\_

# Том 41, номер 10, 2022

Строение химических соединений, квантовая химия, спектроскопия	I
Волохов В.М., Полуянов Л.В.	
Релятивистский эффект Яна—Теллера ${}^2T_g  imes e_g$ в октаэдрических молекулах с тяжелым центральным атомом	3
Анфимов Д.Р., Голяк Иг.С., Небритова О.А., Фуфурин И.Л.	
Дисперсионный анализ спектров диффузного рассеяния, полученных с помощью квантово-каскадного лазера как средство идентификации веществ	10
Кинетика и механизм химических реакций, катализ	
Морозов И.И., Васильев Е.С., Волков Н.Д., Морозова О.С., Нигматуллин Д.Р., Сыромятников А.Г., Савилов С.В.	
Реакции бензил- и гидроксиэтил-радикалов с оксидом азота	16
Физические методы исследования химических реакций	
Шумова В.В., Поляков Д.Н., Василяк Л.М.	
Влияние метастабильных атомов на нагрев микрочастиц в плазме газового разряда в неоне	23
Химическая физика атмосферных явлений	
Чэнсюнь Ю., Чжицзянь Л., Бычков В.Л., Бычков Д.В., Голубков М.Г., Маслов Т.А., Родионов И.Д., Родионова И.П., Степанов И.Г., Уманский С.Я., Голубков Г.В.	
Распределение концентраций положительных и отрицательных ионов в тропосфере	28
Фролов В.Л., Куликов Ю.Ю., Троицкий А.В.	
Искусственная инжекция энергичных электронов из радиационного пояса Земли — новый канал модификации ионизированной и нейтральной компонент атмосферы	38
Бахметьева Н.В., Жемяков И.Н.	
Вертикальные движения плазмы в динамике мезосферы и нижней термосферы Земли	65
Клименко В.В., Денисенко В.В., Клименко М.В.	
Предпосылки к модификации блока расчета электрического потенциала в ионосфере в модели верхней атмосферы	84

# СТРОЕНИЕ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, КВАНТОВАЯ ХИМИЯ, СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 539.194

# РЕЛЯТИВИСТСКИЙ ЭФФЕКТ ЯНА—ТЕЛЛЕРА ${}^{2}T_{g} \times e_{g}$ В ОКТАЭДРИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛАХ С ТЯЖЕЛЫМ ЦЕНТРАЛЬНЫМ АТОМОМ

# © 2022 г. В. М. Волохов<sup>1\*</sup>, Л. В. Полуянов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем химической физики Российской академии наук, Черноголовка, Россия

\**E-mail: vvm@icp.ac.ru* Поступила в редакцию 09.11.2021; после доработки 16.12.2021; принята в печать 20.12.2021

Анализ основан на учете спин-орбитального взаимодействия в форме оператора Брейта–Паули в электронном гамильтониане молекулы. В качестве последнего мы рассматриваем гамильтониан октаэдрической молекулы  $\tilde{Y}X_6$  с нечетным числом электронов и тяжелым центральным атомом  $\tilde{Y}$ , находящимся в орбитальном  ${}^2D$ -состоянии с одним внешним электроном, и шестью атомами-лигандами X, образующими замкнутую электронную оболочку. Ключевым элементом анализа является построение симметризованных комбинаций произведений  $e_g$ -мод и матриц Паули с последующим разложением электронного гамильтониана в ряд Тейлора по упомянутым симметризованным комбинациям. При этом были учтены вклады основного, первого и второго порядков по степеням  $e_g$ -мод нормальных колебаний. Вибронная матрица 6 × 6, зависящая от двух  $e_g$ -мод, была рассчитана в диабатическом электронном базисе, сконструированном из произведений компонент орбитального D-состояния и электронных спиновых функций. Вибронная матрица включает четыре электростатических параметра и четыре параметра спин-орбитального происхождения. Собственные значения вибронной матрицы (т.е. поверхности потенциальной энергии) инвариантны относительно операций группы молекулярной симметрии  $O'_h$ .

*Ключевые слова:* электронный гамильтониан, оператор спин-орбитального взаимодействия, молекулярная группа симметрии, двойная группа симметрии, симметризованные комбинации, разложение электронного гамильтониана, ряд Тейлора, диабатический базис электронных состояний, групповые правила отбора, вибронная матрица, поверхности потенциальной энергии. **DOI:** 10.31857/S0207401X22100107

# введение

Комплексные (координационные) соединения широко распространены в живой и неживой природе, применяются в промышленности, сельском хозяйстве, науке, медицине. Способность веществ образовывать комплексные соединения используется для разработки эффективных методов получения химически чистых металлов из руд, редких металлов, сверхчистых полупроводниковых материалов, катализаторов, красителей, лекарственных препаратов, очистки природных и сточных вод, растворения накипи в парогенераторах и т.п.

Комплексные соединения [MeF<sub>6</sub>], где Me – тяжелый металл (возможно, ион), а F – атом фтора, часто встречаются как объект синтеза или составляющая технологического процесса. Поэтому исследование их физико-химических свойств как аналитическими, так и расчетными *ab initio* методами [1–4] представляет значительный интерес. В данной работе мы рассматриваем релятивистский эффект Яна–Теллера  ${}^{2}T_{g} \times e_{g}$  в октаэдрических молекулах  $\tilde{Y}X_{6}$  с тяжелым центральным атомом  $\tilde{Y}$ , находящимся в состоянии  ${}^{2}D$ , имеющим один внешний неспаренный *d*-электрон, при том что все остальные электронные оболочки (как в  $\tilde{Y}$ , так и в лигандном комплексе  $X_{6}$ ) являются замкнутыми. Примерами молекул такого типа могут служить Ti<sup>3+</sup>F<sub>6</sub>, Zr<sup>3+</sup>F<sub>6</sub>, Sc<sup>2+</sup>F<sub>6</sub>, Y<sup>2+</sup>F<sub>6</sub> и др. [5–7].

В данной постановке физическая проблема является в основном одноэлектронной. Ниже мы упростим эту ситуацию и будем рассматривать модельную систему: один *d*-электрон центрального атома в октаэдрическом окружении шести равных электростатических зарядов. Неискаженная нормальными колебаниями октаэдрическая конфигурация рассматриваемой модели показана на рис. 1.



**Рис. 1.** Октаэдрическая молекула  $\tilde{Y}X_6$  во внешнем кубе. Центральный атом  $\tilde{Y}$  находится в начале системы координат *x*, *y*, *z*.

Семиатомная октаэдрическая молекула  $\tilde{Y}X_6$  характеризуется совокупностью  $\Omega$  пятнадцати мод нормальных колебаний<sup>1</sup>:

$$\Omega = \{a_{1g}, e_g, t_{2g}, 2t_{1u}, t_{2u}\}.$$
 (1)

В данной работе мы считаем, что из всего множества (1) активирована только пара  $e_g$ -мод нормальных колебаний.

Геометрической группой симметрии молекулы  $\tilde{Y}X_6$  является группа  $O_h$ . Некоторые неприводимые представления этой группы характеризуют симметрию нормальных колебаний в (1). Для проектирования  $e_g$ -мод из межатомных расстояний условимся обозначать через  $|\tilde{Y}X_{(k)}|$  расстояние от атома-лиганда  $X_{(k)}$  до центрального атома  $\tilde{Y}$ . Пользуясь результатами работы [6], мы можем представить координаты  $e_g$ -мод в следующей форме:

$$\begin{cases} u = \frac{1}{2\sqrt{3}} (2|\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{X}_{(3)}| + 2|\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{X}_{(6)}| - |\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{X}_{(1)}| - \\ -|\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{X}_{(4)}| - |\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{X}_{(2)}| - |\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{X}_{(5)}|), \\ v = \frac{1}{2} (|\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{X}_{(1)}| + |\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{X}_{(4)}| - |\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{X}_{(2)}| - |\tilde{\mathbf{Y}}\mathbf{X}_{(5)}|). \end{cases}$$
(2)

Инвариантность  $e_g$ -мод u и v относительно операции инверсии (т.е. их четность) очевидна: как следует из рис. 1, при инверсии в выражениях (2) меняются местами только слагаемые с одинаковыми знаками.

Полученная в этой работе вибронная матрица 6 × 6 может быть применена для расчета или интерпретации фотоэлектронных спектров октаэд-

рических молекул (с тяжелым центральным атомом) в спиновом состоянии S = 1/2. Для этого наш анализ должен быть дополнен расчетом упомянутых выше восьми постоянных параметров для реальных исследуемых молекул с нечетным числом электронов в спиновом состоянии S = 1/2. Рассмотренная в данной работе одноэлектронная модель, разумеется, неприменима для этой цели. Расчет постоянных параметров требует полноформатного применения релятивистской квантовой химии с вычислением ab initio точек потенциальных поверхностей. Эта модель оставляет параметры неопределенными, но позволяет найти зависимость вибронной матрицы от колебательных мод, так как эта зависимость определяется только свойствами симметрии электронного гамильтониана, симметрией нормальных мод и квантовыми числами исследуемых электронных состояний.

## ОДНОЭЛЕКТРОННЫЙ ГАМИЛЬТОНИАН И ЕГО СВОЙСТВА СИММЕТРИИ

Мы рассматриваем одноэлектронный гамильтониан, в котором центральный атом с электроном в *d*-состоянии находится в окружении шести одинаковых электростатических зарядов, расположенных в вершинах октаэдра:

$$\hat{H} = \hat{H}_{es} + \hat{H}_{so},\tag{3}$$

где

$$\hat{H}_{es} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - eQ\Phi(\mathbf{r}) - \frac{eQ_0}{r_0}$$
(4)

– электростатическая часть гамильтониана,

$$\hat{H}_{so} = ig\beta_e^2 \mathbf{S} \left[ \nabla \left( Q\Phi + \frac{Q_0}{r_0} \right) \nabla \right]$$
(5)

 оператор спин-орбитального взаимодействия Брейта-Паули [8].

В формулах (4), (5) использованы следующие обозначения:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{6} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_k|};$$
(6)

**г** — радиус-вектор электрона; **R**<sub>k</sub> — радиус-векторы атомов-лигандов;  $r_0 = |\mathbf{r} - \mathbf{R}_0|$ , **R**<sub>0</sub> — радиусвектор центрального атома (который может быть смещён из центра октаэдра);  $\beta_e = e\hbar/2m_ec$  — магнетон Бора [8]; g = 2.0023 - g-фактор свободного электрона;  $\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$  — вектор операторов электронного спина,  $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$  — матрицы Паули;  $Q_0$  — заряд центрального ядра; Q — заряд ядер-лигандов.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Обозначения и типы симметрии нормальных мод соответствуют монографии Г. Герцберга [5].

Операции геометрической группы симметрии  $O_h$  не коммутируют с гамильтонианом (3) из-за наличия спин-орбитального взаимодействия  $\hat{H}_{so}$ . Модельный одноэлектронный гамильтониан, представленный соотношениями (3)–(6), характеризуется двойной группой симметрии  $O'_h$  (в силу нечетного числа электронов в системе). Упомянутая двойная группа  $O'_h$  имеет 16 неприводимых представлений. Десять из них являются однозначными –

$$\frac{A_{1g}, \ A_{2g}, \ E_g, \ T_{1g}, \ T_{2g}; \ A_{1u}, \ A_{2u}, \ E_u, \ T_{1u}, \ T_{2u}}{1 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 3 \quad 1 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 3},$$

и еще шесть неприводимых представлений являются двузначными —

$$\frac{E_g\left(\frac{1}{2}\right), \ E_g\left(\frac{5}{2}\right), \ G_g\left(\frac{3}{2}\right); \ E_u\left(\frac{1}{2}\right), \ E_u\left(\frac{5}{2}\right), \ G_u\left(\frac{3}{2}\right)}{2 \ 2 \ 4 \ 2 \ 2 \ 4}$$

Цифры под обозначениями неприводимых представлений указывают их размерности. Двойная группа симметрии О' включает 96 операторов, коммутирующих с гамильтонианом (3)-6). Методы вычисления этих операторов симметрии подробно изложены в работах [6, 9, 10]. Опуская детали расчета этих операторов, мы приводим их полный набор в Приложении. Характерной чертой операторов  $O'_h$  является их мультипликативная структура: каждый из операторов (кроме единицы и инверсии) представляет собой произведение унитарной матрицы (действующей на компоненты электронного спина) на пространственную операцию (действующую на координаты электрона).

Помимо операторов симметрии, составляющих группу  $O'_h$ , одноэлектронный гамильтониан (3)–(6) коммутирует с антиунитарным оператором обращения времени [11, 12]:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \widehat{\mathbf{c.c.}}, \quad \hat{T}^2 = -1,$$
 (7)

где оператор c.c. обозначает комплексное сопряжение.

Оператор симметрии  $\hat{T}$  коммутирует с операторами из двойной группы  $O'_h$ . Полная группа симметрии является прямым произведением:

$$G = O'_h \times \left(\hat{E}, \hat{T}\right),\tag{8}$$

где — *E* — единичный оператор, и включает в себя 192 элемента.

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

## РАЗЛОЖЕНИЕ ОДНОЭЛЕКТРОННОГО ГАМИЛЬТОНИАНА В РЯД ТЕЙЛОРА

Мы считаем, что нормальные колебания являются относительно малыми по сравнению с межъядерными расстояниями в симметричной молекуле и не искажают существенно ее симметричную конфигурацию. По этой причине электронный гамильтониан (3)—(6) мы разлагаем в ряд Тейлора по  $e_g$ -модам u и v с удержанием членов основного, первого и второго порядков.

Наиболее очевидным является разложение электронного гамильтониана по степеням и произведениям *и* и *v* и по произведениям *и* и *v* на матрицы Паули. Однако этот метод имеет тот очевидный недостаток, что упомянутые выше степени и произведения не обладают должной симметрией и не принадлежат неприводимым представлениям молекулярной группы симметрии. Имея в виду применение в дальнейшем групповых правил отбора при вычислении матричного представления электронного гамильтониана, мы будем ниже использовать для разложения в ряд Тейлора такие симметризованные комбинации произведений *u*, *v* и матриц Паули, которые принадлежат неприводимым представлениям группы молекулярной симметрии. Все упомянутые выше симметризованные комбинации приведены в табл. 1.

Стоит подчеркнуть, что число симметризованных комбинаций в точности равно числу учтенных степеней нормальных мод и их произведений друг на друга и на матрицы Паули. В данной работе число используемых симметризованных комбинаций равно 23. Ряды Тейлора для электронного гамильтониана мы записываем раздельно для  $\hat{H}_{as}$  и  $\hat{H}_{so}$ :

$$\hat{H}_{es} = \hat{H}_0(T_{2g}) + \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \dots,$$
(9)

$$\hat{H}_{so} = \hat{h}_0 + \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \dots \tag{10}$$

где  $\hat{H}_k$  и  $\hat{h}_k$  включают в себя только члены *k*-го порядка по степеням нормальных мод (k = 0, 1, 2). Ниже мы приводим более подробную форму операторов  $\hat{H}_k$  и  $\hat{h}_k$ :

 $\hat{H}_{0}(T_{2g})$  – собственное значение оператора (4) на собственной функции симметрии  $T_{2g}$ ,

$$\hat{H}_1 = \hat{H}^{(1)}(e_g)u + \hat{H}^{(2)}(e_g)v, \qquad (11)$$

$$\hat{H}_{2} = \hat{H}(a_{1g})I_{2}^{ee} + {}_{1}\hat{H}(e_{g})Z_{1} + {}_{2}\hat{H}(e_{g})Z_{2}.$$
 (12)

Ряды Тейлора для оператора  $\hat{H}_{so}$  имеют следующий вид:

$$\hat{h}_{0} = \hat{h}_{1}(t_{1g})\hat{\sigma}_{x} + \hat{h}_{2}(t_{1g})\hat{\sigma}_{y} + \hat{h}_{3}(t_{1g})\hat{\sigma}_{z}, \qquad (13)$$

## волохов, полуянов

Порядок Номера симметризованных комбинаций		Симметрия	Симметризованные комбинации
Нулевой спин-орбитальный	1, 2, 3	$t_{lg}$	$\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$
Первый орбитальный	4, 5	eg	и, v
Первый спин-орбитальный	6, 7, 8	$t_{lg}$	$\hat{y}_1 = w^- \hat{\sigma}_x,  \hat{y}_2 = w^+ \hat{\sigma}_y,  \hat{y}_3 = -u \hat{\sigma}_z$
	9, 10, 11	$t_{2g}$	$\hat{x}_1 = -w_+\hat{\sigma}_x,  \hat{x}_2 = w\hat{\sigma}_y,  \hat{x}_3 = v\hat{\sigma}_z$
Второй орбитальный	12	$a_{lg}$	$I_2^{ee} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( u^2 + v^2 \right)$
	13, 14	e <sub>g</sub>	$Z_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( u^2 - v^2 \right)$ $Z_2 = -\sqrt{2}uv$
Второй спин-орбитальный	15, 16, 17	$t_{lg}$	$\hat{Y}_{1}^{(1)} = I_{2}^{ee} \hat{\sigma}_{x}, \hat{Y}_{2}^{(1)} = I_{2}^{ee} \hat{\sigma}_{y}, \hat{Y}_{3}^{(1)} = I_{2}^{ee} \hat{\sigma}_{z}$
	18, 19, 20	$t_{lg}$	$\hat{Y}_{1}^{(2)} = Z^{-}\hat{\sigma}_{x}, \hat{Y}_{2}^{(2)} = Z^{+}\hat{\sigma}_{y}, \hat{Y}_{3}^{(2)} = -Z_{1}\hat{\sigma}_{z}$
	21, 22, 23	<i>t</i> <sub>2g</sub>	$\hat{X}_1 = -Z_+ \hat{\sigma}_x,  \hat{X}_2 = Z \hat{\sigma}_y,  \hat{X}_3 = Z_2 \hat{\sigma}_z$

Таблица 1. Симметризованные комбинации произведений нормальных мод и матриц Паули

Примечания:  $Z_{\pm} = \frac{\sqrt{3}}{2}Z_1 \pm \frac{1}{2}Z_2, Z^{\pm} = \frac{1}{2}Z_1 \pm \frac{\sqrt{3}}{2}Z_2, w_{\pm} = \frac{\sqrt{3}}{2}u \pm \frac{1}{2}v, w^{\pm} = \frac{1}{2}u \pm \frac{\sqrt{3}}{2}v.$ 

$$\hat{h}_{l} = \hat{h}_{l}^{(1)}(t_{1g}) \hat{y}_{1} + \hat{h}_{2}^{(1)}(t_{1g}) \hat{y}_{2} + \hat{h}_{3}^{(1)}(t_{1g}) \hat{y}_{3} + + \hat{h}_{l}^{(2)}(t_{2g}) \hat{x}_{1} + \hat{h}_{2}^{(2)}(t_{2g}) \hat{x}_{2} + \hat{h}_{3}^{(2)}(t_{2g}) \hat{x}_{3},$$

$$(14)$$

$$\hat{h}_{2} = \hat{h}_{1}^{(3)}(t_{1g})\hat{Y}_{1}^{(1)} + \hat{h}_{2}^{(3)}(t_{1g})\hat{Y}_{2}^{(1)} + \hat{h}_{3}^{(3)}(t_{1g})\hat{Y}_{3}^{(1)} + + \hat{h}_{1}^{(4)}(t_{1g})\hat{Y}_{1}^{(2)} + \hat{h}_{2}^{(4)}(t_{1g})\hat{Y}_{2}^{(2)} + \hat{h}_{3}^{(4)}(t_{1g})\hat{Y}_{3}^{(2)} + + \hat{h}_{1}^{(5)}(t_{2g})\hat{X}_{1} + \hat{h}_{2}^{(5)}(t_{2g})\hat{X}_{2} + \hat{h}_{3}^{(5)}(t_{2g})\hat{X}_{3}.$$

$$(15)$$

В рядах Тейлора (11)–15) использованы симметризованные комбинации ( $\hat{y}_{1,2,3}$ ;  $\hat{x}_{1,2,3}$ ;  $I_2^{ee}$ ;  $Z_{1,2}$ ;  $\hat{Y}_{1,2,3}^{(1,2)}$ ;  $\hat{X}_{1,2,3}$ ), представленные в табл. 1. Коэффициенты рядов  $\hat{H}$ ,  $\hat{H}^{...}$  и  $\hat{h}_{...}^{...}$  обладают определенной симметрией в группе  $O'_h$ . В частности, они преобразуются в  $O'_h$  по однозначным неприводимым представлениям, которые указаны в круглых скобках как аргументы этих коэффициентов. Данная конструкция симметризованных комбинаций и соответствующих им симметричных коэффициентов обеспечивает инвариантность в группе  $O'_h$  каждой строчки в рядах Тейлора (11)–(15).

# МАТРИЧНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО ГАМИЛЬТОНИАНА

Как уже отмечалось выше, мы считаем, что центральный атом  $\tilde{Y}$  имеет один неспаренный внешний электрон, который находится в d-состоянии и окружен шестью равными электростати-

ческими зарядами в вершинах октаэдра. В этом случае пятикратно вырожденное *d*-состояние расщепляется на трехкратно вырожденное состояние *T*<sub>2g</sub>-симметрии –

$$X = yzD(r)$$
  

$$Y = xzD(r)$$
  

$$Z = xyD(r)$$
(16)

и на двукратно вырожденное состояние  $E_g$ -симметрии —

$$U = \frac{1}{\sqrt{6}} \left( 2z^{2} - x^{2} - y^{2} \right) D(r)$$
  

$$V = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x^{2} - y^{2} \right) D(r)$$
(17)

В выражениях (16) и (17) множитель D(r) является изотропным. Все атомные орбитали (16), (17) подразумеваются нормированными. Поскольку мы исследуем здесь релятивистский эффект Яна—Теллера  $T_{2g} \times e_g$ , нас будут интересовать только орбитальные состояния (16). Для матричного представления электронного гамильтониана мы вводим базис шести спин-орбиталей:

$$\tilde{\Omega} = \{ X \boldsymbol{\alpha}, Y \boldsymbol{\alpha}, Z \boldsymbol{\alpha}, Z \boldsymbol{\beta}, Y \boldsymbol{\beta}, X \boldsymbol{\beta} \}.$$
(18)

Принимая во внимание, что спиновые функции

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{\mu} \ \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
(19)

принадлежат двузначному неприводимому представлению  $E_g(1/2)$  [13], мы находим, что набор шести спин-орбиталей (18) образует двузначное приводимое представление группы  $O'_h$ , которое может быть разложено в следующую сумму неприводимых представлений [13]:

$$T_{2g} \times E_g\left(\frac{1}{2}\right) = E_g\left(\frac{5}{2}\right) + G_g\left(\frac{3}{2}\right). \tag{20}$$

Ниже мы используем базис (18) и разложение на фрагменты (3), (9)–15) для электростатической и спин-орбитальной частей электронного гамильтониана с целью расчета матричных элементов. Проводя эти вычисления, мы вначале осуществляем интегрирование по спиновым переменным. Те матричные элементы, которые при этом не обнуляются, анализируются далее на основе групповых правил отбора. Следует подчеркнуть, что орбитальные части базисных функций (18) преобразуются по однозначному неприводимому представлению  $T_{2g}$ , а все коэффициенты рядов Тейлора (11)–15) преобразуются по различным, но тоже однозначным неприводимым представлениям группы  $O'_h$ . Наличие этой симметрии у множителей интеграндов (матричных элементов) существенно облегчает нахождение отличных от нуля матричных элементов и возможных связей между ними. Дополнительные ограничения на константы вибронного взаимодействия накладывает требование коммутации вибронной матрицы с оператором обращения времени (7), который в базисе (18) приобретает следующий вид:

$$\hat{T} = \begin{vmatrix} & & 1 \\ & & 1 \\ & -1 \\ & -1 \\ -1 \\ -1 \end{vmatrix} \widehat{c.c.}$$
(21)

Опуская детали вычислений, приводим ниже результирующее матричное представление электронного гамильтониана, т.е. вибронную матрицу  $6 \times 6$ , зависящую от двух вырожденных нормальных мод, *и* и *v*:

В вибронной матрице (22) латинскими буквами a, A, B, E обозначены электростатические параметры, греческими буквами  $a, \beta, A, B$  – параметры, имеющие спин-орбитальное происхождение.

