассе над морем. Учет неоднородности трассы распространения УФ-С-излучения обеспечивается посредством введения в модель зависимости коэффициента экстинкции и оптической толщины атмосферы от высоты. Справедливость предложенной модели подтверждена данными натурного эксперимента, проведенного над акваторией Черного моря. На основании экспериментальных данных определены коэффициент экстинкции атмосферы над морской поверхностью и его аэрозольная и молекулярная составляющие.

Ключевые слова: УФ-С-излучение, оптическая толщина, экстинкция, высота над уровнем моря, УФ-С-приемник.

DOI: 10.31857/S0207401X23100138, EDN: TCNBUQ

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы применение устройств, работающих в ультрафиолетовом (УФ) С-диапазоне, в решении различных прикладных задач получило достаточно широкое распространение [1–8], что связано с отсутствием влияния на работу этих устройств излучения Солнца, а также с их высокой чувствительностью за счет функционирования в монофотонном режиме [9–13]. При определении предельной дальности действия УФ-С-сенсоров важное место занимает вопрос о затухании волн указанного диапазона на трассе их распространения от источника излучения до приемника. Особого внимания заслуживает проблема затухания излучения на морских трассах, где большую роль играет аэрозольная составляющая экстинкции атмосферы. Она характеризуется влиянием повышенного влагосодержания насыщенного солями атмосферного воздуха, волнением морской поверхности, а так-

же изменением погонного затухания излучения (ослабление излучения на единицу длины) при его распространении по наклонным трассам. Информация о степени затухания УФ-С-излучения над морем при наклонных трассах крайне важна для обнаружения и определения местоположения различных объектов, высокоточного измерения дальности или высоты над земной поверхностью, параметров движения объектов и дистанционного определения параметров атмосферы.

Цели настоящей работы – изложение новой методики определения оптической толщины атмосферы при распространении УФ-С-излучения над морем и сравнение модельных расчетов с данными эксперимента, по которым были определены аэрозольная и молекулярная составляющие коэффициента экстинкции атмосферы над морской поверхностью.

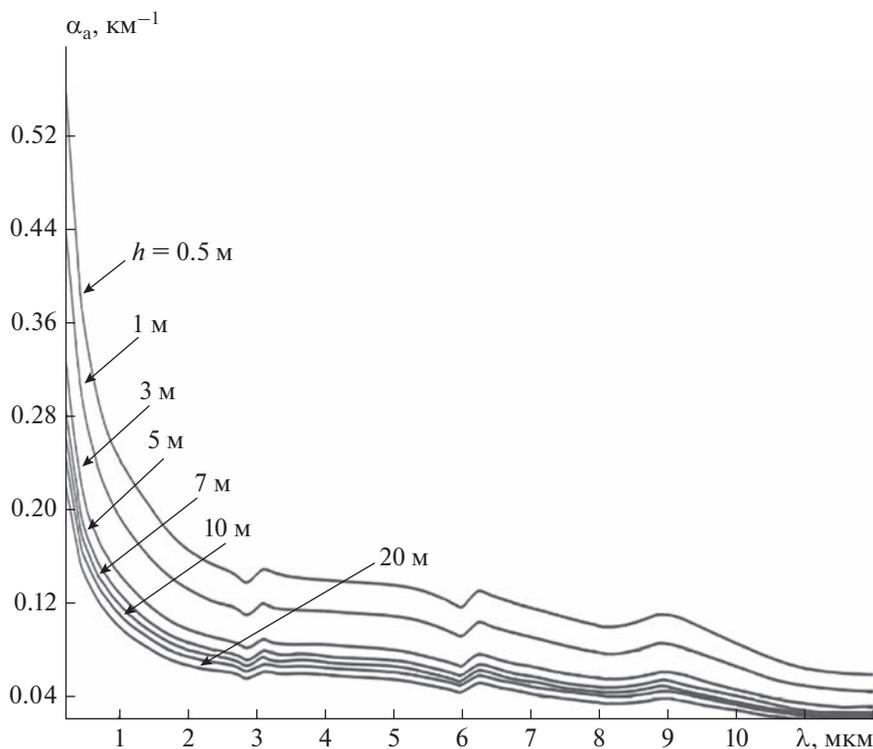


Рис. 1. Спектральная зависимость коэффициентов аэрозольной экстинкции $\alpha_a(\lambda)$ от высоты h над уровнем моря.

2. МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИЧЕСКОЙ ТОЛЩИНЫ АТМОСФЕРЫ

При определении оптической толщины атмосферы необходимо учитывать степень однородности ее электрофизических характеристик. В частности, при расчетах ее величины над морской поверхностью при наклонных трассах распространения УФ-С-излучения следует принимать во внимание зависимость коэффициента аэрозольной экстинкции, α_a , от текущей высоты трассы h над уровнем моря. В работе [14] приведены данные модельных расчетов величины α_a в зависимости от h . Авторами использовались параметры, присущие акватории Черного моря. Спектральные зависимости $\alpha_a(h)$ приведены на рис. 1.

На основе этих данных была определена зависимость $\alpha_a(h)$ для длины волны $\lambda = 280$ нм (см. рис. 2), которая была рабочей для измерительной аппаратуры, использованной в натурном эксперименте в районе Черного моря. Кроме того, методом наименьших квадратов была найдена аппроксимация данных работы [14]. Кривая на рис. 2 имеет при этом вид следующей аналитической функции:

$$\alpha_a(h) \approx 0.20935 + 0.24729 \exp(-0.28528h). \quad (1)$$

На рис. 3 представлена схема эксперимента, поясняющая связь локальной высоты h над уров-

нем моря с геометрическими параметрами трассы. Поскольку величина h связана с высотой H положения измерителя над уровнем моря, с расстоянием положения источника излучения (стан-

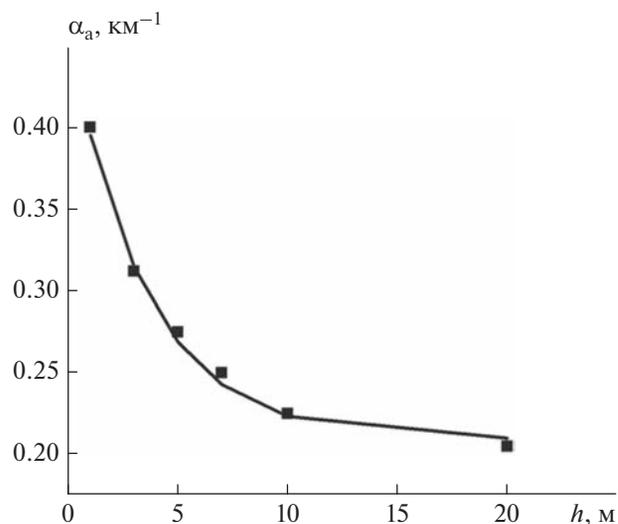


Рис. 2. Зависимость коэффициента аэрозольной экстинкции α_a от текущей высоты трассы h над уровнем моря: квадраты – данные работы [14]; сплошная линия – аппроксимация экспериментальных данных, полученная методом наименьших квадратов.

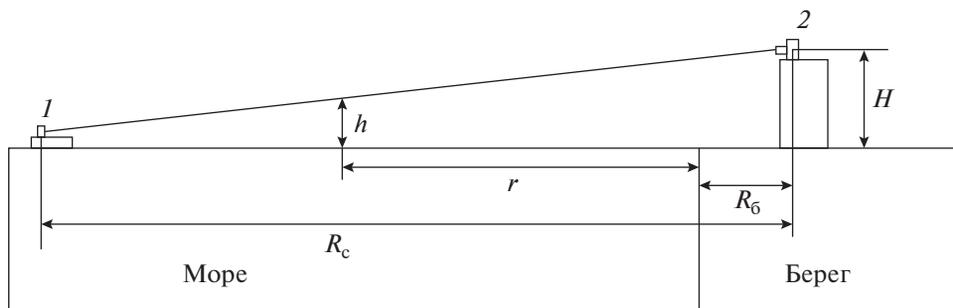


Рис. 3. Схема проведения эксперимента: 1 – УФ-С-источник, 2 – УФ-С-приемник.

ции) до приемника R_c и текущей дальностью r , отсчитываемой от положения станции в направлении к берегу, как

$$h = r \frac{H}{R_c}, \quad (2)$$

то формула (1) может быть записана в виде

$$\alpha_a(r) \approx 0.20935 + 0.24729 \exp\left(-0.28528r \frac{H}{R_c}\right). \quad (3)$$

Поскольку оптическая толщина аэрозольной составляющей атмосферы, τ_a , на морской трассе определяется выражением

$$\tau_a = \int_0^{R_c - R_6} \alpha_a(r) dr, \quad (4)$$

то с учетом (3) имеем

$$\tau_a \approx 0.20935(R_c - R_6) + 0.8665 \frac{R_c}{H} \times \left[1 - \exp\left\{-0.28528 \frac{H(R_c - R_6)}{R_c}\right\}\right]. \quad (5)$$

Здесь R_6 – расстояние от приемника излучения до кромки берега. Соответственно, число регистрируемых приемником фотонов УФ-С-излучения, I_c , согласно закону Бугера–Ламберта–Бера с учетом точечного характера источника излучения, будет равно

$$I_c = \frac{I_0}{R_c^2} e^{-\tau}, \quad (6)$$

где I_0 – константа, зависящая от условий эксперимента, а τ – оптическая толщина, обусловленная как аэрозольным, так и молекулярным ослаблением излучения. Для проверки достоверности формулы (5) был выполнен натурный эксперимент в Черном море.

3. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

3.1. Место и условия проведения эксперимента

Измерения проводились в Черном море в районе г. Туапсе. Приемный ультрафиолетовый сенсор (далее УФ-С-сенсор) располагался на высоте 40 м от уровня моря в 300 м от берега. Регистрировалась интенсивность сигнала источника УФ-С-излучения с катера, находящегося на поверхности моря (см. рис. 3). Время проведения эксперимента – с 11.00 до 15.00 местного времени. Атмосферное давление равнялось 1013 гПа. Погодные условия: с 11.00 до 13.00 – пасмурно; с 13.00 до 15.00 – солнечная погода. Волнение на море составляло 1–2 балла.

3.2. Методика измерений

Методика проведения измерений включала в себя несколько этапов.

1. Последовательное удаление от берега катера с расположенным на нем источником УФ-С-излучения (эксимерная лампа). Источник излучения находился на высоте 1 м над уровнем моря. Измерения выполнялись на 12-ти станциях. Начальная станция располагалась на расстоянии 0.75 км от берега, конечная – на расстоянии 5.6 км. Всего было 12 станций, на которых УФ-С-излучение эксимерной лампы 1 регистрировалось приемником 2 (см. рис. 3). Пространственное положение станций определялось с помощью GPS-приемника. Геомагнитная обстановка во время измерений была спокойной.

2. Приближение катера к берегу, которое выполнялось также на 12-ти станциях. Конечная станция находилась на расстоянии 0.4 км от берега.

3. Информация о пространственном положении станций и числе принимаемых фотонов по каждой из них регистрировалась с выхода приемника УФ-С-излучения на персональном компьютере.



Рис. 4. Фотография монофотонного УФ-С-сенсора “Скорпион”.

3.3. Измерительная аппаратура и ее характеристики

Источником УФ-С-излучения служила эксимерная лампа, мощность излучения которой составляла 10 мВт. В качестве приемника УФ-С-излучения использовался монофотонный сенсор “Скорпион” [12] (см. рис. 4) со средней длиной волн $\lambda = 280$ нм и полушириной 30 нм.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для вычисления оптической толщины атмосферы τ по данным измерений числа принимаемых приемником фотонов I_c воспользуемся формулой (6). Из (6) следует, что

$$\tau = \ln I_0 - 2 \ln R_c - \ln I_c. \quad (7)$$

В проводимом эксперименте величина константы I_0 равнялась 6000.

На рис. 5 приведены результаты расчета оптической толщины, вычисленной по формуле (5) — линейная зависимость 1, и обработки экспериментальных данных с использованием формулы (7). С помощью метода наименьших квадратов получено описание зависимости экспериментальных данных оптической толщины от расстояния $x = R_c - R_0$ (линия 2 на рис. 5). Из анализа графиков, представленных на рис. 5, следует:

1) график зависимости оптической толщины (линия 2), полученный по результатам экспериментальных данных с помощью метода наименьших квадратов, позволяет по тангенсу его наклона определить величину коэффициента экстинкции $\alpha_{\text{эксп}} = 0.75$;

2) из зависимости оптической толщины аэрозольной составляющей атмосферы, τ_a , от расстояния на морской трассе (рассчитанной по формуле (5) для морского аэрозоля), которая представ-

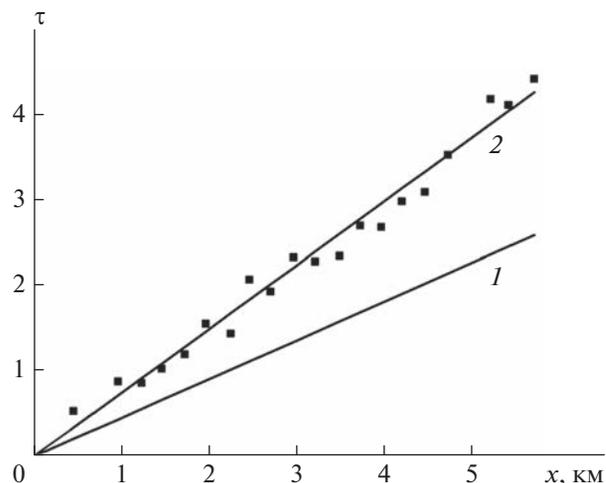


Рис. 5. Зависимость оптической толщины τ атмосферы над морем от величины $x = R_c - R_0$: квадраты — данные эксперимента; кривая 1 — расчет по формуле (5); кривая 2 — линейная аппроксимация экспериментальных данных методом наименьших квадратов.