Комбинации нормальных мод  $(w^{\pm}, Z_1, Z^{\pm}, I_2^{ee})$  определены в табл. 1 (симметризованные комбинации).

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

Расчет вибронной матрицы (22) является основным результатом данной работы. Шесть собственных векторов и собственных ее значений представляют собой три дублета Крамерса [11, 12]. В силу этого число различных собственных значений равно трем (каждое двукратно вырождено из-за нечетного числа электронов и симмет-

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

рии вибронной матрицы по отношению к обращению времени).

Если мы перейдем от базиса (18) к новому электронному базису, две функции которого преобразуются по двузначному неприводимому представлению  $E_g(5/2)$  и четыре — по двузначному неприводимому представлению  $G_g(3/2)$ , то в силу соотношения (20) для неприводимых представлений становится очевидно, что вибронная матрица (22) описывает релятивистский псевдоэффект Яна-Теллера  $[E_g(5/2) + G_g(3/2)] \times e_g$ . Собственные значения вибронной матрицы (22) имеют чрезвычайно громоздкий вид и могут быть исследованы численно для конкретного набора параметров, рассчитанных для исследуемой молекулы.

# ПРИЛОЖЕНИЕ

1. $\hat{E}$ – единичный оператор	25. $\hat{I}$ — инверсия
2. $\hat{Z}_2^x = i\hat{\mathbb{C}}_2^x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$26. \ \hat{\mathbb{Z}}_2^x = \hat{I}\hat{Z}_2^x$
3. $\hat{Z}_2^y = i\hat{\mathbb{C}}_2^y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$	$27. \ \hat{\mathbb{Z}}_2^y = \hat{I}\hat{\mathbb{Z}}_2^y$
4. $\hat{Z}_{2}^{z} = i\hat{\mathbb{C}}_{2}^{z} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$28. \ \hat{\mathbb{Z}}_2^z = \hat{I}\hat{\mathbb{Z}}_2^z$
5. $\hat{Z}_{3ah} = e^{-\hat{C}_{3ah}} \begin{pmatrix} \hat{v} & -iv \\ v & iv \end{pmatrix}$	$29. \ \hat{\mathbb{Z}}_{3ah} = \hat{I}\hat{Z}_{3ah}$
6. $\hat{Z}_{3bg} = e^{-}\hat{C}_{3bg}\begin{pmatrix} v & -v \\ iv & iv \end{pmatrix}$	$30. \ \hat{\mathbb{Z}}_{3bg} = \hat{I}\hat{Z}_{3bg}$
7. $\hat{Z}_{3cf} = e^+ \hat{C}_{3cf} \begin{pmatrix} v & iv \\ v & -iv \end{pmatrix}$	$31. \ \hat{\mathbb{Z}}_{3cf} = \hat{I}\hat{Z}_{3cf}$
8. $\hat{Z}_{3de} = e^+ \hat{C}_{3de} \begin{pmatrix} v & -v \\ -iv & -iv \end{pmatrix}$	32. $\hat{\mathbb{Z}}_{3de} = \hat{I}\hat{Z}_{3de}$
9. $\hat{Z}_{3ah}^2 = -e^+ \hat{C}_{3ah}^2 \begin{pmatrix} v & v \\ iv & -iv \end{pmatrix}$	33. $\hat{\mathbb{Z}}_{3ah}^{(2)} = \hat{I}\hat{Z}_{3ah}^2$
10. $\hat{Z}_{3bg}^2 = -e^+ \hat{C}_{3bg}^2 \begin{pmatrix} v & -iv \\ -v & -iv \end{pmatrix}$	34. $\hat{\mathbb{Z}}_{3bg}^{(2)} = \hat{I}\hat{Z}_{3bg}^2$
11. $\hat{Z}_{3cf}^2 = -e^- \hat{C}_{3cf}^2 \begin{pmatrix} v & v \\ -iv & iv \end{pmatrix}$	35. $\hat{\mathbb{Z}}_{3cf}^{(2)} = \hat{I}\hat{Z}_{3cf}^2$
12. $\hat{Z}_{3de}^2 = -e^- \hat{C}_{3de}^2 \begin{pmatrix} v & iv \\ -v & iv \end{pmatrix}$	36. $\hat{\mathbb{Z}}_{3de}^{(2)} = \hat{I}\hat{Z}_{3de}^2$
13. $\hat{Z}_{2ab}^{gh} = \hat{C}_{2ab}^{gh} \begin{pmatrix} -iv & -v \\ v & iv \end{pmatrix}$	37. $\hat{\mathbb{Z}}^{gh}_{3ab} = \hat{I}\hat{Z}^{gh}_{3ab}$
14. $\hat{Z}_{2dc}^{ef} = \hat{C}_{2dc}^{ef} \begin{pmatrix} -iv & v \\ -v & iv \end{pmatrix}$	$38. \ \hat{\mathbb{Z}}_{3dc}^{ef} = \hat{I}\hat{Z}_{3dc}^{ef}$
15. $\hat{Z}_{2bc}^{gf} = \hat{C}_{2bc}^{gf} \begin{pmatrix} 0 & -e^{-} \\ e^{+} & 0 \end{pmatrix}$	$39. \ \hat{\mathbb{Z}}_{3bc}^{gf} = \hat{I}\hat{Z}_{3bc}^{gf}$
16. $\hat{Z}_{2ad}^{eh} = \hat{C}_{2ad}^{eh} \begin{pmatrix} 0 & e^+ \\ -e^- & 0 \end{pmatrix}$	40. $\hat{\mathbb{Z}}_{3ad}^{eh} = \hat{I}\hat{Z}_{3ad}^{eh}$
17. $\hat{Z}_{2af}^{ch} = \hat{C}_{2af}^{ch} \begin{pmatrix} iv & iv \\ iv & -iv \end{pmatrix}$	41. $\hat{\mathbb{Z}}_{3af}^{ch} = \hat{I}\hat{Z}_{3af}^{ch}$
18. $\hat{Z}_{2be}^{dg} = \hat{C}_{2be}^{dg} \begin{pmatrix} iv & -v \\ -iv & -iv \end{pmatrix}$	42. $\hat{\mathbb{Z}}^{dg}_{3be} = \hat{I}\hat{Z}^{dg}_{3be}$
19. $\hat{Z}_4^x = \hat{C}_4^x \begin{pmatrix} v & -iv \\ -iv & v \end{pmatrix}$	43. $\hat{\mathbb{Z}}_4^x = \hat{I}\hat{Z}_4^x$
20. $\hat{Z}_4^y = \hat{C}_4^y \begin{pmatrix} v & -v \\ v & v \end{pmatrix}$	44. $\hat{\mathbb{Z}}_4^y = \hat{I}\hat{Z}_4^y$
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	

Операторы двойной группы молекулярнойметрии О

21. $\hat{Z}_4^z = \hat{C}_4^z \begin{pmatrix} e^- & 0 \\ 0 & e^+ \end{pmatrix}$	$45.\ \hat{\mathbb{Z}}_4^z = \hat{I}\hat{Z}_4^z$
22. $\hat{Z}_{4}^{x^{3}} = \hat{C}_{4}^{x^{3}} \begin{pmatrix} v & iv \\ iv & v \end{pmatrix}$	46. $\hat{\mathbb{Z}}_4^{x^3} = \hat{I}\hat{Z}_4^{x^3}$
23. $\hat{Z}_{4}^{y^{3}} = \hat{C}_{4}^{y^{3}} \begin{pmatrix} v & v \\ -v & v \end{pmatrix}$	47. $\hat{\mathbb{Z}}_{4}^{y^{3}} = \hat{I}\hat{Z}_{4}^{y^{3}}$
24. $\hat{Z}_{4}^{z^{3}} = \hat{C}_{4}^{z^{3}} \begin{bmatrix} e^{+} & 0 \\ 0 & e^{-} \end{bmatrix}$	48. $\hat{\mathbb{Z}}_4^{z^3} = \hat{I}\hat{Z}_4^{z^3}$
$(\mathbf{v} \mathbf{c})$	1

49.— 96. (-1)×(1. – 48.) : –*E*, – $\hat{Z}_{2}^{x}$ ,...,– $\hat{\mathbb{Z}}_{4}^{y}$ ,  $\hat{\mathbb{Z}}_{4}^{z}$ Используемые обозначения:  $e^{\pm} = \exp(\pm i\pi/4)$ ;  $v = 1/\sqrt{2}$ . Обозначения пространственных операторов взяты из монографии [13].

Работа выполнена в соответствии с госзаданием (регистрационный номер АААА-А19-119071190017-7 (Л.В. Полуянов) и АААА-А19-119120690042-9 (В.М. Волохов)).

# СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Волохов В.М., Полуянов Л.В. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 3. С. 11.
- 2. Волохов В.М., Полуянов Л.В. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 7. С. 21.
- 3. *Волохов В.М., Полуянов Л.В.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 3. С. 41.
- Полуянов Л.В., Ушаков В.Г. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 5. С. 3.
- 5. Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. М.: Мир, 1969.

- Poluyanov L.V., Domcke W. // J. Chem. Phys. 2012. V. 137. P. 114101.
- Grinberg M., Mandelis A., Fjeldsted K. // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. P. 5922.
- 8. Банкер Ф. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия. М.: Мир, 1981.
- Poluyanov L.V., Domcke W. // Springer Ser. Chem. Phys. 2009. V. 97. P. 77.
- Poluyanov L.V., Domcke W. // Adv. Ser. Phys. Chem. 2011. V. 17. P. 117.
- Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
- 12. Вигнер Е. Теория групп. М.: Изд-во иностр. лит., 1961.
- Balasubramanian K. Relativistic effects in chemistry. Part A: Theory and Techniques. N.Y. – Toronto: John Wiley and Sons, Inc., 1991.

# - СТРОЕНИЕ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, КВАНТОВАЯ ХИМИЯ, СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 681:785.5

# ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ СПЕКТРОВ ДИФФУЗНОГО РАССЕЯНИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-КАСКАДНОГО ЛАЗЕРА КАК СРЕДСТВО ИДЕНТИФИКАЦИИ ВЕЩЕСТВ

© 2022 г. Д. Р. Анфимов<sup>1\*</sup>, Иг. С. Голяк<sup>1</sup>, О. А. Небритова<sup>1</sup>, И. Л. Фуфурин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

\**E-mail: diman\_anfimov@mail.ru* Поступила в редакцию 22.04.2022; после доработки 06.05.2022; принята в печать 20.05.2022

Рассмотрена математическая модель затухающих гармонических осцилляторов на основе уравнений Лоренца для расчета оптических характеристик среды. С использованием экспериментальной установки, созданной на базе инфракрасного квантово-каскадного лазера в диапазоне длин волн 5.3–12.8 мкм с пиковой мощностью до 150 мВт, зарегистрированы спектры диффузного рассеяния отдельных кристаллов перхлората калия. С помощью соотношений Крамерса–Кронига и зарегистрированных спектров рассеяния вычислены спектры пропускания. Получены параметры модели на основе уравнений Лоренца для спектров рассеяния перхлората калия, что позволило вычислить спектры пропускания. Последние могут быть использованы для детектирования веществ, в том числе в следовых количествах на различных поверхностях.

*Ключевые слова:* диффузное рассеяние, квантово-каскадный лазер, инфракрасная спектроскопия, дисперсионная модель Лоренца.

DOI: 10.31857/S0207401X22100028

#### введение

Задача исследования веществ в различных агрегатных состояниях является актуальной на сегодняшний день и решается широким кругом научных коллективов как в России [1-3], так и за рубежом [4, 5]. Инфракрасная спектроскопия – общепринятый в отечественной и мировой практике оптический метод исследования состава и структуры химических соединений [6]. Как правило, в рутинных лабораторных исследованиях для исследования веществ в различных агрегатных состояниях применяется метод инфракрасной фурье-спектроскопии [7, 8]. Особенное распространение этот метод получил для анализа химических соединений в газообразной фазе, в том числе для идентификации веществ в открытой атмосфере пассивным способом (инфракрасная фурье-спектрорадиометрия) [9].

Универсальным методом исследования поверхности Земли [10] является дистанционное зондирование. Для исследования веществ в твердой и жидкой фазе в настоящее время, как правило, применяют метод спектроскопии комбинационного рассеяния света (раман-спектроскопия) [11–13]. Лазерная инфракрасная спектроскопия [14] позволяет существенно повысить чувствительность метода и, как следствие, детектировать существенно малые количества вещества [15].

Квантово-каскадные лазеры (ККЛ) позволяют генерировать инфракрасное излучение в широком диапазоне спектра (до 1000 см<sup>-1</sup>) и выходной оптической мощностью до 500 мВт [16]. Квантово-каскадные лазеры успешно применяются для исследования как газообразных веществ методами лазерной абсорбционной спектроскопии [17], так и твердых веществ методом спектроскопии диффузного рассеяния света [18, 19].

Абсорбционная инфракрасная спектроскопия твердых и жидких веществ требует пробоподготовки [20], что вносит существенное ограничение на возможности метода исследования. В спектроскопии комбинационного рассеяния света, как правило, применяются лазеры мощностью 1 Вт и более, что накладывает ограничения на вероятность разрушения или детонации исследуемого вешества. Перестраиваемые инфракрасные ККЛ. как правило, имеют среднюю выходную оптическую мощность не более 0.1 Вт и с учетом перестройки в широком диапазоне спектра позволяют регистрировать спектры диффузного рассеяния исследуемых веществ. Однако спектры рассеяния химических соединений обладают низкой селективностью. Моделирование спектров поглощения или пропускания с помощью дисперсионной модели позволяет использовать для спектрального анализа более селективные характеристики вещества. Другим способом получения спектров поглощения может быть квантовомеханический расчет, например методом Хартри-Фока или методом, основанным на теории функционала плотности [21, 22]. В данной работе моделирование спектров рассеяния проводится на основе экспериментального спектра с помощью дисперсионной модели Лоренца [23]. Зная параметры модели, можно построить мнимую и действительную части диэлектрической проницаемости, что позволит безэталонно провести идентификацию вещества по спектрам пропускания [24]. Преобразования Крамерса-Кронига [25, 26], связывающие действительную и мнимую части комплексной функции, позволяют с применением уравнений Френеля [19] преобразовать экспериментально зарегистрированный спектр рассеяния света в спектр пропускания.

В настоящей работе построена дисперсионная модель Лоренца для кристалла перхлората калия, на основе которой рассчитан коэффициент экстинкции. С помощью преобразований Крамерса—Кронига проведено преобразование экспериментально зарегистрированных спектров рассеяния в спектры пропускания. Полученные результаты могут быть использованы для решения задач идентификации веществ на различных поверхностях.

#### МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

#### Дисперсионный анализ спектра

Для моделирования спектров рассеяния широко используется дисперсионный анализ [27]. С помощью дисперсионной модели комплексной диэлектрической проницаемости рассчитывается модельный спектр рассеяния, а затем происходит подбор параметров затухающих гармонических осцилляторов вида [28]:

$$\varepsilon' = n_0^2 + \sum_j \frac{B_j \left(\omega_j^2 - \omega^2\right)}{\left(\omega_j^2 - \omega^2\right)^2 - \lambda_j^2 \omega^2},$$
(1)

$$\varepsilon'' = \sum_{j} \frac{B_{j} \lambda_{j} \omega}{\left(\omega_{j}^{2} - \omega^{2}\right)^{2} - \lambda_{j}^{2} \omega^{2}},$$
(2)

где  $\omega_j$  — резонансная частота осциллятора;  $B_j$  — сила осциллятора;  $\lambda_j$  — коэффициент затухания; *j* — номер осциллятора;  $n_0$  — поправочный коэффициент, описывающий влияние других осцилляторов, не учитываемых при суммировании.

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

Спектральные коэффициенты преломления, *n*, экстинкции, *k* и рассеяния, *R*, могут быть получены из следующих уравнений:

$$n = \left\{ \frac{1}{2} \left[ \left( \epsilon^{'2} + \epsilon^{''2} \right)^{1/2} + \epsilon^{'} \right] \right\}^{1/2}, \qquad (3)$$

$$k = \left\{ \frac{1}{2} \left[ \left( \epsilon^{'2} + \epsilon^{''2} \right)^{1/2} - \epsilon^{'} \right] \right\}^{1/2}, \qquad (4)$$

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2},$$
(5)

где є', є" — действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости.

Расчет коэффициентов затухающих гармонических осцилляторов в модели Лоренца проводился с помощью нелинейного метода наименьших квадратов.

#### Преобразования Крамерса-Кронига

Соотношения Крамерса—Кронига — это интегральная связь между действительной и мнимой частями любой комплексной функции, аналитичной в верхней полуплоскости. В классической электродинамике соотношения действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости некоторой среды могут быть записаны в следующем виде [29]:

$$\varepsilon'(\omega) - 1 = \frac{1}{\pi} v.p. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon''(x)}{x - \omega} dx,$$
 (6)

$$\varepsilon''(\omega) = -\frac{1}{\pi} v.p. \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon'(x) - 1}{x - \omega} dx.$$
 (7)

Для спектров рассеяния данные соотношения могут быть переписаны следующим образом:

$$R(\mathbf{v}) = \left| \frac{E_{refl}}{E_{incid}} \right| = \eta^2(\mathbf{v}), \tag{8}$$

$$\ln[r(\mathbf{v})] = \ln[\eta(\mathbf{v})] + i\phi(\mathbf{v}), \qquad (9)$$

$$\ln[r(\mathbf{v})] = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\phi(\mathbf{v}') d\mathbf{v}'}{\mathbf{v}' - \mathbf{v}},$$
(10)

$$\mathbf{v}) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\ln[r(\mathbf{v}')]d\mathbf{v}'}{\mathbf{v}' - \mathbf{v}},\tag{11}$$

где R(v) — измеренный спектр рассеяния, r(v) — комплексный спектр рассеяния,  $E_{refl}$  — энергия рассеянного излучения,  $E_{incid}$  — энергия падающего излучения,  $\phi(v)$  — фаза рассеянного излучения,  $\eta(v)$  — амплитуда рассеянного излучения. Фаза рассеянного излучения изменяется в зависимости от показателя пропускания, поэтому для пол-



**Рис. 1.** Принципиальная схема экспериментальной установки для измерения спектров диффузно рассеянного ИК-излучения веществ в твердой и жидкой фазах: *1* – чип квантово-каскадного лазера, *2* – дифракционная решетка, *3* – фотоприемное устройство, *4* – светоделительная пластинка, *5* – исследуемое вещество; справа – спектр рассеяния.

ной характеристики рассеянного излучения необходимо знать его фазу [28].

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Экспериментальная установка [30] измерения диффузно рассеянного инфракрасного излучения твердых тел и жидкостей на различных поверхностях состоит из ККЛ и кадмий-ртуть-теллурового фотоприемного устройства (ФПУ). Охлаждается система с помощью каскада элементов Пельтье.

На рис. 1 представлена экспериментальная установка, используемая для регистрации спектров диффузного рассеяния. Принцип работы установки заключается в следующем: инфракрасное излучение от ККЛ падает по нормали на неотражающую подложку, на которой расположен исследуемый образец. Для твердых частиц размер частиц составляет от 0.1 до 1.0 мм; для жидкостей размеры капель составляют от 2 до 5 мм.

Квантово-каскадный лазер работает в импульсном режиме с пиковой мощностью до 150 мВт и средней мощностью около 20 мВт. Длительность импульса составляет около 50 нс, а частота повторения — около 1 МГц. Излучение находится в спектральном диапазоне от 5.3 до 12.8 мкм с шагом перестройки 2 см<sup>-1</sup>. Поперечное сечение лазерного луча составляет около  $2 \times 4$  мм<sup>2</sup>, расходимость не превышает 5 мрад.

Исследуемый образец расположен на подложке на расстоянии около 50 см от лазера. Инфракрасное излучение падает на образец и отражается диффузно или зеркально. Оптика ФПУ собирает рассеянное излучение под определенным углом в пределах телесного угла 40° на чувствительной области фотоприемника. Фотоприемное устройство представляет собой термоэлектрически охлаждаемый кадмий-ртуть-теллуровый фотоприемник (тип Vigo PVMI-4TE) с обнаружительной способностью  $D^* \sim (6 \div 8) \cdot 10^9$  см Гц<sup>1/2</sup>/Вт и временны́м разрешением не менее 4 нс.

# РЕЗУЛЬТАТЫ

На описанной экспериментальной установке зарегистрированы спектры рассеяния кристаллов КСЮ<sub>4</sub>. На рис. 2 представлен полученный спектр в диапазоне волновых чисел от 900 до 1500 см<sup>-1</sup>. Спектр получен в результате усреднения по 100 спектрам.

Модельный спектр рассеяния построен с помощью модели гармонических осцилляторов Ло-



**Рис. 2.** Экспериментальный спектр рассеяния KClO<sub>4</sub> в диапазоне волновых чисел от 900 до 1500 см<sup>-1</sup>, полученный на экспериментальной установке с ККЛ.



**Рис. 3.** Модель спектра рассеяния  $\text{KClO}_4$  в диапазоне волновых чисел от 900 до 1500 см<sup>-1</sup>: 1 – экспериментальный спектр, 2 – модель, 3 – начальная модель.

ренца, которые позволяют построить приближенный экспериментальный спектр рассеяния  $KClO_4$ . На рис. 3 представлен результат численного эксперимента. В диапазоне волновых чисел от 900 до 1500 см<sup>-1</sup> с высокой точностью оказалось достаточным ограничиться четырьмя осцилляторами. Параметры предложенной модели приведены в табл. 1. Коэффициент корреляции Пирсона между модельным и экспериментальным спектрами составил  $r_p = 0.98$ .

Спектр экстинкции пересчитан по формуле  $T = e^{-k}$  в спектр пропускания с применением полученных коэффициентов. В качестве эталонного спектра был взят спектр пропускания KClO<sub>4</sub> из базы данных NIST [31]. Сравнительные результаты представлены на рис. 4. Коэффициент корре-



**Рис. 4.** Модель спектра пропускания KClO<sub>4</sub> в диапазоне волновых чисел от 900 до 1500 см<sup>-1</sup>: *1* – спектр пропускания из базы данных спектров NIST, *2* – модель затухающих гармонических осцилляторов.

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

ляции Пирсона между моделью и спектром из базы NIST составил  $r_P = 0.85$ .

Далее экспериментальный спектр рассеяния, зарегистрированный на описанной установке, был преобразован в спектр пропускания с помощью преобразований Крамерса—Кронига методом Маклорена [32] с экстраполяцией и фазовой коррекцией [19]. Результат приведен на рис. 5. Коэффициент корреляции составил  $r_p = 0.79$ .

Полученные спектры пропускания могут быть использованы для исследования химического состава химических соединений, а также для обнаружения и идентификации веществ. Для идентификации можно использовать как классические методы, так и методы машинного и глубокого обучения [33, 34]. Основным преимуществом разработанной модели является возможность по-



**Рис. 5.** Спектр пропускания  $\text{KClO}_4$  в диапазоне волновых чисел от 900 до 1500 см<sup>-1</sup>: *1* – спектр пропускания из базы данных спектров NIST, *2* – спектр после преобразования Крамерса–Кронига.

Номер осциллятора	$\omega_j$ , cm <sup>-1</sup>	$B_j, 10^4  \mathrm{cm}^{-2}$	$\lambda_j$ , см $^{-1}$	$n_0$
1	859.11	14.06	70.42	1.18
2	1074.72	56.30	97.03	1.11
3	1374.67	8.60	50.52	0.80
4	1453.78	10.89	55.91	1.00

Таблица 1. Параметры затухающих гармонических осцилляторов

лучения спектров пропускания исследуемого вещества *in situ* без предварительной пробоподготовки. С другой стороны, дисперсионная модель Лоренца связывает феноменологическую теорию Максвелла с теорией атомного строения вещества. Определение молекулярной структуры вещества по оптическим инфракрасным спектрам является нетривиальной задачей и выходит за рамки настоящей работы, однако предложенные математические модели могут быть применены в области решения обратной задачи спектроскопии.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе предложена математическая модель затухающих гармонических осцилляторов на основе уравнений Лоренца для расчета оптических характеристик среды. С помощью соотношений Крамерса—Кронига и зарегистрированных спектров рассеяния вычислены спектры пропускания перхлората калия. Оба приведенных метода позволяют вычислять спектр пропускания среды с высокой корреляцией: не хуже 0.7 соответствующей эталонным спектрам пропускания.

Показано, что спектры пропускания, полученные с помощью дисперсионной модели, имеют более высокую корреляцию Пирсона со спектрами из базы NIST, чем в результате преобразования Крамерса–Кронига. Также показано, что при расчете коэффициентов преломления и экстинкции Крамерса–Кронига требуются экстраполяция и коррекция фазы. Приведенные математические модели и методы могут быть использованы для исследования химического состава соединений по диффузному рассеянию инфракрасного излучения, а также для обнаружения и идентификации веществ на различных подложках.

Работа выполнена в рамках реализации программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030", утвержденной постановлением Правительства Российской Федерации от 13 мая 2021 г. № 729.

# СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Винтайкин И.Б., Голяк И.С., Королев П.А. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 5. С. 9; https://doi.org/10.1134/S1990793121030131
- 2. *Майоров В.Д., Волошенко Г.И., Кислина И.С. //* Хим. физика. 2018. Т. 37. № 4. С. 3; https://doi.org/10.1134/S1990793118020197
- Trofimov V.A., Varentsova S.A. // Appl. Optics. 2016. V. 55. № 33. P. 9605; https://doi.org/10.1364/AO.55.009605
- Yasuura M., Fujimaki M. // Scientific reports. 2016. V. 6. № 1. P. 1; https://doi.org/10.1038/srep39241
- Kevadiya B.D., Machhi J., Herskovitz J. et al. // Nature Mater. 2021. V. 20. № 5. P. 593; https://doi.org/10.1038/s41563-020-00906-z
- 6. *Мальцев А.А.* Молекулярная спектроскопия. М.: Изд-во МГУ, 1980.
- 7. *Морозов А.Н., Светличный С.И.* Основы Фурьеспектрорадиометрии. 2-е изд., испр. и доп. М.: Наука, 2014.
- Фуфурин И.Л., Шлыгин П.Е., Позвонков А.А. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 10. С. 68; https://doi.org/10.1134/S1990793121050146
- 9. Кочиков И.В., Морозов А.Н., Фуфурин И.Л. // Компьютерная оптика. 2012. Т. 36. № 4. С. 554.
- Голубков Г.В., Манжелий М.И., Берлин А.А и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 3. С. 86; https://doi.org/10.31857/S0207401X21030055
- Portnov A., Rosenwaks S., Bar I. // Appl. Phys. Lett. 2008. V. 93. № 4. P. 41115; https://doi.org/10.1063/1.2963981
- 12. Павликов А.В., Константинова Е.А., Калинина И.Г. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 10. С. 22; https://doi.org/10.1134/S1990793119050208
- Винтайкин И.Б., Голяк И.С., Голяк И.С. и др. // Хим. физика. 2020. Т. 39. №. 10. С. 20; https://doi.org/10.31857/S0207401X20100118
- 14. Набиев Ш.Ш., Иванов С.В., Лагутин А.С. и др. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 10. С. 3; https://doi.org/10.1134/S0207401X19100078
- Matthews D.E., Hayes J.M. // Anal. Chem. 1978. V. 50. № 11. P. 1465; https://doi.org/10.1021/ac50033a022
- Castro-Suarez J.R., Hidalgo-Santiago M., Hernández-Rivera S.P. // Appl. Spectrosc. 2015. V. 69. № 9. P. 1023; https://doi.org/10.1366/14-07626
- 17. *Reyes-Reyes A., Horsten R.C., Urbach H.P. et al.* // Anal. Chem. 2015. V. 87. № 1. P. 507; https://doi.org/10.1021/ac504235e
- Голяк И.С., Морозов А.Н., Светличный С.И. и др. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 7. С. 3; https://doi.org/10.1134/S1990793119040055
- Fufurin I.L., Tabalina A.S., Morozov A.N. et al. // Opt. Eng. 2020. V. 59. № 6. P. 061621; https://doi.org/10.1117/1.OE.59.6.061621
- 20. Chalmers J.M., Griffiths P.R. Handbook of vibrational spectroscopy. N.Y.: John Wiley & Sons, 2006.

- Yuan X., Luo K., Liu N. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2018. V. 20. № 32. P. 20779; https://doi.org/10.1039/C8CP01550C
- 22. *Карпова А.А., Шерстобитова А.С.* // Науч.-техн. вестн. информац. технологий, механики и оптики. 2017. Т. 17. № 5. С. 820; https://doi.org/10.17586/2226-1494-2017-17-5-820-825
- 23. Wu C.K., Andermann G. // JOSA. 1968. V. 58. № 4. P. 519; https://doi.org/10.1364/JOSA.58.000519
- 24. Hansen W.N., Abdou W.A. // JOSA. 1977. V. 67. № 11. P. 1537; https://doi.org/10.1364/JOSA.67.001537
- 25. *Young R.H.* // JOSA. 1977. V. 67. № 4. P. 520; https://doi.org/10.1364/JOSA.67.000520
- Robinson T.S. // Proc. Phys. Soc. Section B. 1952.
   V. 65. № 11. P. 910.
- Andermann G., Caron A., Dows D.A. // JOSA. 1965.
   V. 55. № 10. P. 1210; https://doi.org/10.1364/JOSA.55.001210

- 28. Ефимов А.М. Оптические свойства материалов и механизмы их формирования. СПб.: ИТМО, 2008.
- 29. *Агранович В.М., Гинзбург В.Л.* Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теории экситонов. М.: Наука, 1979.
- 30. Samsonov D.A., Tabalina A.S., Fufurin I.L. // J. Phys.: Conf. Series. 2017. V. 918. № 1. P. 012034; https://doi.org/10.1088/1742-6596/918/1/012034
- 31. NIST Chemistry WebBook; https://webbook.nist.gov/ chemistry/
- 32. *Ohta K., Ishida H.* // Appl. Spectrosc. 1988. V. 42. № 6. P. 952;
  - https://doi.org/10.1366/0003702884430380
- 33. Fufurin I.L., Anfimov D.R., Kareva E.R. et al. // Opt. Eng. 2021. V. 60. № 8. P. 082016; https://doi.org/10.1117/1.OE.60.8.082016
- Fufurin I.L., Berezhanskiy P.V., Golyak I.S. et al. // Materials. 2022. V. 15. № 9. P. 2984; https://doi.org/10.3390/ma15092984

# КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ, КАТАЛИЗ

УДК 544.421.081.7:544.421.032.76

# РЕАКЦИИ БЕНЗИЛ- И ГИДРОКСИЭТИЛ-РАДИКАЛОВ С ОКСИДОМ АЗОТА

# © 2022 г. И. И. Морозов<sup>1\*</sup>, Е. С. Васильев<sup>1</sup>, Н. Д. Волков<sup>1</sup>, О. С. Морозова<sup>1</sup>, Д. Р. Нигматуллин<sup>1</sup>, А. Г. Сыромятников<sup>1, 2</sup>, С. В. Савилов<sup>2, 3</sup>

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

<sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

<sup>3</sup>Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук, Москва, Россия

\**E-mail: igormrzv@gmail.com* Поступила в редакцию 29.03.2022; после доработки 18.04.2022; принята в печать 20.04.2022

Бензил- и гидроксиэтил-радикалы играют важную роль в процессах горения и окисления толуола и этанола. В результате их реакций с оксидами азота образуется целый ряд токсикантов, в том числе частицы сажи. Установление механизма реакций бензил- и гидроксиэтил-радикалов с оксидами азота позволят объяснить многие важные химические процессы при горении и в атмосфере. В данной работе с помощью экспериментальной методики, использующей проточный реактор и времяпролетный масс-спектрометр, работающий в режиме многофотонной ионизации, исследованы реакции бензил- и гидроксиэтил-радикалов с оксидом азота в температурном диапазоне 250–360 К при давлении 1 мбар. Для разных типов красителей перестраиваемого лазера получены спектры многофотонной диссоциации гидроксиэтил-радикалов в диапазоне длин волн лазерного излучения от 425 до 590 нм. Экспериментально установлен вид температурной зависимости отношения констант скорости реакций оксида азота с бензил- и гидроксиэтил-радикалами. С использованием литературных данных методом конкурирующих реакций получено значение константы скорости реакции NO с C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH<sub>2</sub> при температуре T = 299 К.

*Ключевые слова:* бензил- и гидроксиэтил-радикалы, оксид азота, константа скорости реакции, массспектрометрия, многофотонная ионизация.

DOI: 10.31857/S0207401X22100089

# 1. ВВЕДЕНИЕ

Процессы газофазных трансформаций толуола и этанола играют важную роль в горении и окислении углеводородных топлив, а также в химии атмосферы. Бензил – первичный продукт окисления толуола, образующийся при потере атома водорода Н метильной боковой цепи. Толуол является простейшим алкилированным ароматическим соединением и одной из самых крупных компонент дизельного топлива и бензина. Окисление толуола начинается с реакции с гидроксильным радикалом ОН. Далее образовавшиеся свободные радикалы вступают в реакции с молекулярным кислородом и другими малыми газовыми примесями атмосферы, включая оксиды азота. В свою очередь, этанол представляет собой наиболее распространенный органический реагент, который находит широкое практическое применение. В настоящее время во многих странах используется биотопливо, основу которого составляет этанол.

Бензил- и гидроксиэтил-радикалы являются ключевыми промежуточными звеньями в окислении ароматических углеводородных топлив и образовании токсичных полициклических ароматических углеводородов. Реакции бензильных радикалов с оксидами азота играют важную роль в химии атмосферы и процессах горения ароматических соединений, которые коагулируют с образованием частиц сажи. Наличие этих соединений в атмосфере является серьезной экологической проблемой из-за их токсичности [1] и потенциального участия в глобальном потеплении [2]. Для специалистов гидроксиэтильный радикал CH<sub>3</sub>CHOH представляет особый интерес ввиду его важной роли в процессах горения и трансформации в атмосфере, а также способности реагировать с NO<sub>x</sub>. В процессах горения и атмосферной трансформации образовавшиеся бензил- и гидроксиэтил-радикалов реагируют с другими окружающими молекулами, в том числе и с монооксилом азота:

$$C_6H_5CH_2 + NO \rightarrow C_6H_5CH_2NO, \qquad (1)$$

$$CH_3CHOH + NO \rightarrow CH_3CHO + HNO,$$
 (2)

$$CH_3CHOH + NO \rightarrow CH_3CH(NO)OH.$$
 (3)

Процессы (1)-(3), в которых образуются токсиканты, вплоть до настоящего времени недостаточно изучены.

Авторы работы [3], применяя методы лазерного импульсного фотолиза и фотоионизационной масс-спектрометрии, исследовали реакцию радикала гидроксиэтила с оксидом азота (3) и привели значение константы скорости реакции  $k = (2.4 \pm 0.6) \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{молекул}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ . Теоретическое исследование реакции гидроксиэтил-радикалов с оксидом азота в диапазоне температур 200–1100 К и давлений от 1.0 · 10<sup>-5</sup> до 10 бар было выполнено в работе [4]. В частности, было показано, как изменяются каналы и продукты реакции в зависимости от давления и температуры.

Впервые кинетика реакции

$$C_6H_5CH_2 + NO + M \rightarrow C_6H_5CH_2NO + M$$
(4)

при избытке NO в реакторе исследовалась импульсным фотолизом в работе [5], где в качестве буферного газа М использовался молекулярный азот. В результате константа скорости оказалась равной  $k = (10 \pm 1) \cdot 10^{-12} \text{ см}^3 \cdot \text{молекулa}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ . Авторами работы [6] рассматривалась равновесная кинетика обратимого процесса присоединения NO к бензил-радикалу C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH<sub>2</sub> при атмосферном давлении и в интервале температур 400 < T << 520 К. Полученное значение величины константы скорости реакции совпало с данными из работы [5].

В лабораторных экспериментах бензил- и гидроксиэтил-радикалы получают в результате реакции атомарного хлора с толуолом и этанолом, т.е.

Cl + C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH<sub>3</sub> → C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH<sub>2</sub> + HCl,  

$$\Delta H = -4.3$$
 кДж/моль,
(5)

\_\_\_\_

$$Cl + C_2H_5OH \rightarrow CH_3CHOH + HCl,$$
  
 $\Delta H = -38.9 \ \kappa \mbox{Д} \mbox{ж/моль}.$ 
(6)

Реакция (5) толуола с атомарным хлором исследовалась ранее методом импульсного радиолиза в сочетании с УФ-спектроскопией [7]. Авторы зарегистрировали УФ-спектр бензил радикала в диапазоне длин волн 210-340 нм. Абсолютные значения константы скорости реакции (5) были измерены в работе [8] с одновременным использованием методов лазерного фотолиза и инфракрасного поглощения непрерывного действия,

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 Nº 10 2022 включающего многопроходную абсорбционную ячейку типа Херриотта.

Реакция атомов хлора с этанолом рассматривалась ранее в нескольких лабораториях. Так, в работе [9] реакция (6) в проточном реакторе при комнатной температуре и давлении в несколько мбар исследовалась методом конкурентных реакций с анализом продуктов и реагентов с помощью масс-спектрометра. В этих экспериментах отрыва атомов водорода от ОН-группы не наблюдался, поскольку атом Н отрывается от алкильной группы, что термодинамически более выгодно. Более детальная информация об атмосферных процессах с участием бензола и этанола приведена в работах [10, 11].

Метод многофотонной ионизации (МФИ) широко применяется в исследовании кинетики химических реакций [3]. Ионизация свободных радикалов протекает в несколько стадий. Сначала происходит поглощение фотона радикалом и переход последнего в возбужденное состояние. Затем следует поглощение следующего кванта, которое приводит к фотоионизации частицы. Образовавшиеся при этом ионы детектируются массспектрометром. Метод МФИ является достаточно высокочувствительным и селективным. Он лишен многих недостатков метода ионизации электронным ударом, которая приводит к диссоциативной ионизации молекул и сложностям интерпретации масс-спектров. Впервые спектр МФИ радикалов бензила был зарегистрирован в реакции атомов хлора с бензолом [12]. В дальнейшем этот метод успешно использовался при исследовании реакций атомарного кислорода с молекулярным бромом [13], в котором был зарегистрирован масс-спектр радикалов BrO.

Цель настоящего исследования заключалась в установлении кинетических закономерностей реакций бензил- и гидроксиэтил-радикалов с оксидом азота при давлении 1 мбар в температурном диапазоне от 250 до 360 К с использованием метода конкурирующих реакций.

#### 2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Описание экспериментальной методики. использующей проточный реактор, времяпролетный масс-спектрометр (работающий в режиме многофотонной ионизации и ионизации электронным ударом) и систему напуска реагентов и продуктов реакции в виде молекулярного пучка, было приведено ранее в работах [14, 15]. Указанная методика применялась для детектирования радикалов CH<sub>3</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>, CH<sub>2</sub>OH, CH<sub>3</sub>CHOH и их дейтерированных аналогов при установлении кинетических закономерностей элементарных реакций в газовой фазе.

#### Методика кинетических измерений

Эта же методика с небольшими модификациями была применена в настоящей работе для исследования реакций (1)—(3) бензил- и гидроксиэтил-радикалов с оксидом азота в проточном реакторе в температурном диапазоне 250-360 K и при давлении 1 мбар = 0.75 Торр.

Принципиальная схема экспериментальной установки приведена на рис. 1. Толуол и этанол в определенных концентрациях в смесях с газомносителем гелием подавали в зону реакции через инжектор *1*. На рис. 2 детально показан ввод толуола и этанола в проточный реактор через инжектор. Молекулярный хлор в смеси с гелием вводили в разрядную трубку, а оксид азота подавали в зону реакции через отдельную линию.

Атомы хлора получали в результате пропускания 5%-ной смеси хлора в гелии через высокочастотный разряд выше по потоку по отношению к реакционной зоне. Диссоциация хлора достигала 20–60%. Концентрации толуола, этанола, Cl<sub>2</sub> и NO устанавливали по изменению давления в калиброванном объеме. Концентрацию атомов хлора определяли по степени диссоциации молекулярного хлора в разряде.

Концентрации реагентов и продуктов реакций, включая свободные радикалы, измеряли масс-спектрометрическими методами с применением ионизации электронным ударом и МФИ. В работе были задействованы два масс-спектрометра: в первом в качестве анализатора использовался масс-спектрометр с секторным магнитом, а во втором – времяпролетный масс-анализатор. Свободные радикалы детектировались методом МФИ, осуществляемой с помощью перестраиваемого лазера на красителях Lambda Physik FL 2002 (USA), накачка которого осуществлялась эксимерным лазером Lambda Physik LPX205 iCC (USA). Эксимерный лазер работал на длине волны  $\lambda = 308$  нм (рабочая смесь XeCl) с энергией 400 мДж, длительностью импульса  $\tau = 28$  нс и частотой повторения импульсов 5 Гц. Для детектирования ионов использовались многоканальные пластины. Свет от перестраиваемого лазера фокусировался кварцевой линзой на молекулярный пучок в ионном источнике.

Концентрации реагентов в реакциях (1)–(3), определенные с помощью МФИ, составили  $[C_6H_5CH_2]_0 = [CH_3CHOH]_0 = 2.4 \cdot 10^{14}$  молекул/см<sup>3</sup>. Концентрация [NO]\_0 изменялась в диапазоне (6÷54) 10<sup>13</sup> молекул/см<sup>3</sup>. Нижний индекс "0" обозначает концентрации веществ до реакций с атомарным хлором.

Скорость потока составляла 40—50 м/с. Расстояние между инжектором и зоной отбора пробы было около 3 см. В реакторе поддерживалось давление в 1 мбар. Температуру устанавливали и



**Рис. 1.** Времяпролетный масс-спектрометр с многофотонной ионизацией: *1* – инжектор, *2* – высокочастотный разряд, *3* – откачка, *4* – отбор проб, *5* – линза, *6* – время пролетный масс-спектрометр, *7* – манометр, *8* – лазер на красителях, *9* – эксимерный лазер.



Рис. 2. Схема проточного реактора и ввода реагентов.

поддерживали путем циркуляции в рубашке термостатирующей жидкости термостатом F30 производства компании Julabo (Germany) с точностью  $\pm 1$  К. Температура измерялась термопарой, помещенной в жидкость. Ионный ток собирался и накапливался за N = 200 лазерных импульсов.

#### Реактивы и красители

В эксперименте использовали коммерческие peareнты: гелий высокой чистоты (99.996%, Messer-Griesheim), толуол (98.5%, Sigma-Aldrich), этанол (98.7%, Sigma-Aldrich), NO (98.7%, Linde), Ar (99.996%, Messer-Griesheim); Cl<sub>2</sub> (98%, MesserИнтенсивность



**Рис. 3.** Масс-спектр радикалов  $C_6H_5CH_2$  и  $CH_3CHOH$ , генерируемых реакциями (5) и (6) на длине волны 502.5 нм.

Griesheim, 5%-ный раствор в He). Все реактивы использовали после очистки и обезгаживания.

В перестраиваемом лазере на красителях применяли следующие красители: Coumarin 153 (Dye 153) в области спектра 517–574 нм с максимумом при 535 нм; Coumarin 307 (Dye 307) в области спектра 480–540 нм с максимумом при 500 нм; Coumarin 47 (Dye 47) в области спектра 442– 479 нм с максимумом при 460 нм; Coumarin 120 (Dye 120) в области спектра 429–460 нм с максимумом при 441 нм.

#### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

#### Многофотонная ионизация бензили гидроксиэтил-радикалов

Как было сказано выше, бензил- и гидроксиэтил-радикалы получали в результате реакции (5) и (6) атомарного хлора с толуолом и этанолом. На рис. 3 приведен масс-спектр радикалов C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CH<sub>2</sub> (m/z = 91) и CH<sub>3</sub>CHOH (m/z = 45), полученный на длине волны  $\lambda = 502.5$  нм. В табл. 1 для разных типов красителей перестраиваемого лазера представлены характеристики спектров многофотонной диссоциации гидроксиэтил-радикалов в диапазоне длин волн лазерного излучения от 427 до 540 нм.

В верхней части рис. 4 для разных типов применяемых красителей изображена зависимость ионного тока молекулярной массы гидроксиэтил-радикала m/z = 45 от длины волны лазерного излучения. В нижней части этого рисунка приведены соответствующие энергии ионизирующего лазера.

Эксперименты по определению зависимости ионного тока радикала гидроксиэтила от энергии лазера с длиной волны  $\lambda = 544$  нм были проведены при следующих отношениях массы к заряду: m/z = 45, 29 и 43. По результатам этих экспериментов сделан вывод, что молекулярный ион с m/z = 45 образуется 2 + 1 фотонами, а ионы с m/z = 29 и 43 образуются в процессе фрагментации, и для их ионизации требуется дополнительный, четвертый фотон.



**Рис. 4.** Ионный ток гидроксиэтил-радикала, зарегистрированный при m/z = 45 в диапазоне длин волн  $\lambda = 420-574$  нм. Вверху – интенсивность ионного тока *I*, внизу – мощность лазерного излучения Е. Синие кривые (*I*) соответствуют красителю Dye 120, желтые (*2*) – Dye 47, зеленые (*3*) – Dye 307, красные (*4*) – Dye 153.

#### Кинетические измерения

Измерение отношений  $k_1/k_2$  констант скорости реакций (1) и (2) оксида азота с бензил- и гидроксиэтил-радикалами проводилось для семи различных значений температуры. На рис. 5 представлен результат определения  $k_1/k_2$  при T = 299 К.

В табл. 2 собраны данные для отношения констант скорости в диапазоне температур от 250 до 360 К. Обработка этих данных в аррениусовских координатах (см. рис. 6) дает следующее значение:

$$k_1/k_2 = 0.043 \exp(6.9/RT).$$
 (7)

Используя величину  $k_2$ , взятую из работы [3], для константы скорости  $k_1$  при температуре T = 299 К получим

$$k_1 (299 \text{ K}) = 1.67 \cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \cdot \text{ молекула}^{-1} \cdot \text{ c}^{-1}.$$
 (8)

Обратимая реакция (4) радикала бензила с оксидом азота в присутствии молекулярного азота изучалась ранее при различных давлениях и температурах [6]. Так, для прямой реакции (4) были установлены значения констант скорости для нескольких температур:

$$k_4 (415 \text{ K}) =$$
 (9)

$$= (9.1 \pm 0.8) \cdot 10^{-12} \,\mathrm{cm}^3 \cdot$$
 молекула<sup>-1</sup> · c<sup>-1</sup>,

$$k_4 (443 \text{ K}) =$$
  
= (8.1±0.5) · 10<sup>-12</sup> см<sup>3</sup> · молекула<sup>-1</sup> · с<sup>-1</sup>, (10)

$$k_4 (466 \text{ K}) =$$
  
= (6.2 ± 0.9) · 10<sup>-12</sup> см<sup>3</sup>· молекула<sup>-1</sup>· с<sup>-1</sup>. (11)

Однако эти данные были получены в отличных от наших условиях экспериментов, и поэтому их нельзя сравнивать.

В то же время в работе [16] рассматривалась реакция

$$CH_{3}CHOH + NO + He \rightarrow$$
  

$$\rightarrow CH_{3}CH(NO)OH + He,$$
(12)

для которой были измерены константы скорости при различных значениях давления гелия:

$$k_{12} = (12.5 \pm 0.4) \cdot 10^{-12} \,\mathrm{сm}^3 \cdot \mathrm{молекулa}^{-1} \cdot \mathrm{c}^{-1}$$
  
при  $P = 0.55 \,\mathrm{Topp},$  (13)

$$k_{12} = (16.6 \pm 0.6) \cdot 10^{-12} \,\mathrm{сm}^3 \cdot$$
 молекула<sup>-1</sup> · c<sup>-1</sup>  
при  $P = 1.00$  Торр, (14)

$$k_{12} = (18.1 \pm 0.6) \cdot 10^{-12} \text{ см}^3 \cdot \text{ молекула}^{-1} \cdot \text{ с}^{-1}$$
  
при  $P = 2.00 \text{ Торр.}$  (15)

Эти значения оказались близки к результатам, полученным в работе [3] при более высоком давлении (2.0–4.0 Торр). Поэтому использованное на-

Таблица 1. Характеристики спектров многофотонной диссоциации радикалов гидроксиэтила ( $\lambda$  – длина волны, I – интенсивность сигнала, E – энергия лазерного импульса)

Краситель	λ, нм	<i>I</i> , отн. ед.	Е, мДж
Dye 120	425	4	2.9
	430	10	4.5
	435	14	5.8
	440	20	6.4
	445	29	6.1
	450	23	5.9
	455	27	5.3
	460	15	4.0
	465	5	1.6
Dye 47	440	1	—
	443	7	—
	445	11	_
	450	5	6.9
	455	24	8.5
	460	20	9.3
	465	40	9.6
	470	34	9.8
	475	28	8.5
	480	20	8.0
	485	12	5.6
Dve 307	490	6	1.0
Dyc 507	400	18	9.0
	492	30	<i>.</i>
	494	37	_
	494 5	30	_
	495	45	10.4
	496	30	
	497	55	_
	500	31	12.0
	504	19	_
	505	29	12.0
	510	32	11.2
	512	16	_
	515	28	10.6
	520	30	10.1
	525	17	9.3
	530	14	8.5
	535	15	6.9
	540	7	5.6
	545	_	4.2
	550	—	2.1
Dye 153	525	_	4.0
	530	—	10.2
	535	40	12.3
	540	55	12.5
	545	42	12.3
	550	40	12.3
	555	36	11.7
	560	21	11.2
	565	25	10.9
	570	14	9.8
	575	12	9.1
	580	9	7.7
	585	6	6.1
	590	4	4.5



**Рис. 5.** Отношение констант скорости реакций оксида азота с бензил- и гидроксиэтил-радикалами при температуре T = 299 K.

ми значение  $k_2$ , взятое из работы [3], для определения величины  $k_1$  (см. (8)) является правомерным.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Настоящее исследование является продолжением цикла работ [17–20] по применению массспектрометрии к исследованию атмосферных процессов. В данной работе с помощью экспериментальной методики, в которых используются проточный реактор и времяпролетный массспектрометр, работающий в режиме многофотонной ионизации, исследованы реакции бензил- и гидроксиэтил-радикалов с оксидом азота в температурном диапазоне 250–360 К и при давлении 1 мбар = 0.75 Торр. Бензил- и гидроксиэтилрадикалы генерировались получали в результате реакций атомарного хлора с толуолом и этанолом. Для разных типов красителей перестраиваемого лазера получены спектры многофотонной диссоциа-

Таблица 2. Температурная зависимость отношения констант скорости реакций бензила и гидроксиэтила с оксидом азота NO в диапазоне температур 250 < T < 360 K

<i>Т</i> , К	$k_1/k_2$
253	1.140
263	1.300
273	0.750
293	0.605
299	0.692
323	0.570
353	0.490

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022



**Рис. 6.** Температурная зависимость отношения констант скорости реакции оксида азота с бензил- и гидроксиэтил-радикалами.

ции гидроксиэтил радикалов в диапазоне длин волн лазерного излучения от 425 до 590 нм.

Экспериментально установлено, что температурная зависимость отношения  $k_1/k_2$  констант скорости реакций оксида азота с бензил- и гидроксиэтил-радикалами имеет вид

$$k_1/k_2 = 0.043 \exp(6.9/RT)$$
.

С использованием литературных данных методом конкурирующих реакций получено следующее значение константы скорости реакции NO с  $C_6H_5CH_2$  при температуре T = 299 K:

$$k_1$$
 (299 К) = 1.67 · 10<sup>-11</sup> см<sup>3</sup> · молекула<sup>-1</sup> · с<sup>-1</sup>.

Представленное исследование было частично выполнено в университете Гёттингена. Авторы выражают благодарность проф. К. Хоерманну за доброжелательную атмосферу, полезные советы и дискуссии, а также д-ру И. Сииба за помощь в совместной работе.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (регистрационные номера тем 122040500060-4 и АААА-А21-121011990019-4) и при финансовой поддержке Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 19-05-50076 (Микромир)).

# СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Dockery D.W., Pope C.A., Xu X. et al. // New Engl. J. Med. 1993. V. 329. № 24. P. 1753.
- Shindell D., Faluvegi G. // Nature Geosci. 2009. V. 2. № 4. P. 294.
- 3. *Miyoshi A., Matsui H., Washida N. //* Chem. Phys. Lett. 1989. V. 160. № 3. P. 291.

- Wang X., Song J., Meng Z. // J. Phys. Chem. A. 2019. V. 123. № 35. P. 7544.
- Ebata T., Obi K., Tanaka I. // Chem. Phys. Lett. 1981.
   V. 77. № 3. P. 480.
- Boyd A.A., Noziere B., Lesclaux R. // J. Phys. Chem. 1995. V. 99. № 27. P. 10815.
- Markert F, Pagsberg P. // Chem. Phys. Lett. 1993.
   V. 209. № 5–6. P. 445.
- Smith J.D., DeSain J.D., Taatjes C.A. // Chem. Phys. Lett. 2002. V. 366. № 3–4. P. 417.
- Khatoon T., Edelbüttel-Einhaus J., Hoyermann K. et al. // Bericht. Bunseng. Phys. Chem. 1989. V. 93. № 5. P. 626.
- Vereecken L. // Adv. Atmos. Chem. V. 2: Organic oxidation and multiphase chemistry / Eds. Barker J.R., Steiner A.L., Wallington T.J. New Jersey: World Scientific, 2019.
- 11. Taketani F, Takahashi K., Matsumi Y. et al. // J. Phys. Chem. A. 2005. V. 109. № 17. P. 3935.

- Hoffbauer M.A., Hudgens J.W. // J. Phys. Chem. 1985.
   V. 89. № 24. P. 5152.
- 13. *Морозов И.И., Хоерманн К. //* Докл. АН. 1997. Т. 355. № 2. С. 203.
- 14. Heinemann-Fiedler P., Hoyermann K. // Bericht. Bunseng. Phys. Chem. 1988. V. 92. № 12. P. 1472.
- 15. Edelbüttel-Einhaus J., Hoyermann K., Rohde G. et al. // Sympos. (Intern.) Combust. 1992. V. 24. № 1. P. 661.
- 16. *Daële V., Ray A., Vassalli I. et al.* // Intern. J. Chem. Kinet. 1995. V. 27. № 11. P. 1121.
- 17. Васильев Е.С., Карпов Г.В., Волков Н.Д. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 3. С. 17.
- 18. Дьяков Ю.А., Адамсон С.О., Ванг П.К. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 5. С. 68.
- 19. Васильев Е.С., Волков Н.Д., Карпов Г.В. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 10. С. 30.
- 20. Васильев Е.С., Карпов Г.В., Шартава Д.К. и др. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 5. С. 10.

# ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

УДК 537.525

# ВЛИЯНИЕ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ АТОМОВ НА НАГРЕВ МИКРОЧАСТИЦ В ПЛАЗМЕ ГАЗОВОГО РАЗРЯДА В НЕОНЕ

© 2022 г. В. В. Шумова<sup>1, 2\*</sup>, Д. Н. Поляков<sup>1</sup>, Л. М. Василяк<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Москва, Россия <sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук,

Москва, Россия \*E-mail: shumova@ihed.ras.ru Поступила в редакцию 25.04.2022; после доработки 16.05.2022; принята в печать 20.05.2022

Предложена модель баланса энергии микрочастицы, находящейся в плазме электрического разряда в неоне, рассматривающая нагрев микрочастицы в результате столкновений с электронами и ионами, рекомбинации и тушения метастабильных атомов на ее поверхности. Параметры плазмы вычислялись с использованием жидкостной модели разряда низкого давления в неоне с микрочастицами. Рассчитано повышение температуры микрочастиц диаметром 2.55 мкм, образующих в плазме облака́ при их концентрации  $10^4 - 10^5$  см<sup>-3</sup>, полученные в экспериментах при давлении неона 40 - 120 Па и токах разряда 0.5 - 2.0 мА. Установлено, что вклад тушения метастабильных атомов в нагрев микрочастицы возрастает с увеличением давления и может составлять около 40% от нагрева, связанного с рекомбинацией на ее поверхности.

*Ключевые слова:* поверхностная рекомбинация, тушение возбуждения атома, микрочастица, неон, плазма тлеющего разряда.

**DOI:** 10.31857/S0207401X22100090

# введение

Процессы, происходящие в газе с участием жидких и твердых частиц малого размера, широко распространены в природе и технике [1]. Пламя с нано- и микрочастицами, образующимися при сгорании топлив, является одним из примеров существования комплексной плазмы в естественных условиях при атмосферном давлении. Важным техническим приложением комплексной плазмы являются магнитогидродинамические (МГД) генераторы с использованием в качестве топлива угля и МГД-генераторы с горением газа, в которых для увеличения концентрации электронов добавляются частицы поташа. Естественно, что в таких условиях распыление частиц зависит от температуры их поверхности, которая, в свою очередь, будет зависеть от температуры нейтрального газа и параметров плазмы. Комплексная плазма может существовать и при давлении существенно ниже атмосферного. Например, в ионосфере Земли в результате взаимодействия с космическим излучением образуется плазма, содержащая слои заряженных аэрозольных частиц, влияющие на поглощение и рассеяние электромагнитных волн, в том числе зондирующего излучения [2].

Роль частиц малого размера в процессах горения обсуждалась рядом исследователей [3–7]. В двигателях и химических реакторах на процессы энергообмена и скорость химических реакций влияют нано- и микрочастицы топлива, катализатора [4] и продуктов сгорания [3]. Так, присутствие взвешенных в газе микрочастиц может существенно увеличивать скорость распространения фронта пламени, поглощая излучение от продуктов горения и тем самым прогревая газ, находящийся перед фронтом волны горения [5].

Некоторые аспекты влияния микрочастиц на процессы горения остаются неизученными. Например, не находит удовлетворительного объяснения экспериментально наблюдаемое уменьшение задержек воспламенение горючих смесей в ударных волнах (УВ) при температурах ниже 1000-1100 К. Для объяснения этого явления авторами работы [6] выдвинута гипотеза об очаговом воспламенении водородовоздушной смеси за УВ с последующим дефлаграционным распространением пламени по нагретой смеси. Авторы работы [7] показали, что при T < 1100 К экспериментально измеренные времена задержки воспламенения в УВ в пропане не описываются с помощью кинетических механизмов, предположив, как и в [6], что процесс лимитирует дефлаграционное распространение пламени от отдельных точечных очагов воспламенения. Для объяснения причины раннего возникновения очага в области относительно низких температур авторы [7] также предположили, что как исходные реагенты, так и промежуточные радикалы,

образующиеся за фронтом УВ, могут вступать в каталитические реакции с микрочастицами дисперсной фазы, присутствующими в ударной трубе в виде примесей. В этом случае микрочастица может "создавать зону, благоприятствующую возникновению очага воспламенения" [7].

Очевидно, что превышение температуры поверхности микрочастицы над температурой окружающего газа будет играть принципиальную роль в ускорении реакций вблизи ее поверхности. В этой связи представляется важным понимание процессов, приводящих к нагреву микрочастицы, находящейся в реакционноспособной среде.

Экспериментальных данных по измерению температуры микрочастиц на начальной стадии воспламенения в литературе нам найти не удалось. Однако имеются как экспериментальные данные [8–10], так и хорошо развитые модели комплексной плазмы [8–13], описывающие нагрев микрочастиц, находящихся в плазме газовых разрядов различного состава, которая является удобной модельной системой для исследования явлений не только в области физики плазмы, но и элементарных процессов и переноса в газе.

Температура поверхности микрочастицы в плазме газового разряда определяется тепловым балансом следующих процессов на ее поверхности: диссипации кинетической энергии ионов и электронов, а также энергий рекомбинации пары ион-электрон и тушения возбужденных атомов: обмена энергией с атомами газа; излучения микрочастицы и поглошения ею излучения плазмы: химических реакций на поверхности и т.д. Как правило, в высокочастотном разряде температура поверхности микрочастиц превышает температуру газа на величину от нескольких единиц до нескольких десятков градусов [8–10, 12, 13]. Вклад большинства из упомянутых выше процессов в этот нагрев изучен достаточно подробно, однако нам не удалось найти в литературе анализ вклада в этот нагрев тушения возбужденных атомов. Отметим, что поскольку существенная роль возбужденных атомов и молекул как в процессах горения (см., например, [14]), так и в процессах ионизации (например, [15]) обсуждается уже давно, восполнить этот пробел представляется актуальной задачей. В данной работе основное внимание удалено анализу вклада от процесса тушения метастабильных атомов неона в нагрев микрочастицы и его сравнению с другими процессами в плазме разряда постоянного тока низкого давления.

# МОДЕЛЬ БАЛАНСА ЭНЕРГИИ МИКРОЧАСТИЦЫ В ПЛАЗМЕ

Повышение температуры поверхности заряженной микрочастицы в плазме определяется подводом энергии к ее поверхности за счет ударов ионов и электронов, рекомбинации пары ион—

электрон и выделения энергии при тушении метастабильных атомов, а охлаждение – уносом тепла нейтральными атомами при их ударах о поверхность. Радиационным переносом тепла при наших давлениях можно пренебречь. Как показано, например, в работе [12], температура микрочастиц в плазме при давлениях больше 20 Па определяется конкуренцией столкновительных процессов, а радиационная составляющая теплопередачи начинает играть роль лишь при давлении ниже 10 Па. Если радиус а микрочастицы много меньше длины свободного пробега электронов, ионов и нейтральных атомов, то можно принять, что их взаимодействие с микрочастицей происходит в молекулярном режиме, т.е. взаимодействующие частицы приходят из "бесконечности" и уходят в "бесконечность" и их скорости определяются фоновой плазмой. При этом параметры самой фоновой плазмы будут определяться из жидкостной модели [16].

В плазме неона, состоящей из атомов, электронов, ионов и возбужденных атомов (метастабильных состояний), нагрев единицы поверхности микрочастицы происходит за счет энергии  $\Gamma_+$ , приносимой возбужденными и заряженными частицами плазмы, а охлаждение — за счет энергии  $\Gamma_-$ , передаваемой микрочастицей газу и уносимой нейтральными атомами:

$$\Gamma_{+} = J_{e} \left( W_{ei} + \Delta H_{rec} \right) + J_{m} \Delta H_{m}, \tag{1}$$

$$\Gamma_{-} = J_a k \left( T - T_g \right). \tag{2}$$

В выражениях (1), (2)  $J_{e, m, a}$  – плотности потоков электронов, метастабильных и невозбужденных атомов;  $W_{ei}$  – кинетическая энергия пары ион– электрон, достигающей поверхности микрочастицы;  $\Delta H_{rec}$  и  $\Delta H_m$  – энергии рекомбинации и возбуждения; T и  $T_g$  – температуры поверхности микрочастицы и газа; k – постоянная Больцмана. В выражении (1) энергия рекомбинации пары ион–электрон на поверхности микрочастицы,  $\Delta H_{rec}$ , бралась равной энергии ионизации с основного уровня; 21.56 эВ, а энергия возбуждения метастабильных атомов,  $\Delta H_m$ , – равной 16.62 эВ [16]. Плотности потоков электронов, метастабильных и невозбужденных атомов в (1) и (2) на единицу площади поверхности микрочастицы с зарядом eZ(r) вычислялись как

$$J_e = 0.25n_e v_e \exp\left(-\phi\right),\tag{3}$$

$$J_{m,a} = 0.25 n_{m,a} v_{m,a}, \tag{4}$$

где  $n_{e, m, a}$  — концентрации электронов, метастабильных атомов и невозбужденных атомов;  $v_e = (8kT_{e, m}/\pi m)^{0.5}$  — тепловая скорость электронов, вычисляемая через температуру электронов  $T_e$ ;  $\phi = eZ(aT_e)^{-1}$  — потенциал поверхности микрочастицы, вычисляемый через ее заряд Z и радиус a;  $v_{m, a} = (8kT_{m, a}/\pi M)^{0.5}$  — тепловые скорости метастабильных и невозбужденных атомов;  $T_a = T_g$ .

Здесь *т* и *е* – масса и заряд электрона, *M* – масса атома. Предполагается, что на поверхности микрочастицы происходит полная аккомодация кинетической энергии, энергии возбуждения метастабильных атомов и энергии рекомбинации. Также предполагается, что кинетическая энергия *W*<sub>a</sub> пары ион–электрон, достигающей поверхности микрочастицы, равна энергии электрона. Кинетические энергии ионов и электронов при их захвате кулоновским центром в различных задачах находятся отдельно (см., например, [12]). Нас же интересует суммарная кинетическая энергия пары электрон-ион, так как в равновесии потоки ионов и электронов равны. Поскольку суммарный электрический заряд пары электрон-ион равен нулю, то и суммарная работа, производимая электрическим полем при перемещении этой пары, равна нулю. Следовательно, кинетическая энергия пары ион-электрон, достигающей поверхности микрочастицы, равна сумме начальных тепловых энергий электрона и иона, и, поскольку температура электронов в нашей задаче много больше температуры ионов, будем учитывать только начальную энергию электрона.

## МОДЕЛЬ ПЛАЗМЫ С МИКРОЧАСТИЦАМИ

Микрочастицы с электрическими зарядами eZ(r) образуют облако радиусом  $r_d$  в плазме положительного столба тлеющего разряда радиусом R в неоне. Облако удерживается параболической электростатической ловушкой, образованной аксиальным и радиальным электрическими полями. Радиальное электрическое поле возникает в плазме в результате разделения зарядов при амбиполярной диффузии. Для вычисления величин радиальных потоков ионов и электронов и аксиального тока в плазме используется жилкостная модель плазмы разряда низкого давления в неоне с микрочастицами, наиболее полно изложенная в работе [16]. В рамках этой модели плазма разряда и облако микрочастиц оказывают друг на друга взаимное влияние за счет наличия многочисленных обратных связей [17]. В результате этого параметры плазмы и микрочастиц оказываются связанными, и для их расчета решается система уравнений для радиальных потоков частиц плазмы в электрическом поле разряда.