ляет собой прямую линию 1, следует, что $\alpha_a = 0.46$;

3) по тангенсам углов наклона графиков 1 и 2 можно определить молекулярную составляющую коэффициента экстинкции атмосферы, которая равна $\alpha_m = \alpha_{\text{эксп}} - \alpha_a = 0.29$.

Следует отметить, что использованные значения коэффициента аэрозольной экстинкции α_a [14], строго говоря, справедливы лишь для акватории Черного моря и условий (соленость воды, волнение морской поверхности, влажность воздуха и др.), принятых в настоящей работе. В общем случае для конкретной акватории и условий съемки можно воспользоваться программным пакетом Maex Pro 5.0 [14] для расчета спектрального коэффициента экстинкции атмосферы над морем для различных высот.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе предложена методика определения оптической толщины атмосферы при распространении УФ-С-излучения по наклонной трассе над морем. Изменение высоты трассы над морем приводит к тому, что она (трасса) становится неоднородной по своим электрофизическим свойствам. Учет неоднородности трассы распространения УФ-С-излучения обеспечивается посредством введения в модель зависимости коэффициента экстинкции и оптической толщины атмосферы от высоты. Справедливость предложенной модели подтверждена данными натурного эксперимента, проведенного над акваторией Черного моря.

Выполненное исследование позволило определить величину затухания УФ-С-излучения, обусловленного молекулярным рассеянием и поглощением. В результате эксперимента было установлено, что значение коэффициента экстинкции атмосферы для исследованной трассы равняется $\alpha_{\text{эксп}} = 0.75$. Величины аэрозольной и молекулярной составляющих составили 0.46 и 0.29 соответственно.

Полученные результаты могут быть полезны для построения моделей, используемых в задачах проектирования УФ-С-сенсоров, и крайне важны для систем связи, локации и навигации воздушных судов при заходе последних на посадку на прибрежные аэродромы.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (темы № 122040500060–4 и № 123021700057-0).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Непобедимый С.П., Белов А.А., Калинин А.П. и др.* // Докл. АН. 2010. Т. 432. № 6. С. 764.
2. *Белов А.А., Виноградов А.Н., Егоров В.В. и др.* // Датчики и системы. 2014. № 1. С. 37.
3. *Егоров В.В., Калинин А.П., Коровин Н.А. и др.* // Датчики и системы. 2016. № 3. С. 40.
4. *Егоров В.В., Калинин А.П., Родионов А.И. и др.* // Соврем. пробл. дистанц. зондирования Земли из космоса. 2020. Т. 17. № 4. С. 51; <https://doi.org/10.21046/2070-7401-2020-17-4-51-57>
5. *Виноградов А.Н., Егоров В.В., Калинин А.П. и др.* // Датчики и системы. 2015. № 12. С. 29.
6. *Козлов П.В., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г. и др.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 8. С. 26; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21080069>
7. *Козлов П.В., Забелинский И.Е., Быкова Н.Г. и др.* // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 9. С. 26; <https://doi.org/10.31857/S0207401X22090047>
8. *Ларин И.К.* // Хим. физика. 2023. Т. 41. № 1. С. 84; <https://doi.org/10.31857/S0207401X23010077>
9. *Родионов А.И., Родионов И.Д., Родионова И.П. и др.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 10. С. 61; <https://doi.org/10.31857/S0207401X21100113>
10. *Родионов И.Д., Родионов А.И., Родионова И.П. и др.* // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 7. С. 30; <https://doi.org/10.1134/S0207401X19070136>
11. *Городничев В.А., Пашенина О.Е., Белов М.Л. и др.* // Науч. изд. МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2014. № 11. С. 482; <https://doi.org/10.7463/1114.0731582>
12. *Белов А.А., Калинин А.П., Крысюк И.В. и др.* // Датчики и системы. 2010. № 1. С. 47.
13. *Белов М.Л., Городничев В.А., Пашенина О.Е.* // Науч. изд. МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2013. № 8. С. 255; <https://doi.org/10.7463/0813.0587120>
14. *Калошин Г.А.* // Оптика атмосферы и океана. 2018. Т. 31. № 11. С. 881; <https://doi.org/10.15372/AOO20181104>