Поток ионов на единицу поверхности микрочастицы вычисляется с учетом ион-атомных столкновений, согласно работе [18]. Температура электронов, транспортные коэффициенты и коэффициенты реакций возбуждения и ионизации с участием электронов получены с использованием пакета Kinetics Boltzmann solver (BOLSIG+ [19]) и данных базы LXCat [20]. Концентрация электронов *n*<sub>e</sub> связана с током разряда *I* через со-

отношение  $I = 2\pi e \mu_e E \int_0^R n_e(r) r dr$ , где  $\mu_e$  – подвиж-

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

ность электронов, E – напряженность аксиального электрического поля разряда. Распределение микрочастиц в облаке по радиусу разряда задается осесимметричным плоским профилем с концентрацией микрочастиц  $n_d$  на оси и экспоненциальным размытием по краям [21, 22].

#### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Как можно видеть из выражений (1) и (2), в нагрев поверхности микрочастицы вносят вклад как кинетическая энергия частиц плазмы, так и внутренняя энергия, затраченная на возбуждение и ионизацию атомов. В данной работе основное внимание уделено второму вкладу, поскольку в величине первого в большей мере отражаются внешние условия, такие как режим и радиус разряда.

Моделирование показывает, что, хотя равновесный заряд микрочастицы поддерживается равными потоками ионов и электронов, поступающими на ее поверхность, концентрации которых в пределах облака микрочастиц различаются. При этом как заряд микрочастицы, так и потоки частиц плазмы к ней зависят от координаты микрочастицы в разряде [23, 24]. Чтобы не усложнять анализ, все результаты в данной работе представлены для микрочастицы, находящейся на оси разряда.

Моделирование проводилось при экспериментальных параметрах облаков в диапазоне изменения давления неона P = 40-120 Па: величинах тока разряда I = 0.5-2.0 мА и R = 0.825 см для микрочастиц диаметром 2.55 мкм и температуре газа 295 К. Для расчета брали среднее значение радиуса облака  $r_d = 0.4$  см, наблюдаемое в экспериментах [21, 22].

На рис. 1 представлена зависимость приращения температуры (нагрева) поверхности микрочастицы  $\Delta T = T - T_g$  с учетом (верхние линии) и без учета (нижние линии) вклада метастабильных атомов от тока разряда. Видно, что при каждом значении *P* с увеличением тока нагрев микрочастицы  $\Delta T$  увеличиваются, поскольку увеличивается концентрация электронов *n<sub>e</sub>* и связанный с ней вклад энергии, передаваемой микрочастице при упругом столкновении и в результате рекомбинации на ее поверхности (первый член в уравнении (1)). С увеличением *P* нагрев уменьшается, так как увеличивается охлаждение атомами газа (см. (2)).

На рис. 2 показана зависимость нагрева  $\Delta T$  микрочастицы от давления P неона при концентрациях микрочастиц в облаке  $n_d = 10^5$  и  $2 \cdot 10^4$  см<sup>-3</sup> и I = 0.5 мА. Нагрев микрочастицы уменьшается при увеличении концентрации микрочастиц, поскольку при более высоком значении  $n_d$  концентрация электронов  $n_e$  внутри облака уменьшается [16, 25, 26]. Это, в свою очередь, уменьшает суммарную передаваемую микрочастице энергию частиц плазмы.



**Рис. 1.** Нагрев микрочастицы  $\Delta T$  в зависимости от тока разряда *I* при давлении неона 120 (*1*, *2*), 80 (*3*, *4*) и 40 Па (*5*, *6*) с учетом (*1*, *3*, *5*) и без учета (*2*, *4*, *6*) вклада от тушения метастабильных атомов. Концентрация микрочастиц в облаке –  $n_d = 10^5$  см<sup>-3</sup>.

На рис. 3 показана зависимость отношения нагрева микрочастицы от тушения метастабильных атомов неона,  $\Delta T_{met}$ , к нагреву от рекомбинации пары ион-электрон на поверхности микрочастицы,  $\Delta T_{rec}$ . При росте давления неона и повышении концентрации микрочастиц вклад тушения метастабильных атомов существенно возрастает, а с возрастанием тока разряда – убывает. Эта зависимость коррелирует с основными закономерностями изменения соотношения концентраций электронов и метастабильных атомов неона в разряде с микрочастицами, описываемыми нашей моделью [25, 26]. Так, например, на оси разряда при  $n_d = 2 \cdot 10^4$  см<sup>-3</sup> имеем  $n_e = 2.2 \cdot 10^8$  см<sup>-3</sup>,  $n_m = 5.8 \cdot 10^{10}$  см<sup>-3</sup> при P = 40 Па и  $n_e \approx 1.5 \cdot 10^8$  см<sup>-3</sup>,  $n_m \approx 1.4 \cdot 10^{11} \,\mathrm{сm}^{-3}$  при P = 120 Па. При более высокой концентрации микрочастиц,  $n_d = 10^5$  см<sup>-3</sup>, имеем  $n_e = 1.4 \cdot 10^8$  см<sup>-3</sup>,  $n_m = 5.1 \cdot 10^{10}$  см<sup>-3</sup> при P == 40 Па и  $n_e \approx 0.7 \cdot 10^8$  см<sup>-3</sup>,  $n_m \approx 9.7 \cdot 10^{11}$  см<sup>-3</sup> при P = 120 Па (все значения даны при I = 0.5 мA). Напряженность электрического поля при  $n_d =$  $= 2 \cdot 10^4$  см<sup>-3</sup> составляет 4.8 и 5.3 В/см, при  $n_d =$  $= 10^5$  см<sup>-3</sup> - 8.6 и 10.7 В/см для давлений 40 и 120 Па соответственно.

Основной причиной возрастания вклада метастабильных атомов неона в нагрев микрочастиц с ростом давления является то, что отношение степени возбуждения плазмы к степени ионизации,  $n_m/n_e$ , возрастает. Поведение отношения  $\Delta T_{med}/\Delta T_{rec}$ в зависимости от тока разряда (рис. 3) связано с изменением вкладов от процессов возбуждения, ионизации, в том числе из возбужденного состояния, и реакции хемиионизации [27].



**Рис. 2.** Нагрев микрочастицы  $\Delta T$  в зависимости от давления неона при значениях тока разряда I = 0.5 мА и концентрации микрочастиц в облаке  $n_d = 2 \cdot 10^4$  (1) и  $10^5$  см<sup>-3</sup> (2).

Таким образом, можно видеть, что, хотя с повышением давления разница в температуре микрочастицы относительно температуры газа (перегрев) уменьшается (рис. 2), относительный вклад энергии возбужденных состояний существенно возрастает и может составлять около 40% от величины приращения температуры, вносимого рекомбинацией пары ион—электрон на поверхности микрочастиц. Это означает, что вклад от тушения возбужденных состояний в нагрев микрочастиц мо-



**Рис. 3.** Отношение величины нагрева микрочастицы от тушения метастабильных атомов неона,  $\Delta T_{met}$ , к величине нагрева от рекомбинации на поверхности микрочастицы,  $\Delta T_{rec}$ , в зависимости от тока разряда *I* при давлении 40 (*I*), 80 (*2*) и 120 Па (*3*). Концентрация микрочастиц в облаке –  $n_d = 10^5$  см<sup>-3</sup>.

жет играть существенную роль в процессах взаимодействия плазмы с микрочастицами.

По-видимому, учет вклада от энергии возбужленных состояний молекул и атомов как источника нагрева микрочастиц. присутствующих в таких системах, как горючие смеси и содержащие аэрозоли слои ионосферы, также повысит точность моделей, поскольку в таких системах составляющая нагрева, связанная с кинетической энергией заряженных частиц плазмы, невелика (см., например, [28, 29]). Таким образом, роль тушения возбужденных состояний может быть важной и в условиях криогенной пылевой плазмы, поскольку относительные концентрации метастабильных атомов при охлаждении газа возрастают [30], а согласно данным из работы [13], нагрев микрочастиц может достигать нескольких десятков градусов. Данный вопрос, по-видимому, требует дополнительного изучения.

# ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен расчет нагрева поверхности микрочастицы, находящейся в центре облака заряженных микрочастиц с разной их концентрацией в плазме электрического разряда в неоне. Расчет выполнен с учетом вклада от тушения на поверхности микрочастицы метастабильных атомов для разных величин тока разряда и давления неона. При более высокой концентрации микрочастиц в облаке нагрев их поверхности оказывается меньше при тех же параметрах разряда. Этот эффект связан с уменьшением концентрации электронов в облаке при увеличении концентрации микрочастиц вследствие гибели электронов на их поверхности. С увеличением давления неона нагрев микрочастицы уменьшается из-за более интенсивного охлаждения атомами; при этом вклад метастабильных атомов неона в нагрев увеличивается и может быть сравнимым с нагревом от поверхностной рекомбинации пары ион-электрон. Основной причиной увеличения вклада метастабильных атомов неона в нагрев поверхности микрочастицы при повышении давления является возрастание отношения степени возбуждения плазмы к степени ионизации. Данный вывод указывает на важность учета вклада возбужденных атомов в баланс энергии микрочастицы в плазме.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерством науки и высшего образования РФ (госзадание № 075-001056-22-00).

# СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Вараксин А.Ю. // Теплофизика высоких температур. 2014. Т. 52. № 5. С. 777.
- Голубков Г.В., Манжелий М.И., Берлин А.А. и др. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 7. С. 33.
- 3. *Власов П.А., Смирнов В.Н., Тереза А.М. и др. //* Хим. физика. 2016. Т. 35. № 12. С. 35.

- 4. *Трошин К.Я., Стрелецкий А.Н., Колбанев И.В. и др. //* Хим. физика. 2016. Т. 35. № 5. С. 51.
- 5. Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Либерман М.А. // ЖЭТФ. 2015. Т. 148. Вып. 1. С. 190.
- 6. *Medvedev S.P., Agafonov G.L., Khomik S.V., Gelfand B.E. //* Combust. and Flame. 2010. V. 157. № 7. P. 1436.
- 7. Агафонов Г.Л., Тереза А.М. // Хим. физика. 2015. Т. 34. № 2. С. 49.
- Swinkels G.H.P.M., Kersten H., Deutsch H., Kroesen G.M.W. // J. Appl. Phys. 2000. V. 88. № 4. P. 1747.
- 9. *Maurer H.R., Hannemann M., Basner R., Kersten H. //* Phys. Plasmas. 2010. V. 17. № 11. P. 113707.
- 10. *Maurer H.R., Kersten H. //* J. Phys. D: Appl. Phys. 2011. V. 44. № 17. P. 174029.
- 11. *Ignatov A.M.* // Plasma Phys. Rep. 2002. V. 28. № 10. P. 847.
- 12. *Khrapak S.A., Morfill G.E.* // Phys. Plasmas. 2006. V. 13. № 10. P. 104506.
- 13. *Ramazanov T.S., Moldabekov Z.A., Muratov M.M.* // Phys. Plasmas. 2017. V. 24. № 5. P. 050701.
- 14. *Старик А.М., Даутов Н.Г.* // Кинетика и катализ. 1996. Т. 37. № 3. С. 346.
- 15. *Bouchoule A., Boufendi L.* // Plasma Sources Sci. Technol. 1994. V. 3. № 3. P. 292.
- Polyakov D., Shumova V., Vasilyak L. // J. Appl. Phys. 2020. V. 128. № 5. P. 053 301. Polyakov D.N., Shumova V.V., Vasilyak L.M. // Plasma Sources Sci. Technol. 2022. V. 31. № 7. P. 074001.
- 17. Polyakov D.N., Shumova V.V., Vasilyak L.M. // Plasma Sources Sci. Technol. 2021. V. 30. № 7. P. 07LT01.
- 18. D'yachkov L.G., Khrapak A.G., Khrapak S.A., Morfill G.E. // Phys. Plasmas. 2007. V. 14. № 4. P. 042102.
- Hagelaar G.J.M., Pitchford L.C. // Plasma Sources Sci. Technol. 2005. V. 14. P. 722; doi: https://www.bolsig.laplace.univ-tlse.fr/
- Pitchford L.C. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2013. V. 46. P. 330301; https://nl.lxcat.net
- 21. Шумова В.В., Поляков Д.Н., Василяк Л.М. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 8. С. 71.
- 22. Шумова В.В., Поляков Д.Н., Василяк Л.М. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 12. С. 37.
- Shumova V.V., Polyakov D.N., Mataybaeva E.K., Vasilyak L.M. // Phys. Lett. A. 2019. V. 383. № 27. P. 125853.
- 24. Polyakov D.N., Shumova V.V., Vasilyak L.M. // Phys. Lett. A. 2021. V. 389. P. 127082.
- 25. Shumova V.V., Polyakov D.N., Vasilyak L.M. // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V. 653. № 1. P. 012132.
- 26. *Shumova V.V., Polyakov D.N., Vasilyak L.M.* // Plasma Sources Sci. Technol. 2014. V. 23. № 6. P. 065008.
- 27. Шумова В.В., Поляков Д.Н., Василяк Л.М. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 8. С. 70.
- Голубков Г.В., Арделян Н.В., Бычков В.Л., Космачевский К.В. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 7. С. 65.
- 29. Арделян Н.В., Бычков В.Л., Голубков Г.В. и др. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 7. С. 59.
- 30. *Shumova V.V., Polyakov D.N., Vasilyak L.M.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. V. 50. № 40. P. 405202.

# —— ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА АТМОСФЕРНЫХ ЯВЛЕНИЙ —

УДК 537.562; 537.565

# РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИЙ ПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ И ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ В ТРОПОСФЕРЕ

© 2022 г. Ю. Чэнсюнь<sup>1</sup>, Л. Чжицзянь<sup>1</sup>, В. Л. Бычков<sup>2</sup>, Д. В. Бычков<sup>2</sup>, М. Г. Голубков<sup>3\*</sup>, Т. А. Маслов<sup>2</sup>, И. Д. Родионов<sup>3</sup>, И. П. Родионова<sup>3</sup>, И. Г. Степанов<sup>3</sup>, С. Я. Уманский<sup>3</sup>, Г. В. Голубков<sup>3, 4</sup>

<sup>1</sup>Харбинский политехнический университет, Харбин, Китай <sup>2</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия <sup>3</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, *Москва, Россия* <sup>4</sup>Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия *\*E-mail: golubkov@chph.ras.ru* Поступила в редакцию 19.05.2022; после доработки 09.06.2022;

принята в печать 20.06.2022

Рассмотрен процесс формирования сложно заряженных грозовых облаков, обладающих слоями положительных и отрицательных ионов и крупных ионных кластеров, появляющихся в тропосфере под действием космических лучей. Для расчета концентраций ионов разработана кинетическая модель, включающая 34 компонента и 102 реакции. Расчет проведен с использованием программного пакета KINET. Показано, что на высотах от 5 до 35 км ионизация воздуха под действием космических лучей слабоионизованной плазмы, состоящей в основном из ионов  $O_2^-$ ,  $O_2^+$  и  $O_4^+$ . В условиях минимальной магнитной жесткости максимумы концентраций ионов  $O_2^-$  и  $O_4^+$  наблюдаются на высотах от 15 до 20 км. Установлено, что в приземном слое от 0 до 5 км ионизация воздуха, вызываемая  $\gamma$ -излучением, значительно слабее ионизации космическими лучами.

*Ключевые слова:* тропосфера, слоистые облака, магнитная жесткость, ионизация под действием космических лучей, скорость ионизации, молекулярные ионы  $O_2^-$ ,  $O_2^+$  и  $O_4^+$ .

DOI: 10.31857/S0207401X22100041

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Информация о распределении концентраций ионов в нижней атмосфере Земли на высотах до 40 км имеет большое теоретическое и прикладное значение, поскольку положительные и отрицательные ионы определяют электропроводность нижней атмосферы и существенно влияют на формирование заряда тропосферы и облаков [1]. Тропосфера является нижним слоем атмосферы, высота которого составляет 8-10 км в полярных областях, 10-12 км в умеренных широтах и 16-18 км на экваторе [2]. Традиционно сведения о процессах. приводящих к накоплению и изменению сорта ионов, представляют значительный интерес для исследователей, использующих различные типы разрядов в плазмохимических технологиях [3]. При оценках воздействия атмосферы на приборы и распространение радиоволн возникают значительные трудности, так как свойства атмосферного воздуха постоянно изменяются [4].

Нижняя атмосфера Земли характеризуется наличием вертикальных и горизонтальных неоднородностей [5, 6], которые могут быть причиной сбоев в работе глобальных навигационных спутниковых систем. Вертикальные неоднородности в тропосфере формируются, как правило, вследствие резкого изменения давления и температуры воздуха по высоте [7, 8]. Горизонтальные неоднородности возникают вследствие процессов, протекающих вблизи поверхности Земли [9, 10], где существуют водяной пар, туманы и облака, атмосферные осадки и т.д. Такие неоднородности образуются во время метеорологических штормов и других атмосферных явлений вследствие неравномерного нагрева атмосферного воздуха или распределения атмосферного давления [11, 12]. Характерным примером здесь являются слоистые облака, которые, так же как и туман, создают однородный слой. Они образуются при контакте холодного и теплого воздуха, когда последний медленно







**Рис. 2.** Альтитудные зависимости скорости ионизации воздуха космическими лучами при различных значениях магнитной жесткости  $\xi$ : черные ромбы –  $\xi = 0-0.6 \cdot 10^9$  Тл · м, серые квадраты –  $\xi = 2.4 \cdot 10^9$ – 2.5 · 10<sup>9</sup> Тл · м, белые ромбы –  $\xi = 6 \cdot 10^9$  Тл · м, серые треугольники –  $\xi = 13.5 \cdot 10^9$  Тл · м.

поднимается вверх вдоль холодного [13]. Совокупность результирующих горизонтальных и вертикальных движений носит название общей циркуляции атмосферы [14].

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

Отметим, что механизм влияния электрических полей и быстрых частиц на процессы формирования ионов в нижней атмосфере различен на разных высотах. В нижних слоях атмосферы основную роль при образовании однозарядных ионов играет естественное радиоактивное излучение от поверхности почвы, т.е. у-излучение [15]. Однако этот процесс активно протекает на высоте до 500 м над Землей, где образованные заряженные частицы воздействуют на распределение слабого электрического поля. В диапазоне высот от 0 м до 6 км электрическое поле Земли убывает на порядок от величины 130 В/м до 10-20 В/м, т.е. слабо влияет на столкновительные процессы электрон-ионной рекомбинации и прилипания электронов к молекулам кислорода. На высотах от 5 до 25 км важнейшим процессом является ионизация воздуха под действием космических лучей [16–18]. Сказанное наглядно демонстрируется на рис. 1, где представлена альтитудная зависимость полной скорости ионизации атмосферы, Q [15]. Видно, что скорость *Q* максимальна на высоте 12 км. Кроме того, небольшое увеличение Q наблюдается вблизи поверхности Земли, что обусловлено у-излучением от поверхности почвы.

Магнитное поле Земли оказывает существенное влияние на проникновение в атмосферу заряженных частиц или частиц, обладающих магнитным моментом [19–21]. Оно имеет вид магнитного диполя, что препятствует свободному прохождению заряженных низкоэнергетических частиц в атмосферу Земли (за исключением областей, расположенных вблизи магнитных полюсов). Земля действует своим магнитным полем на нуклоны подобно масс-спектрометру. Мерой воздействия магнитного поля является магнитная жесткость ξ, которая пропорциональна магнитному моменту частицы [1]:

$$\xi = \frac{pc}{q} = BR,\tag{1}$$

где q и p — заряд и проекция импульса частицы на плоскость, перпендикулярную направлению вектора магнитной индукции **B**; R — ларморовский радиус; c — скорость света в вакууме.

На рис. 2 приведены альтитудные зависимости скорости ионизации Q космическими лучами, измеренные в различных точках земного шара, т.е. при различных значениях магнитной жесткости [1]. Видно, что зависимость Q от высоты имеет колоколообразную форму с максимумом на расстоянии 10–13 км от поверхности Земли. Кроме того, из данных рис. 2 следует, что с ростом магнитной жесткости  $\xi$  максимальное значение Qпадает, а положение максимума смещается в сторону меньших высот.

Цель данного исследования заключалась в определении альтитудной зависимости концентрации ионов, образующихся в тропосфере в спокойной геомагнитной обстановке под действием космических лучей и радиоактивного  $\gamma$ -излучения от поверхности почвы. Эти данные необходимы для управления процессом формирования слоистых грозовых облаков и искусственного стимулирования выпадения осадков.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 обсуждаются процесс формирования и структура слоистых облаков в тропосфере. Приведена общая схема действия ионов, появляющихся в результате торможения космических лучей в тропосфере. Раздел 3 посвяшен анализу элементарных процессов, протекающих в тропосфере. Выделены доминирующие процессы с участием молекул О<sub>2</sub> и N<sub>2</sub> и их молекулярных ионов. В разд. 4 подробно обсуждаются особенности системы уравнений баланса для электронов, положительно и отрицательно заряженных молекулярных ионов. Раздел 5 посвящен краткому описанию кинетической схемы, которая использовалась для расчета концентраций ионов. Результаты и их обсуждение приведены в разд. 6. Здесь представлены временные зависимости концентраций ионов в тропосфере и зависимости распределения концентраций основных тропосферных ионов по высоте, рассчитанные при различных значениях магнитной жесткости, что отвечает разным точкам географической локации. Завершает статью разд. 7, где обсуждается возможность практического применения полученных результатов.

#### 2. ОБРАЗОВАНИЕ И СТРУКТУРА СЛОИСТЫХ ОБЛАКОВ В ТРОПОСФЕРЕ

Ионы, появляющиеся в тропосфере под действием космических лучей, приводят к формированию сложно заряженных грозовых облаков, обладающих слоями положительных и отрицательных ионов и крупных ионных кластеров. Возникающие при этом электрические разряды (молнии) могут отвечать за многие неблагоприятные последствия. Причем. помимо экологического воздействия, при грозах создаются униполярно заряженные ионами облака, что может приводить к образованию сильных электрических полей в нижней атмосфере. При возникновении таких полей происходит кардинальное изменение электропроводности ионосферы. Последнее значительно влияет на распространение радиосигналов [22]. Кроме того, появляются различные ионосферные плазменные объекты (спрайты), которые отвечают за изменение химико-физических свойств атмосферы.

На рис. 3 приведена общая схема воздействия ионов, появляющихся в результате торможения космических лучей в тропосфере, на электрические поля в ионосфере. Вначале происходит образование ионов в тропосфере под воздействием



**Рис. 3.** Схема формирования электрических полей в ионосфере при заряжении слоистых облаков.

космических лучей, что приводит к заряду обычных облаков и образованию заряженных кластеров [1]. При этом тяжелые отрицательно заряженные кластеры опускаются в нижнюю часть облака. Далее происходит разделение зарядов и облако становится подобным конденсатору (грозовым) [13]. Во время грозы отрицательный заряд переносится молнией вниз, на землю. В результате облако остается заряженным только положительными зарядами [23]. Их концентрация становится  $\sim 10^3$  см<sup>-3</sup>, поэтому происходит формирование электрического поля около облака. В связи с тем, что плотность нейтральных частиц экспоненциально падает с увеличением высоты, в ионосфере создаются условия, когда в этом поле электроны фона, испытывая мало соударений, ускоряются до энергий, при которых происходит ионизация молекул. В результате ионизации во внешнем электрическом поле образуются ионизованные области в ионосфере, которые перемещаются вместе с облаками и влияют на условия распространения радиоволн в нижней ионосфере [22]. В работе [23] было показано, что потоки ионов к поверхности облаков могут также изменять свойства последних и создавать центры конденсации, что позволяет искусственно стимулировать выпадение осадков. Другими словами, появляется дополнительный метод борьбы с грозовыми облаками, который отличается от способа ликвидации облаков с использованием дорогостоящих химических препаратов.

## 3. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ТРОПОСФЕРЕ

Анализ элементарных процессов, протекающих в тропосфере, показывает, что после рождения электронов и ионов эффективно активизируются процессы с участием молекул  $O_2$  и  $N_2$  и их молекулярных ионов. Доминирующими здесь являются следующие процессы [24]: атмосферная фоновая ионизация молекул
 0<sub>2</sub> и N<sub>2</sub> быстрыми электронами:

$$e' + O_2 \rightarrow O_2^+ + e' + e,$$
 (2)

$$e' + N_2 \rightarrow N_2^+ + e' + e;$$
 (3)

2) прямая ионизация молекул O<sub>2</sub> и N<sub>2</sub> медленными электронами:

$$e + O_2 \rightarrow O_2^+ + 2e, \tag{4}$$

$$e + N_2 \rightarrow N_2^+ + 2e, \tag{5}$$

которая сопровождается перезарядкой ионов N<sub>2</sub><sup>+</sup> при последующем столкновении с нейтральными молекулами кислорода, т.е.

$$N_2^+ + O_2 \to O_2^+ + N_2;$$
 (6)

3) диссоциативное прилипание электронов к молекулам  $O_2$  с образованием отрицательных ионов  $O^-$  и атомов O кислорода:

$$e + O_2 \to O^- + O; \tag{7}$$

4) трехчастичное прилипание медленных электронов к молекулам O<sub>2</sub>:

$$e + O_2 + O_2 \to O_2^- + O_2;$$
 (8)

5) образование ионов  $O_2^-$  и  $O_3^-$  в реакциях

$$O^- + O_2 \to O_2^- + O, \tag{9}$$

$$O^- + O_2 + O_2 \to O_3^- + O_2;$$
 (10)

#### 6) последующий отрыв электронов от ионов

О<sup>-</sup>, О<sub>2</sub><sup>-</sup> и О<sub>3</sub><sup>-</sup> при взаимодействии с молекулами азота, кислорода и частицами М нейтральной среды:

$$O^- + N_2 \rightarrow e + N_2 O, \tag{11}$$

$$O^- + M \to e + O + M, \tag{12}$$

$$O_2^- + M \to O_2 + M + e, \tag{13}$$

$$O_3^- + O_2 \to e + O_3 + O_2.$$
 (14)

При этом баланс положительно заряженных частиц на начальной стадии существования фоновой плазмы определяется реакциями электронионной и ион-ионной рекомбинации, т.е.

$$e + O_2^+ \to O_2, \tag{15}$$

$$e + N_2^+ \to N_2, \tag{16}$$

$$O_2^- + O_2^+ \to O_2 + O_2,$$
 (17)

$$O_2^- + N_2^+ \to O_2 + N_2,$$
 (18)

$$O_2^- + O_2^+ + M \to O_2 + O_2 + M,$$
 (19)

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

$$O_2^- + N_2^+ + M \to O_2 + N_2 + M.$$
 (20)

Нас не интересует здесь сорт положительных ионов, поскольку процессы ионизации и переза-

рядки далее приводят к образованию ионов  $O_2^+$ . Как следует из детального расчета, проведенного в [24], этот сорт ионов остается неизменным на небольших временах, меньших по сравнению с

Реакции (9)–(12) и (14) протекают эффективно, когда активным является диссоциативное прилипание электронов к молекулам кислорода с

образованием O<sup>-</sup> (см. (7)), т.е. на стадии, близкой к лавинной ионизации. В этом случае именно реакция (13) является одним из источников электронов на фоновой стадии, так как температура электронов близка к комнатной.

#### 4. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ТЕОРИИ

Система уравнений баланса для электронов, положительно и отрицательно заряженных молекулярных ионов кислорода в процессах (2)-(5), (8), (13), (15)-(20) имеет вид

$$\frac{dn_e}{dt} = (k_2 + k_4)n_e n_{O_2} + (k_3 + k_5)n_e n_{N_2} - k_8 n_e n_{O_2}^2 + k_{13}n_{O_2} n_M - k_{15}n_e n_{O_2}^2 - k_{16}n_e n_{N_2}^2,$$
(21)

$$\frac{dn_{O_2^-}}{dt} = k_8 n_e n_{O_2}^2 - k_{13} n_{O_2^-} n_M - k_{17} n_{O_2^-} n_{O_2^+} - k_{18} n_{O_2^-} n_{N_2^+} \overline{(22)} - k_{19} n_{O_2^-} n_{O_2^+} n_M - k_{20} n_{O_2^-} n_{N_2^+} n_M,$$

$$\frac{dn_{O_2^+}}{dt} = (k_2 + k_4)n_e n_{O_2} - k_{15}n_e n_{O_2^+} - k_{17}n_{O_2^-}n_{O_2^+} - k_{19}n_{O_2^-}n_{O_2^+}n_M,$$
(23)

$$\frac{dn_{N_2^+}}{dt} = (k_3 + k_5)n_e n_{N_2} - k_{16}n_e n_{N_2^+} - k_{18}n_{O_2^-}n_{N_2^+} - k_{20}n_{O_2^-}n_{N_2^+}n_M.$$
(24)

Здесь  $n_e$  — концентрация свободных электронов,  $n_{O_2}$  и  $n_M$  — концентрации молекулярного кислорода и нейтральных частиц среды,  $n_{N_2^+}, n_{O_2^+}, n_{O_2^-}$  — соответствующие концентрации положительных и отрицательных молекулярных ионов азота и кислорода,  $k_i$  (i = 2-5, 8, 13, 15-20) — константы скорости реакций (2)—(5), (8), (13), (15)—(20).

Заметим, что, согласно данным из работы [23], в тропосфере выполняется неравенство

$$\frac{\alpha_{ii}}{\alpha_{ei}} \gg 1, \tag{25}$$

где коэффициенты ион-ионной,  $\alpha_{ii}$ , и электронионной,  $\alpha_{ei}$ , рекомбинации определяются как

$$\alpha_{ii} = \left(k_{17}n_{O_2^+} + k_{18}n_{N_2^+} + k_{19}n_{O_2^+}n_{M} + k_{20}n_{N_2^+}n_{M}\right) / \left(n_{O_2^+} + n_{N_2^+}\right),$$
(26)

$$\alpha_{ei} = \left(k_{15}n_{O_2^+} + k_{16}n_{N_2^+}\right) / \left(n_{O_2^+} + n_{N_2^+}\right).$$
(27)

Будем считать, что на начальной стадии процесса концентрации положительных молекулярных ионов  $X_2^+$  и отрицательных ионов кислорода  $O_2^-$  близки, т.е.  $n_{X_2^+} \approx n_{O_2^-}$ . При нормальном атмосферном давлении, когда прилипание электронов происходит достаточно быстро по сравнению с электрон-ионной рекомбинацией, скорость реакции (8) много больше скорости реакций (15) и (16), т.е. частота процесса (8)

$$v_{tr} = k_8 n_{O_2}^2 \gg \alpha_{ei} n_{O_2^+}^{+}.$$
 (28)

В этом случае реакции перезарядки (17), (18) протекают по парному, а (19), (20) — по тройному механизмам и коэффициент ион-ионной рекомбинации можно представить в виде [25]:

где

$$\alpha_{ii} = \alpha_{ii}^{(2)} + \alpha_{ii}^{(3)} n_{\rm M}(h), \qquad (29)$$

$$\alpha_{ii}^{(2)} = 2 \cdot 10^{-7} \left(\frac{300}{T(h)}\right)^{1/2} \frac{\mathrm{cM}^3}{\mathrm{c}};$$

$$\alpha_{ii}^{(3)} = 2 \cdot 10^{-25} \left(\frac{300}{T(h)}\right)^{5/2} \frac{\mathrm{cM}^6}{\mathrm{c}},$$
(30)

где T(h) — температура газовой среды, выраженная в Кельвинах; h — высота над поверхностью Земли, которая определяет концентрацию нейтральных компонент среды,  $n_{\rm M}(h)$ .

В стационарных фоновых условиях (концентрации положительных и отрицательных ионов не меняются) для скорости ионизации *Q* нейтральных молекул космическими лучами выполняется соотношение

$$Q = (k_2 + k_4)n_e n_{O_2} + (k_3 + k_5)n_e n_{N_2} \approx k_{17}n_{O_2} n_{O_2^+} + k_{18}n_{O_2} n_{N_2^+} + k_{19}n_{O_2} n_{O_2^+} n_{M} + k_{20}n_{O_2} n_{N_2^+} n_{M} \approx \alpha_{ii}n_{O_2} n_{X_2^+}.$$
(31)

С учетом квазинейтральности плазмы тропосферы, когда  $n_{X_2^+} \approx n_{O_2^-}$ , для концентрации ионов  $O_2^-$  имеем

$$n_{\mathrm{O}_{2}^{-}} = \left(\frac{Q}{\alpha_{ii}}\right)^{1/2}.$$
 (32)

Если считать, что давление вблизи поверхности Земли является атмосферным, то величина  $Q = 4.0 \text{ см}^{-3} \cdot \text{c}^{-1}$  [23], а коэффициент ион-ионной рекомбинации  $\alpha_{ii} \approx 2.0 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3/\text{c}$  [25]. Используя далее выражение (32), для концентрации отрицательных молекулярных ионов кислорода получим величину  $n_{O_2^-} \approx 1.4 \cdot 10^3$  см<sup>-3</sup>, которая хорошо согласуется с экспериментальными данными [26] и результатами расчетов [27, 28].

В стационарном случае концентрация электронов определяется при подстановке в уравнение (21) величины концентрации отрицательных молекулярных ионов кислорода, полученной по формуле (32), т.е.

$$n_e = \frac{Q + k_{13} n_{O_2}^{-} n_{\rm M}}{k_8 n_{O_2}^2} = \frac{Q + k_{13} n_{O_2^{-}} n_{\rm M}}{v_{tr}}.$$
 (33)

Используя для  $k_{13}$  в (33) температурную зависимость из работы [25], т.е.

$$k_{13} = 2.7 \cdot 10^{-10} \left(\frac{T}{300}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{5590}{T}\right),$$
 (34)

при T = 300 К для фоновой концентрации электронов на уровне Земли получим  $n_e \approx 1 \text{ см}^{-3}$ , что на несколько порядков меньше величины  $n_{O_2^-} \approx 1.4 \cdot 10^3 \text{ см}^{-3}$ . Это означает, что практически все свободные электроны в тропосфере участвуют в реакции (8) образования отрицательных молекулярных ионов кислорода.

# 5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИОНИЗАЦИИ

Для расчета концентраций ионов была использована кинетическая схема, включающая 34 компонента и 102 реакции. В табл. 1 представлены основные реакции, протекающие в тропосфере, и даны температурные зависимости соответствующих констант скорости процессов, взятые из работы [29]. Расчет проводился с использованием программного пакета KINET [24], в котором реализован алгоритм решения кинетических уравнений для компонентов ионизованной плазмы с учетом альтитудной зависимости их концентраций и температуры.

Альтитудные зависимости концентраций молекулярных ионов на высотах от 5 до 35 км определялись в результате решения системы уравнений баланса, в которой использовались приведенные в табл. 2 значения скорости ионизации воздуха космическими лучами [1] при различных значениях магнитной жесткости. Для аналогичного расчета концентраций ионов в приземном слое (от 0 до 5 км). где основную роль играет ионизация, вызванная ү-излучением, использовались физические параметры тропосферы в различных точках географической локации (см. табл. 3). Отметим, что в использованной модели практически не учитываются процессы с участием положительных молекулярных ионов азота, поскольку достаточно быстро протекает реакция

Таблица 1. Температурные зависимости констант скорости к учитываемых реакций

Реакция	Константа скорости
$\overline{O_2^- + O_4^+ + M \to O_2 + O_2 + O_2 + M}$	2 · 10 <sup>-25</sup> (300/ <i>T</i> ) <sup>2.5</sup> , см <sup>6</sup> /с
$O_2^+ + O_2 + O_2 \rightarrow O_4^+ + O_2$	2.4 · 10 <sup>-30</sup> (300/ <i>T</i> ) <sup>3.2</sup> , см <sup>6</sup> /с
$O^+ + N_2 \rightarrow NO^+ + N$	$3.0 \cdot 10^{-12} \exp(-0.00311T), \text{ cm}^3/\text{c}$
$e^- + O_2 + O_2 \rightarrow O_2^- + O_2$	$1.4 \cdot 10^{-29} (300/T) \exp(-600/T)$ , cm <sup>6</sup> /c
$e + O_2^+ \rightarrow O + O$	$2 \cdot 10^{-7} (300/T)$ , cm <sup>3</sup> /c
$e + NO^+ \rightarrow N + O$	4 · 10 <sup>-7</sup> (300/ <i>T</i> ) <sup>1.5</sup> , см <sup>3</sup> /с
$e + NO_2^+ \rightarrow NO + O$	2 · 10 <sup>-7</sup> (300/ <i>T</i> ) <sup>0.5</sup> , см <sup>3</sup> /с
$O^- + NO^+ \rightarrow NO + O$	$5 \cdot 10^{-7} (300/T)$ , cm <sup>3</sup> /c
$O^- + NO^+ + M \rightarrow NO + O + M$	1 · 10 <sup>-25</sup> (300/ <i>T</i> ) <sup>2.5</sup> , см <sup>6</sup> /с
$\mathrm{O}_2^- + \mathrm{O}_2^+ \rightarrow \mathrm{O}_2 + \mathrm{O}_2$	3.2 · 10 <sup>-7</sup> (300/ <i>T</i> ), см <sup>3</sup> /с
$O_2^- + NO^+ \rightarrow NO + O_2$	3 · 10 <sup>-7</sup> (300/ <i>T</i> ), см <sup>3</sup> /с
$O_2^- + O_2^+ + M \rightarrow O_2 + O_2 + M$	$3 \cdot 10^{-25} (300/T)^{2.5}$ , cm <sup>6</sup> /c
$O_2^- + O_2^+ \rightarrow O_2 + O + O$	1 · 10 <sup>-7</sup> (300/ <i>T</i> ), см <sup>3</sup> /с
$O_3^- + NO^+ \rightarrow O_3 + NO$	3 · 10 <sup>-7</sup> (300/ <i>T</i> ), см <sup>3</sup> /с
$O_3^- + NO^+ + M \rightarrow O_3 + NO + M$	1 · 10 <sup>-25</sup> (300/ <i>T</i> ) <sup>2.5</sup> , см <sup>6</sup> /с
$O_3^- + O_2^+ + M \rightarrow O_3 + O_2 + M$	1 · 10 <sup>-25</sup> (300/ <i>T</i> ) <sup>2.5</sup> , см <sup>6</sup> /с
$O_3^- + O_2^+ + M \rightarrow O_3 + O + O + M$	1 · 10 <sup>-25</sup> (300/ <i>T</i> ) <sup>2.5</sup> , см <sup>6</sup> /с
$\mathrm{O^-} + \mathrm{O^+} \to \mathrm{O} + \mathrm{O}$	9.3 · 10 <sup>-8</sup> (300/ <i>T</i> ), см <sup>3</sup> /с

Примечание: М – нейтральная частица.

перезарядки (6). При этом на уровне Земли характерное время перезарядки составляет 3 · 10<sup>-10</sup> с.

#### 6. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Все расчетные данные, представленные в данном разделе, получены с помощью программного пакета KINET и использованием кинетической схемы, описанной в разд. 5. На рис. 4 представлены времен-

*Таблица 2.* Альтитудная зависимость скорости ионизации Q (см<sup>-3</sup> · c<sup>-1</sup>) воздуха космическими лучами при различных значениях магнитной жесткости ξ (Тл · м)  $\xi_1 = 0.6 \cdot 10^9 | \xi_2 = 2.5 \cdot 10^9 | \xi_3 = 6 \cdot 10^9 | \xi_4 = 13.5 \cdot 10^9$ *h*, км 5 12.5 10.0 12.5 6.0 32.5 22.5 10 30.0 15.0 35.0 33.0 22.5 10.0 15 20 22.0 20.0 10.0 5.0 12.5 7.5 2.5 25 5.0 30 8.0 5.0 2.0 1.5 35 4.0 3.0 1.0 1.0

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

ные зависимости концентраций основных ионов,

 $O_{2}^{-}, O_{2}^{+}$  и  $O_{4}^{+}$  в тропосфере, соответствующие величине магнитной жесткости  $\xi = = 0.6 \cdot 10^9 \,\text{Tr} \cdot \text{м}$ . Выбор указанных ионов и соответствующих кривых обусловлен тем, что концентрации других ионов в тропосфере пренебрежимо малы. Их суммарный вклад в общую концентрацию заряженных частиц не превышает 1%. Из рис. 4 видно, что безусловным лидером является ион  $O_2^-$ , что также соответствует расчетам, проведенным в работах [27, 28]. Отличие наших данных от данных, полученных в работе [27], заключается в том, что последние отвечают уровню аварийного выброса из вентиляционной трубы атомной электростанции, т.е. соответствуют величине  $Q \sim 10^8 \, \text{см}^{-3} \cdot \text{c}^{-1}$ . Расчеты же в [28] проводились для нормальных условий, но для высот нижней ионосферы (90-110 км). Поэтому сравнивать здесь абсолютные величины концентрации  $n_{0^{-}}$  смысла не имеет. Отметим также, что на временах порядка  $10^{-7} - 10^{-6}$  с происходит интенсивная конверсия иона  $O_2^+$  в ион  $O_4^+$ . Вследствие этого концентрация иона  $O_2^+$ , которая на

Локация	Высота над уровнем моря, км	Q, см <sup>-3</sup> · с <sup>-1</sup>		<i>Q</i> , см <sup>-3</sup> · с <sup>-1</sup> Концентрация нейтральных частиц, 10 <sup>19</sup> см <sup>-3</sup>	
Восточно-Китайское море,	0	1.9	[30]	2.70	19.5
бухты вблизи Японии					
Мауна-Лоа, Гавайские острова	4.200	5.0 [	[31]	1.63	20.0
Слуцк, Белоруссия	0.150	8.5 [	[32]	2.60	6.8
Воейково, Россия	0.072	15.0 [	[33]	2.70	7.2
Нагойя, Япония	0.017	14.0 [	[34]	2.70	19.5
Норикура, Япония	2.300	15.0 [	[34]	2.00	19.5
Вашингтон, США	0.011	16.0 [	[34]	2.70	13.7
Хуанкайо, Перу	3.300	40.0 [	[32, 35]	1.80	12.0

Таблица 3. Физические параметры тропосферы в различных точках географической локации

временах до  $3 \cdot 10^{-7}$  с растет наиболее быстро, в итоге оказывается меньше концентраций ионов

 $O_4^+$  и  $O_2^-$ . Это соотношение будет справедливо на высотах до 30 км.

Альтитудные зависимости концентраций ионов  $O_2^-$ ,  $O_2^+$  и  $O_4^+$  приведены в табл. 4. Расчеты проведены для величины магнитной жесткости  $\xi = 0.6 \cdot 10^9$  Тл · м, что соответствует полярным областям магнитного поля Земли. Данные отвечают моменту времени t = 300 с, когда концентрации основных ионов достигли стационарных значений. Заметим, что в этих условиях максимальные значения концентраций ионов  $O_2^-$  и  $O_4^+$  в тропосфере практически совпадают ( $n_{O_2^-} \approx n_{O_4^+} \approx 4 \cdot 10^3$  см<sup>-3</sup>), тогда как величина  $n_{O_2^+}$  почти на порядок меньше. Сами мак-

симумы концентраций располагаются на высотах 30, 20 и 15 км для ионов  $O_2^+$ ,  $O_2^-$  и  $O_4^+$  соответственно.

На рис. 5 изображены альтитудные зависимости концентраций основных тропосферных

ионов  $O_2^-$ ,  $O_2^+$  и  $O_4^+$ , рассчитанные при различных значениях магнитной жесткости  $\xi$ . Это отвечает разным точкам географической локации: малые значения  $\xi$  соответствуют полярным областям, а большие – экваториальным. Видно, что характер поведения кривых слабо изменяется в зависимости от величины  $\xi$ . Так, зависимости стационар-

ных значений концентраций ионов  $O_2^-$  и  $O_4^+$  практически совпадают на высотах от 0 до 20 км. На бо́льших высотах наблюдаются быстрый спад концентраций ионов  $O_4^+$  и рост концентрации  $O_2^+$ .



**Рис. 4.** Временна́я зависимость концентраций ионов в тропосфере:  $n_{O_4^+}$  – сплошная линия,  $n_{O_2^+}$  – штриховая,  $n_{O_2^-}$  – штриховая

ионов $O_2, O_4, O_2$ , рассчитанные при $\zeta = 0.0 \cdot 10^{\circ}$ ГЛ · м					
Высота, км	<i>T</i> , K	$Q^*,$ см <sup>-3</sup> · с <sup>-1</sup>	$n_{\rm O_2^-}, {\rm cm}^{-3}$	$n_{O_4^+}, \mathrm{cm}^{-3}$	$n_{O_2^+}, \text{cm}^{-3}$
0	298	4.0	$7.59 \cdot 10^{2}$	$7.50 \cdot 10^{2}$	$9.40 \cdot 10^{0}$
5	260	12.5	$1.64 \cdot 10^3$	$1.62 \cdot 10^3$	$2.27 \cdot 10^1$
10	223	32.5	$2.97 \cdot 10^{3}$	$2.93\cdot 10^3$	$4.47 \cdot 10^{1}$
15	215	35.0	$4.22 \cdot 10^3$	$4.12 \cdot 10^{3}$	$1.19 \cdot 10^2$
20	215	22.0	$4.27 \cdot 10^{3}$	$4.06 \cdot 10^{3}$	$2.55 \cdot 10^{2}$
25	223	12.5	$3.18 \cdot 10^3$	$2.80 \cdot 10^3$	$4.42 \cdot 10^2$
30	230	8.0	$2.16 \cdot 10^{3}$	$1.63 \cdot 10^{3}$	$6.18 \cdot 10^{2}$
35	240	4.0	$1.06 \cdot 10^{3}$	$5.95 \cdot 10^2$	$5.67 \cdot 10^{2}$

*Таблица 4.* Альтитудные зависимости концентраций ионов  $O_2^-, O_4^+, O_2^+,$  рассчитанные при  $\xi = 0.6 \cdot 10^9$  Тл · м

\* Для расчета использовались величины скорости ионизации Q, взятые из табл. 2.

На высоте 35 км концентрации ионов  $O_2^+$  и  $O_4^+$  сравниваются, однако их абсолютные величины заметно уменьшаются по мере приближения к экватору. Это связано с тем, что с ростом  $\xi$  падает скорость ионизации Q (см. рис. 2) и, соответственно, концентрация ионов. Сказанное наглядно продемонстрировано на рис. 6, где представлены альтитудные зависимости суммы концентраций положительных ионов  $O_2^+$  и  $O_4^+$  при различных значениях магнитной жесткости.

Данные расчета концентрации ионов  $O_2^-$ ,  $O_2^+$  и  $O_4^+$  в приземном слое (от 0 до 5 км) в различных точках географической локации представлены в табл. 5. Наибольший интерес представляют высокие значения концентраций ионов, полученные на высоте 3300 м в г. Хуанкайо (Перу). Этот эффект объясняется тем, что в данном случае проис-



**Рис. 5.** Альтитудные зависимости концентраций ионов при различных значениях магнитной жесткости  $\xi$ , Тл · м: 0– 0.6 · 10<sup>9</sup> (*a*), 2.4 · 10<sup>9</sup>-2.5 · 10<sup>9</sup> (*b*), 6 · 10<sup>9</sup> (*b*), 13.5 · 10<sup>9</sup> (*c*). Кривые, соответствующие концентрациям различных ионов, обозначены:  $n_{O_4^+}^-$  – сплошная,  $n_{O_2^+}^-$  – штриховая,  $n_{O_2^-}^-$  – штрих-пунктирная.



**Рис. 6.** Альтитудные зависимости суммы концентраций положительных ионов  $O_4^+$  и  $O_2^+$  при различных значениях магнитной жесткости  $\xi$ , Тл · м: сплошная линия  $-0-0.6 \cdot 10^9$ , штрих-пунктирная  $-2.4 \cdot 10^9-2.5 \cdot 10^9$ , штриховая  $-6 \cdot 10^9$ , точечная  $-13.5 \cdot 10^9$ .

ходит ионизация как под действием космических лучей, так и  $\gamma$ -излучения. Высокое значение Q связано с геотектоническими процессами, при которых происходит выброс большого количества радиоактивных частиц [15, 36] в отличие, например, от г. Мауна-Лоа на Гавайских островах (см. табл. 3).

# 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе рассмотрен процесс формирования сложно заряженных грозовых облаков, обладающих слоями положительных и отрицательных ионов и крупных ионных кластеров, появляющихся в тропосфере под действием космических лучей. Для расчета концентраций ионов разработана кинетическая модель, включающая 34 компонента и 102 реакции. Расчет проведен с использованием программного пакета KINET. Показано, что ионизация воздуха космическими лучами на высотах от 5 до 35 км приводит к образованию слабоионизованной плазмы, состоящей в основном из ионов  $O_2^-$ ,  $O_2^+$  и  $O_4^+$ . Максимумы концентраций ионов  $O_2^-$  и  $O_4^+$  наблюдаются на высотах от 15 до 20 км в условиях минимальной магнитной жесткости. Установлено также, что ионизация воздуха, обусловленная естественной радиоактивностью, в приземном слое значительно

слабее ионизации космическими лучами.

Полученные данные о распределении концентрации ионов в тропосфере позволяют реализовать газовые разряды и искусственно стимулировать выпадение осадков без применения дорогостоящих химических реагентов, таких как, например, AgI. С этой целью необходимо поместить направленный источник ионов вблизи облаков или на поверхности Земли под облаками. В результате образованные ионы будут формировать дополнительные центры конденсации, приводящие к выпадению осадков. Данные по ионному составу тропосферы и альтитудному распределению концентраций ионов позволяют правильно оценить высоту, на которой следует установить источник, и определить его мощность для эффективного управления процессом. Кроме того, интерес к рассмотренным в настоящей работе явлениям обусловлен фундаментальными проблемами, связанными с глобальной спутниковой навигацией и дистанционным зондированием поверхности Земли [37].

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Россий-

Высота, км	<i>T</i> , °C	$Q^*, cm^{-3} \cdot c^{-1}$	$n_{O_2^-}, cm^{-3}$	$n_{O_4^+}, cm^{-3}$	$n_{\text{O}_{2}^{+}}, \text{cm}^{-3}$
0	19.5	2.0	$7.57 \cdot 10^{2}$	$7.48 \cdot 10^{2}$	$9.40 \cdot 10^{0}$
4.200	20.0	5.0	$9.24 \cdot 10^{2}$	$9.13 \cdot 10^3$	$1.20 \cdot 10^1$
0.150	6.8	8.5	$1.20 \cdot 10^{3}$	$1.19 \cdot 10^{3}$	$1.50 \cdot 10^1$
0.072	7.2	10.0	$1.32 \cdot 10^{3}$	$1.30 \cdot 10^{3}$	$1.63 \cdot 10^1$
0.017	19.5	14.0	$1.58 \cdot 10^{3}$	$1.56 \cdot 10^{3}$	$2.00 \cdot 10^1$
2.300	19.5	15.0	$1.85 \cdot 10^{3}$	$1.88 \cdot 10^{3}$	$3.10 \cdot 10^1$
0.011	13.7	16.0	$1.70 \cdot 10^{3}$	$1.68 \cdot 10^{3}$	$2.10 \cdot 10^1$
3.300	12.0	40.0	$2.78 \cdot 10^{3}$	$2.75 \cdot 10^{3}$	$3.27 \cdot 10^1$

*Таблица 5.* Рассчитанные значения концентраций ионов O<sub>2</sub>, O<sub>4</sub><sup>+</sup>, O<sub>2</sub><sup>+</sup> в приземном слое (от 0 до 5 км) на различных высотах

\* Для расчета использовались величины скорости ионизации Q, взятые из табл. 3.

36
ской Федерации (регистрационный номер темы 122040500060-4).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Смирнов Б.М. Физика глобальной атмосферы. Парниковый эффект, атмосферное электричество, эволюция климата. Долгопрудный: ИД "Интеллект", 2017.
- 2. *Хромов С.П., Мамонтова Л.И*. Метеорологический словарь. Л.: Гидрометеоиздат, 1974.
- Blankson I.M., Foster J.E. // 11-th International Conference on Plasma Assisted Technologies (ICPAT-11). Abu Dhabi: New York University Abu Dhabi, 2018. P. 15.
- Голубков Г.В., Голубков М.Г., Карпов И.В. и др. // Хим. физика. 2011. Т. 30. № 5. С. 3; https://doi.org/10.7868/S0207401X1510012X
- Saha K. The Earth's atmosphere: Its physics and dynamics. Berlin: Springer, 2008; https://doi.org/10.1007/978-3-540-78427-2
- 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
- Borchevkina O.P., Adamson S.O., Dyakov Y.A. et al. // Atmosphere. 2021. V. 12. № 9. 1116; https://doi.org/10.3390/atmos12091116
- 8. *Мохов И.И.* Диагностика структуры климатической системы. СПб: Гидрометеоиздат, 1993.
- 9. *Мазуров Г.И., Акселевич В.И., Иошпа А.Р.* Учение об атмосфере. Ростов-на-Дону, Таганрог: Из-во ЮФУ, 2019.
- 10. Borchevkina O.P., Kurdyaeva Y.A., Dyakov Y.A. et al. // Atmosphere. 2021. V. 12. № 11. 1384; https://doi.org/10.3390/atmos12111384
- Zurbenko I., Luo M. // Am. J. Clim. Chang. 2012. V. 1. № 3. P. 154; https://doi.org/10.4236/ajcc.2012.13013
- Dunn R.J.H., Aldred F., Gobron N. et al. // Bull. Am. Meteorol. Soc. 2021. V. 102. № 8. P. S11; https://doi.org/10.1175/BAMS-D-21-0098.1
- Андреев А.О., Дукальская М.В., Головина Е.Г. Облака: происхождение, классификация, распознавание / Под ред. А.И. Угрюмова. СПб: Из-во РГГМУ, 2007.
- 14. Переведенцев Ю.П., Мохов И.И., Елисеев А.В. Теория общей циркуляции атмосферы / Под ред. Э.П. Наумова. Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2013.
- Брикар Д. // Проблемы электричества атмосферы. Тр. III Междунар. конф. по электричеству атмосферы и космического пространства / Под ред. Я.М. Шварца. Л.: Гидрометеоиздат, 1969. С. 68.
- Cooke D.J., Humble J.E., Shea M.A. et al. // Il Nuov. Cim. C. 1991. V. 14. № 3. P. 213; https://doi.org/10.1007/BF02509357
- Simpson J.A. // Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 1983. V. 33. № 1. P. 323; https://doi.org/10.1146/annurev.ns.33.120183.001543

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

- Neher H.V. // J. Geophys. Res. 1971. V. 76. № 7. P. 1637; https://doi.org/10.1029/JA076i007p01637
- Голубков М.Г., Суворова А.В., Дмитриев А.В. и др. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 10. С. 69; https://doi.org/10.31857/S0207401X20100064
- Голубков М.Г., Дмитриев А.В., Суворова А.В. и др. // Хим физика. 2022. Т. 41. № 5. С. 84; https://doi.org/10.31857/S0207401X22050065
- 21. Dmitriev A.V., Suvorova A.V., Ghosh S. et al. // Atmosphere. 2022. V. 13. № 2. 322; https://doi.org/10.3390/atmos13020322
- Голубков Г.В., Бычков В.Л., Арделян Н.В. и др. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 7. С. 23; https://doi.org/10.1134/S0207401X19070045
- 23. Ardelyan N., Bychkov V., Belousov A. et al. // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 927. № 1. 012012; https://doi.org/10.1088/1742-6596/927/1/012012
- Практикум по физической химии. Кинетика и катализ. Электрохимия / Под ред. Лунина В.В., Агеева Е.П. М.: Издат. центр "Академия", 2012.
- Kossyi I.A., Kostinsky A.Y., Matveyev A.A. et al. // Plasma Sourc. Sci. Techn. 1992. V. 1. № 3. P. 207; https://doi.org/10.1088/0963-0252/1/3/011
- Ивлев Л.С., Довгалюк Ю.А. Физика атмосферных аэрозольных систем. СПб: НИИХ СПбГУ, 1999.
- 27. Боярчук К.А. // ЖТФ. 1999. Т. 69. № 3. С. 2.
- Арделян Н.В., Бычков В.Л., Голубков Г.В. и др. // Хим. физика. 2018. Т. 37. № 1. С. 91; https://doi.org/10.7868/S0207401X18010028
- Физика и химия газовых разрядов в пучках СВЧволн. Труды Института общей физики. Т. 47 / Под. ред. Коврижных Л.М. М.: Наука, 1994.
- Shimo M., Ikebe Y., Nakayama T. et al. // Pure Appl. Geophys. 1972. V. 100. № 1. P. 109; https://doi.org/10.1007/BF00880232
- Cobb W.E. // J. Atmos. Sci. 1968. V. 25. № 3. P. 470; https://doi.org/10.1175/1520-0469(1968)025<0470: TAECAM>2.0.CO;2
- 32. *Тверской П.Н.* Атмосферное электричество. Л.: Гидрометеоиздат, 1949.
- 33. *Куповых Г.В.* // Изв. вузов. Сев.-Кавк. рег. Естеств. науки. 2004. № 1. С. 40.
- 34. Ikebe Y, Kawano M. // Pure Appl. Geophys. 1971. V. 83. № 1. C. 120; https://doi.org/10.1007/BF00875105
- Юнге Х.Е. Химический состав и радиоактивность атмосферы / Пер. с англ. / Под. ред. Израэля Ю.А. М.: Мир, 1965.
- 36. Голубков Г.В., Бычков В.Л., Готовцев В.О. и др. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 4. С. 51; https://doi.org/10.31857/S0207401X2004007X
- Голубков Г.В., Манжелий М.И., Берлин А.А. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 3. С. 86; https://doi.org/10.31857/S0207401X21030055

## —— ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА АТМОСФЕРНЫХ ЯВЛЕНИЙ ——

УДК 550.348

# ИСКУССТВЕННАЯ ИНЖЕКЦИЯ ЭНЕРГИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ РАДИАЦИОННОГО ПОЯСА ЗЕМЛИ – НОВЫЙ КАНАЛ МОДИФИКАЦИИ ИОНИЗИРОВАННОЙ И НЕЙТРАЛЬНОЙ КОМПОНЕНТ АТМОСФЕРЫ

© 2022 г. В. Л. Фролов<sup>1, 2\*</sup>, Ю. Ю. Куликов<sup>3</sup>, А. В. Троицкий<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия <sup>2</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия <sup>3</sup>Институт прикладной физики Российской академии наук, Нижний Новгород, Россия \*E-mail: frolov@nirfi.unn.ru Поступила в редакцию 18.02.2022;

оступила в редакцию 18.02.202 после доработки 19.05.2022; принята в печать 20.05.2022

Приведены результаты исследований характеристик искусственной инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли в ионосферу при ее нагреве мощными радиоволнами коротковолнового диапазона. Эксперименты выполнялись на среднеширотном нагревном стенде СУРА. Показано, что такая инжекция обладает высокой энергетикой и может рассматриваться как новый канал модификации нейтральной и ионизированной компонент атмосферы Земли. Анализируются полученные экспериментальные данные по воздействию энергичных электронов на генерацию микроволнового излучения на ионосферных высотах и на содержание озона на высотах мезосферы. Приводится интерпретация наблюдаемых при этом явлений и возможного их влияния на свойства приземного слоя атмосферы.

*Ключевые слова:* модификация ионосферы, мощные радиоволны, искусственная ионосферная турбулентность, инжекция энергичных электронов, атмосфера Земли, микроволновое излучение, озонометрия.

DOI: 10.31857/S0207401X22100053

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение особенностей взаимодействия мощного радиоизлучения с ионосферой Земли относится к числу наиболее активно разрабатываемых в последние десятилетия задач физики плазмы и солнечно-земных связей. Принципиальным моментом здесь является то, что взаимодействие интенсивного радиоизлучения с плазмой сопровождается развитием целого ряда фундаментальных нелинейных явлений, таких как: параметрические неустойчивости плазмы и возбуждение сильной плазменной турбулентности, генерация искусственных ионосферных неоднородностей с размерами поперек линий геомагнитного поля от долей метра до десятков километров, модификация профиля плотности плазмы под действием сил светового и теплового давления, ускорение электронов до сверхтепловых энергий, генерация вторичного электромагнитного излучения в областях с сильно развитой искусственной ионосферной турбулентностью (ИИТ), возбуждение электрических полей и токов в плазме и других (см., например, [1-6] и цитируемую в них многочисленную литературу).

Несмотря на достигнутые большие успехи, изучение природы и свойств этих явлений по ряду направлений еще нельзя считать полностью завершенным. Особенно это касается изучения механизмов генерации ИИТ далеко за пределами области интенсивного взаимодействия пучка мощных радиоволн с плазмой. Существенно, что мощности работающих сегодня в мире радиостанций различного назначения достаточны, чтобы вызывать заметные изменения характеристик ионосферы. Это означает, что ионосфера в настоящее время, фактически, постоянно находится в возбужденном состоянии, и это необходимо принимать во внимание при рассмотрении существа протекающих в ней процессов. Результаты активных экспериментов в ионосферной плазме также важны для изучения механизмов возможного взаимодействия между ионосферой и магнитосферой, имея целью разработку способов модификации состояния последней (см., например, [7, 8]).

Все перечисленное выше имеет прямое отношение к одной из актуальных задач настоящего времени — освоению околоземного космического пространства.

Ионосфера Земли (см., например, хорошо известные монографии [9–12]) представляет собой слабо ионизированный плазменный слой, который обнаруживается на высотах от 50–60 км до ~1000 км. В дневной ионосфере на высотах 50–90 км расположен D-слой – очень слабо ионизированная область ионосферы с высокой частотой соударений заряженных частиц с нейтральными атомами и молекулами, благодаря чему плазма в нем остается незамагниченной. Здесь степень ионизации атмосферы не превышает значения  $N_e/N_n \approx 10^{-10}$ . Этот слой хорошо обнаруживается только в освещенной Солнцем ионосфере, в ночных условиях плотность плазмы в нем намного меньше.

Выше D-слоя на высотах 90–130 км расположен E-слой ионосферы, в котором электроны уже замагничены при еще незамагниченных ионах; степень ионизации в нем достигает значения  $N_e/N_n \approx 3 \cdot 10^{-8}$ . На средних широтах E-слой наиболее развит в дневных условиях. Иногда (в основном в летние месяцы) на этих высотах регистрируется появление узкого по высоте спорадического E-слоя ( $E_s$ ), концентрация плазмы в котором может значительно превышать концентрацию в обычном E-слое.

Максимальное значение концентрации плазмы в ионосфере достигается в F2-слое на высоте 200-300 км; оно сильно изменяется в зависимости от сезона, времени суток, широты, уровня солнечной активности и др. Степень ионизации в F2-слое составляет  $N_e/N_n \approx 10^{-3}$ . Этот слой существует как в дневных, так и в ночных условиях и занимает интервал высот 180-400 км. В нем замагниченными оказываются и электроны, и ионы. В такой замагниченной плазме может существовать большое количество разнообразных волн: ленгмюровские, верхнегибридные, бернштейновские высокочастотные плазменные, ионно-звуковые, магнитогидродинамические и другие типы низкочастотных волн. Выше максимума F2-слоя плотность плазмы уменьшается с ростом высоты приблизительно по экспоненциальному закону, а степень ее ионизации увеличивается. Существующее многообразие физических условий, реализуемых в ионосфере Земли, позволяет рассматривать ионосферную плазму как естественную плазменную лабораторию, в которой удобно проводить различные эксперименты по изучению взаимодействия волн и частиц, моделированию динамических процессов в космической плазме [13–16]. Важным преимуществом ионосферы по сравнению с лабораторными плазменными установками является отсутствие в ней стенок, ограничивающих объем плазмы и сильно влияющих на происходящие в плазме процессы, а также высокая степень однородности плазмы. Для большого класса задач ионосферную плазму можно считать практически безграничной.

Физические эксперименты в ионосфере удобно проводить путем создания в ней ИИТ, например с помощью воздействия на нее мощными радиоволнами. При этом исследования выполняются с управляемыми источниками возмущений, которые создаются в ионосфере с известной интенсивностью, в течение заданного интервала времени, на выбранных высотах ионосферы, в известных геофизических условиях и для диагностики которых используются хорошо развитые различные радиофизические методы ее зондирования с размещением измерительных приборов как на поверхности земли, так и на борту космических аппаратов. Это позволяет, как правило, достаточно полно изучить основные свойства наблюдаемых явлений, включая динамику развития и релаксации различного рода плазменных возмущений. Важным обстоятельством является то, что создаваемые при модификации ионосферы мощными радиоволнами плазменные возмущения быстро релаксируют (за время, не большее 30 мин, для подавляющего большинства возмущений) и не вносят каких-либо загрязнений в окружающую среду.

#### Характеристики стенда СУРА

Уже в первых экспериментах по модификации ионосферы, начатых в 1961 г. на стенде НИИ Радио (Москва, СССР) [17] и продолженных в 1970 г. на стендах "Боулдер" (Колорадо, США) [18, 19] и "Аресибо" (Пуэрот-Рико, США) [2] и в 1973 г. на стенде "Зимёнки" (Горький, СССР) [20], помимо ожидаемых изменений температуры и концентрации плазмы в масштабе диаграммы направленности излучения пучка мощных радиоволн, был обнаружен ряд новых явлений, связанных, в первую очередь, с генерацией искусственных высокочастотных плазменных колебаний и искусственных ионосферных неоднородностей (ИИН) различных масштабов. Выполненные широкомасштабные исследования характеристик и свойств ИИТ, возбуждаемой в ионосфере при воздействии на нее мощными радиоволнами коротковолнового (КВ) диапазона, позволили установить, что, помимо ожидаемых омического нагрева плазмы и самофокусировочной неустойчивости мошной радиоволны, в областях плазменных резонансов вблизи уровня отражения волны накачки (ВН) обыкновенной поляризации развиваются стрикционная и тепловая (резонансная) параметрические неустойчивости. Это приводит к возбуждению интенсивных высокочастотных плазменных колебаний, сильному разогреву в этой резонансной области электронов и генерации ИНН концентрации плазмы с размерами  $l_{\perp}$  поперек линий геомагнитного поля от долей метра до десятков метров, которые оказывают существенное влияние на свойства распространяющихся через возмущенную область (ВО) ионосферы радиоволн различных диапазонов [1, 2, 4, 17–20].

В 1981 г. вступили в строй стенд EISCAT-heater (Северная Норвегия) в авроральных широтах и стенд СУРА (Н. Новгород, Россия) в средних широтах; с конца 90-х годов начались эксперименты на высокоширотном стенде HAARP (Аляска, США). Описание этих стендов приведено в обзоре [6]. В проводимых на этих стендах экспериментах, в частности, было показано, что при модификации ночной F2-области ионосферы мощными радиоволнами в центральной части возмущенной области (ВО, ) ионосферы в области магнитного зенита наблюдаются разогрев электронов плазмы в 2-3 раза (до 3000 К) и формирование полости с уменьшенной на ~20% концентрацией плазмы (фокусирующей линзы) [6, 13]. Выталкивание плазмы вверх вдоль силовых линий геомагнитного поля является причиной формирования на высотах внешней ионосферы дакта (крупномасштабной неоднородности) с увеличенной плотностью плазмы [21, 22]. Перераспределение плазмы при ее разогреве мощными радиоволнами приводит к возбуждению электрических токов, втекающих в центральной части ВО ионосферы и вытекающих по ее периферии [23, 24]. Такая картина отвечает униполярной диффузии электронов и ионов, когда электроны движутся вдоль силовых линий геомагнитного поля, формируя продольные компоненты токов, а ионы – поперек, формируя их поперечные компоненты; внизу поперечные токи замыкаются в высокопроводящей Е-области ионосферы, а вверху – по фоновой плазме верхней и внешней ионосферы. В дневных условиях разогрев плазмы на высотах 130-170 км приводит здесь к росту концентрации плазмы и формированию дефокусирующей линзы [1].

В последние годы нагревные эксперименты по модификации ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона активно проводятся на трех стендах: на стенде СУРА в средних широтах, на стенде HAARP (Аляска, США) в высоких широтах в зоне главного ионосферного провала и на стенде "EISCAT-heater" в авроральных широтах. Их характеристики и полученные на них наиболее важные результаты исследований так же приведены в обзоре [6].

Продолжающиеся уже более чем 50 лет целенаправленные исследования в области взаимодействия мощного КВ-радиоизлучения с плазмой, проводимые в России, США и странах Западной Европы, позволили выявить основные закономерности развития ИИТ и построить эмпирические и теоретические модели развития основных ее компонент. Экспериментальные и теоретические исследования показали, что наиболее эффективное ее возбуждение наблюдается при модификации F2-области ионосферы волнами обыкновенной поляризации, когда имеет место их резонансное взаимодействие с магнитоактивной плазмой, характеризующееся возбуждением стрикционной и тепловой (резонансной) параметрических неустойчивостей [1]. Был обнаружен и изучен эффект "магнитного зенита" - эффект усиления генерации ИИТ при распространении мощной радиоволны вдоль силовых линий геомагнитного поля в области ее взаимодействия с плазмой [5, 6, 13]. Полученные здесь результаты, в первую очередь, касаются ВО<sub>11</sub>, положение и размеры которой в горизонтальной плоскости определяются диаграммой направленности излучения мощной радиоволны; на уровне F2-слоя размеры ВО, ионосферы в зависимости от частоты и мощности излучения ВН составляют 50-100 км. Размер ВО<sub>и</sub> по вертикали (правильнее – вдоль геомагнитного поля) при модификации F2-области составляет от нескольких сот метров до десятков километров в зависимости от типа возбуждаемой турбулентности [5].

Выполненные в последние годы на стенде СУРА эксперименты позволили обнаружить и исследовать эффект искусственной инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли на ионосферные высоты за счет влияния на ионосферно-магнитосферные связи генерации ИИТ при модификации F2-области ионосферы. В разд. 2 работы будут подробно рассмотрены характеристики такой инжекции и ее влияние на свойства ионизированной и нейтральной компонент атмосферы Земли.

Все рассматриваемые в данной работе эксперименты были выполнены на нагревном стенде СУРА в НИРФИ ННГУ им. Н.И. Лобачевского (г. Н. Новгород, Россия). Стенд расположен приблизительно в 100 км к востоку от г. Н. Новгород; его координаты: 56.15° с.ш., 46.1° в.д. (параметр Мак-Илвайна  $L \approx 2.7$ ). Стенд имеет трехмодульную структуру. Каждый модуль состоит из генерирующего ВЧ-мощность до 250 кВт радиопередатчика ПКВ-250, который нагружен на свою антенную решетку, состоящую из 12 × 4 широкополосных скрещенных диполей и вытянутую поперек геомагнитного меридиана. Стенд может излучать волны обыкновенной (О) и необыкновенной (Х) поляризаций в диапазоне частот от 4.3 до 9.5 МГц. Модули стенда могут работать независимо или объединяться в режиме когерентного излучения любыми двумя или всеми тремя модулями вместе. В последнем случае решетка состоит из 144 диполей, занимающих площадь 300 × 300 м<sup>2</sup>. Максимальная эффективная мощность излучения стенда при этом

составляет  $P_{ef} = P_0 G \approx 80 \text{ MBr} (P_0 - \text{максимальная})$ мощность, генерируемая передатчиками стенда; G - коэффициент усиления передающей антенны стенда) на частотах  $f_{\rm BH} \approx 4300$  кГц и ~280 МВт на частотах  $f_{BH} \approx 9300$  кГц, увеличиваясь с ростом частоты ВН. Диаграмма направленности антенны стенда в плоскости магнитного меридиана может отклоняться от вертикали в пределах  $\pm 40^{\circ}$ . Для vвеличения эффективности взаимодействия мощной радиоволны с плазмой за счет эффекта "магнитного зенита" [13] часто используется модификация ионосферы не вертикальным, а наклоненным на 12°-14° от вертикали на юг пучком мощных радиоволн. При таком наклоне координаты центра пятна засвеченной мошными радиоволнами области ионосферы на высоте 250 км составляют  $\phi = 55.7^{\circ}$  с.ш. и  $\lambda = 46^{\circ}$  в.д.; само пятно засветки ионосферы мощными радиоволнами при  $f_{\rm BH} \approx$ ≈ 4300 кГц имеет диаметр ~60 км по уровню 0.5 Р<sub>тах</sub>. Более подробные характеристики стенда приведены в работе [25].

Стенд СУРА является на сегодня единственной в мире действующей установкой, расположенной в средних широтах, где сильные естественные геомагнитные возмущения являются достаточно редким событием. Этим он отличается от стендов EISCAT-heater и HAARP, расположенных на более высоких широтах, в которых сильные естественные возмущения в ионосфере и магнитосфере Земли значительно затрудняют проведение экспериментов и усложняют интерпретацию наблюдаемых явлений. Надо также иметь в виду, что стенд HAARP по своему положению попадает в область главного ионосферного провала со своими специфическими свойствами ионосферы.

## 2. ИСКУССТВЕННАЯ ИНЖЕКЦИЯ ЭНЕРГИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ИЗ РАДИАЦИОННОГО ПОЯСА ЗЕМЛИ В ИОНОСФЕРУ

В настоящем разделе работы представлены результаты выполненных в последние годы на стенде СУРА исследований искусственной инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли в ионосферу. Отметим, что большой цикл исследований по стимулированию такой инжекции был выполнен в США с использованием излучений мощных наземных передатчиков, работаюших в очень низкочастотном (ОНЧ) диапазоне [26-29]. Выполнялись также эксперименты на нагревном стенде HAARP по генерации волн в крайне низкочастотном (КНЧ) и ОНЧ-диапазонах за счет нелинейной демодуляции сигнала ВН [6, 29, 30]. Этот стенд расположен в более северных широтах, чем стенд СУРА, в области главного ионосферного провала, в которой имеет место

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

возбуждение интенсивных естественных ионосферных неоднородностей, что затрудняет обнаружение и изучение вызванных нагревом ионосферы плазменных возмущений и определяет специфику проводимых на нем исследований [31]. Эксперименты по стимуляции высыпаний энергичных электронов неоднократно проводились на стенде EISCAT-heater [32, 33], который расположен на авроральных широтах в области с высоким уровнем естественной плазменной турбулентности, где ионосферно-магнитосферные процессы оказывают сильное влияние на свойства взаимодействия мошной радиоволны с плазмой. Важно, что в экспериментах на стендах EISCAT-heater и НААRР для модификации ионосферы использовались молулированные по амплитуле мошные радиоволны с частотами модуляции, лежащими в КНЧ- и ОНЧ-диапазонах (в интервале частот от нескольких Гц до 30 кГц). В отличие от них все проведенные до сегодняшнего дня на стенде СУ-РА эксперименты по стимулированию инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли на ионосферные высоты выполнялись при модификации ионосферы немодулированными по амплитуде мощными радиоволнами КВ-диапазона, излучаемыми в режиме "несущая".

Выполненные на стенде СУРА исследования позволили установить, что на свойства искусственной инжекции энергичных электронов, стимулированной его работой, сильное влияние оказывают:

 а) характеристики излучения мощной радиоволны — через ее частоту, эффективную мощность и режим излучения;

б) время суток и ионосферные условия проведения измерений — через величину поглощения мощных радиоволн в нижних слоях ионосферы, критическую частоту F2-слоя (*fo*F2), форму его вертикального профиля изменения концентрации, высоту отражения BH, наличие спорадического слоя  $E_s$ ;

в) уровень текущей геомагнитной активности и время, прошедшее после последней суббури – через состояние ионосферной плазмы и насыщенность радиационного пояса энергичными электронами;

г) расстояние орбиты спутника до центра возмущенной магнитной силовой трубки и др.

Совокупное влияние этих причин обуславливает большой разброс результатов проведенных измерений. Нужно также указать, что оптимальными условиями проведения экспериментов, с точки зрения генерации наиболее интенсивной ИИТ, можно считать следующие условия:

1) эксперименты проводятся в поздние вечерние или ночные часы, нагрев ионосферы осуществляется волнами *О*-поляризации; 2) частота ВН не превышает 6 МГц, причем ее величина должна быть на 0.3–0.5 МГц ниже критической частоты F2-слоя ионосферы *fo*F2;

3) высота отражения ВН превышает 200 км;

 измерения проводятся при эффективной мощности излучения ВН не меньше 50 МВт в спокойной или слабовозмущенной ионосфере при низком линейном поглощении радиоволн в ее нижних слоях;

5) используется наклон диаграммы направленности передающей антенны стенда на ~12° на юг, чтобы усилить генерацию ИИТ за счет эффекта "магнитного зенита" [5, 6, 13].

В представленных в работе исследованиях излучение мощной радиоволны начиналось, как правило, приблизительно за 15 мин до пролета спутника через возмущенную магнитную силовую трубку, опирающуюся на ВО, с сильно развитой ИИТ. При благоприятных ионосферных условиях такая длительность нагрева является достаточной для развития плазменных возмущений до практически стационарного уровня не только в области отражения ВН, но и на высотах внешней ионосферы. При проведении измерений в магнитно-сопряженной к ВО<sub>и</sub> ионосфере в ряде случаев использовались более длительные нагревы плазмы с временем излучения ВН 30-45 мин, чтобы обеспечить высокий уровень генерации плазменных возмущений во всей возмущенной магнитной силовой трубке.

Измерения характеристик искусственной инжекции энергичных электронов на ионосферные высоты выполнялись с помощью детекторов энергичных электронов, размещенных на спутниках DEMETER и NOAA при их пролете через возмущенную магнитную силовую трубку или близко от нее. Эксперименты на французском спутнике DEMETER выполнялись в 2005-2010 гг., высота его орбиты равна 660 км; на спутниках NOAA-18 и NOAA-19 (США) – в 2019–2021 гг., высота их орбиты равна 860 км. Над стендом СУРА спутник DEMETER пролетал в 18:00-18:30 UT либо в поздние вечерние или ночные часы в зависимости от сезона проведения измерений и около 07:30-08:00 UT в дневных условиях (местное время  $T_{\text{мск}} = T_{\text{UT}} + 3$  или 4 ч в разные годы проведения измерений). В магнитно-сопряженной к стенду ионосфере спутник пролетал через возмущенную магнитную силовую трубку около 18:30 UT, что соответствует для разных сезонов поздним вечерним или ночным условиям нагрева ионосферы мощными радиоволнами.

Над стендом СУРА спутники NOAA пролетали через возмущенную магнитную силовую трубку около 07:00 UT и 13:00 UT ( $T_{\rm MCK} = T_{\rm UT} + 3$  ч в годы проведения измерений), т.е. в близко к полуденным, в ранние вечерние или вечерние часы в зависимости от сезона проведения экспериментов. В магнитно-сопряженной к стенду ионосфере эти спутники пролетали через возмущенную магнитную силовую трубку около 13:30 UT, что соответствует поздним вечерним или ночным условиям нагрева ионосферы мощными радиоволнами. Заметим, что  $T_{\rm мск}$  для стенда СУРА практически совпадает с астрономическим временем его местоположения. Из вышесказанного ясно, что измерения проводились в разное время суток, что позволило сделать определенные выводы о суточной зависимости характеристик инжекции, что необходимо для прогнозирования ее влияния на генерацию различного рода возмущений ионизированной и нейтральной компонент атмосферы Земли.

Детектирование энергичных электронов на французском спутнике DEMETER осуществлялось с помощью спектрометра IDP, который в режиме burst mode ежесекундно измерял энергии и величины потока энергичных электронов в диапазоне от 70 кэВ до 2.5 МэВ [34]. Особенность размещения спектрометра на корпусе спутника заключалось в том, что он измерял величины потока электронов в близко к ортогональному относительно плоскости его орбиты направлении (с питч-углами, лежащими в области  $90^{\circ} \pm 16^{\circ}$  по отношению к направлению геомагнитного поля, что в случае измерений на стенде СУРА соответствовало регистрации "запертых" в магнитной силовой трубке электронов). Однако из-за низкой высоты орбиты спутника (~660 км) значение питч-углов для таких электронов в экваториальной области возмущенной магнитной силовой трубки лишь незначительно (на несколько градусов) превышало угол конуса потерь, что обеспечивало условия перевода в него энергичных электронов (например, при взаимодействии электронов с ОНЧ-волнами) и проникновение их на низкие ионосферные высоты. Это дает основание считать, что в этих измерениях имеет место инжекция энергичных электронов на ионосферные высоты. Поскольку электроны с энергией  $E \approx 20-$ 200 кэВ в значительной степени поглощаются на высотах нижней ионосферы 60-100 км (электроны с большей энергией проникают на более низкие высоты, см., например, работы [35, 36]) и не возвращаются обратно во внешнюю ионосферу, такая инжекция электронов на ионосферные высоты может также рассматриваться как их высыпание в ионосферу Земли.

Подробное описание бортовой аппаратуры спутников серии NOAA можно найти по ссылке [37]. Данные о характеристиках энергичных электронов брались с размещенных на них двух детекторов. Из-за разной их ориентации в пространстве детектор-0° (далее Д-0) в интересующих нас широтах измерял поток электронов внутри конуса потерь, что отвечает потоку высыпающихся из радиационного пояса Земли энергичных электронов, а детектор- $90^{\circ}$  (Д-90) — вне его, что отвечает электронам, захваченным ("запертым") в магнитной силовой трубке. Как было отмечено выше, "запертые" электроны, которые опускаются вдоль силовых линий геомагнитного поля до ионосферных высот, на экваторе возмущенной трубки лишь немного выходят за конус потерь и по разным причинам могут перейти в разряд "высыпающихся". Из представленных в статье результатов будет видно, что измеренные на средних широтах потоки таких "высыпающихся" электронов на два порядка и больше слабее потоков "запертых", оставаясь в большинстве случаев ниже порога их регистрации аппаратурой спутников NOAA. Аналогичная ситуация обычно имеет место и при измерении естественных потоков "высыпающихся" и "запертых" электронов на средних широтах в условиях низкой геомагнитной активности [36]. Поэтому для спутников NOAA измеренное на высоте  $h \approx 860$  км детектором Д-90 увеличение потока энергичных электронов может, как и для спутника DEMETER, рассматриваться как их искусственная инжекция (или высыпание) из радиационного пояса Земли на ионосферные высоты, стимулированная модификацией F2-области ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона.

Заметим, что измерения в дневные и ранние вечерние часы выполнялись при высоком линейном поглощении радиоволн в нижних слоях ионосферы в условиях низкой высоты F2-слоя; также часто имело место присутствие естественного спорадического слоя  $E_s$  на высотах 100—110 км. Кроме того, при достаточно высокой эффективной мощности излучения ВН (*P<sub>ef</sub>* ≥ 30 МВт) в дневное время суток могло наблюдаться формирование дефокусирующей линзы на высотах 130-170 км [1]. Все это не отвечает оптимальным условиям проведения измерений и приводит к сильному (на 20-30 дБ) уменьшению транспортируемой в верхнюю ионосферу мощности ВН по сравнению с проведением измерений в ночные часы в спокойной ионосфере, определяя тем самым низкую эффективность взаимодействия мощной радиоволны с плазмой и слабую интенсивность генерируемой ИИТ [5].

Отметим еще два момента, чтобы пояснить допущения, используемые нами при изложении представленного в настоящей работе материала.

1. Известно, что энергичные электроны в околоземном космическом пространстве образуют два радиационных пояса: внутренний и внешний. В спокойных геомагнитных условиях они разделены областью с пониженным содержанием энергичных электронов, положение которой соответствует величине  $L \approx 2.2-3.5$  и которая более выражена для частиц с энергиями  $E \geq 300$  кэВ. Для стенда СУРА с  $L \approx 2.7$  это соответствует попаданию в зазор между радиационными поясами. Од-

нако для электронов с энергиями  $E \le 300$  кэВ, для которых и проводились наши исследования, понижение плотности потока энергичных электронов в этом зазоре выражено слабо даже в спокойных геомагнитных условиях и еще слабее — в возмущенных условиях. Поэтому в нашем случае допустимо говорить о едином радиационном поясе Земли без разделения его на внутренний и внешний пояса.

2. Существует лишь ограниченное количество прямых измерений свойств высыпающихся энергичных электронов, проведенных на средних широтах в естественных условиях, результаты которых представляют интерес с точки зрения наших исследований. Среди них следует отметить результаты работы [38] по измерению характеристик энергичных электронов с E = 20-150 кэВ для L = 2.0-2.8, выполненных с помощью бортовой аппаратуры спутника "Космос-348", выведенного на эллиптическую орбиту 212/680 км. В этих измерениях было получено, что:

 а) величина потока высыпающихся энергичных электронов сильно зависит от широты их регистрации, увеличиваясь с приближением к полярным областям;

б) интенсивность высыпаний электронов быстро растет с повышением уровня геомагнитной активности;

в) наблюдается эффект последействия геомагнитных возмущений в ионосфере, когда повышенный уровень высыпаний регистрируется в течение недели и даже после их окончания уже в спокойных геомагнитных условиях, если судить по величине геомагнитного индекса  $K_p$ .

На основе результатов исследований характеристик естественных и искусственных высыпаний энергичных электронов из радиационного пояса Земли на ионосферные высоты на долготе стенда СУРА были определены их отличительные особенности и определена граница естественных высыпаний в зависимости от геофизических условий [39, 40]. Было установлено, что в северном полушарии с ростом значений геомагнитного индекса АЕ южная граница области с сильными естественными высыпаниями опускается на более южные широты, и при АЕ ≈ 300-800 нТл она может достигать широты  $\Phi^*_{\rm Tp} \approx 54.6^\circ$  с.ш., т.е. центра возмущенной магнитной силовой трубки, опускаясь до широт  $46^{\circ}-52^{\circ}$  с.ш. для AE = 800-1200 нТл. При этом положение южной границы зоны естественных высыпаний контролируется в большей степени не величиной К<sub>р</sub>-индекса, а средним значением индекса АЕ, определенного по его измерениям в течение нескольких часов до проведения экспериментов. Индекс АЕ имеет максимальные значения на стадии затухания геомагнитных возмущений, через 1-2 дня после регистрации максимальных значений индекса  $K_p$ , относящихся к фазе их развития. Из этих результатов видно, что в условиях спокойной или слабовозмущенной ионосферы естественные высыпания не оказывают заметного влияния на измерения характеристик инжекции энергичных электронов над стендом СУРА.

Следует отметить, что аналогичные сравнительные измерения характеристик естественных и искусственных высыпаний энергичных электронов были выполнены при проведении исследований в магнитно-сопряженной к стенду СУРА ионосфере [40, 41]. Было установлено, что на результаты измерений в этой области сильной влияние оказывает Южно-Атлантическая магнитная аномалия [42], в которой наблюдается ослабление напряженности геомагнитного поля и, следовательно, более интенсивные высыпания энергичных электронов.

### 2.1. Характеристики инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли на высоты ионосферы в условиях модификации ее F<sub>2</sub>-области мощными радиоволнами KB-диапазона. Измерения в поздние вечерние и ночные часы

Эти измерения были выполнены в 2005-2010 гг. в рамках программы СУРА-DEMETER. Спутник пролетал над стендом СУРА около 18:30 UT или в поздние вечерние или ночные часы в зависимости от сезона, когда проводились эксперименты. На рис. 1 приведен пример регистрации 14 мая 2010 г. высокого уровня искусственной инжекции энергичных электронов на ионосферные высоты. Этот сеанс измерений проводился в спокойных геомагнитных условиях с  $\Sigma K_p = 4-5$  и АЕ ≤ 100 нТл. Внизу черным треугольником отмечено время и координаты, когда спутник пролетал наиболее близко к центру возмущенной магнитной силовой трубки (приблизительно в 28 км от него). В этом эксперименте условия модификации ионосферной плазмы были близки к оптимальным, и на ионограммах наблюдалось развитие F-рассеяния (F<sub>spread</sub>) и эффекта аномального ослабления интенсивности ветвей для их О-моды [1, 5, 6]. а приборами спутника на высоте h = 660 км регистрировалось формирование дакта с относительным увеличением концентрации плазмы в нем ~10% [21]. Видно усиление в дакте потока электронов *F* с  $E \approx 100$  кэВ. Эти измерения проводились через 12 дней после сильной магнитной суббури с  $K_p \approx 5-6$ , во время которой происходила интенсивная накачка радиационного пояса Земли энергичными электронами и, следовательно, выполнялись условия для более интенсивной их последующей искусственной инжекции.

На основе всех измерений, выполненных в рамках программы СУРА-DEMETER [39-41],

были сформулированы признаки искусственного характера высыпаний энергичных электронов при модификации ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона в поздние вечерние и ночные часы. Это:

 максимум интенсивности инжекции наблюдается, как правило, внутри возмущенной магнитной силовой трубки, опирающейся на ВО<sub>и</sub> ионосферы, где вблизи высоты отражения ВН имеют место наиболее интенсивная генерация ИИТ и наиболее сильный разогрев ионосферной плазмы;

2) наблюдается увеличение интенсивности инжекции электронов в дакте;

3) интенсивность инжекции увеличивается с ростом геомагнитной активности, во время которой происходит наполнение радиационного пояса Земли энергичными электронами;

4) слабая интенсивность искусственной инжекции или ее отсутствие после длительного периода низкой геомагнитной активности (больше 10-14 дней) определяется низким содержанием или отсутствием энергичных электронов в магнитной силовой трубке радиационного пояса Земли с  $L \approx 2.7$ ;

5) максимальные потоки инжектируемых энергичных электронов с  $F \approx 100$  электрон/с · см<sup>2</sup> · ср · кэВ наблюдались для их энергий  $E \approx 100$  кэВ;

6) в северном полушарии на высоте орбиты спутника  $h \approx 660$  км область инжекции вдоль геомагнитного меридиана имеет размеры до 900 км к северу от центра возмущенной магнитной силовой трубки и до 400 км к югу от него, намного превышая размер ВО<sub>ц</sub> ионосферы. При этом наблюдается более плавное падение плотности потока *F* к северу от центра возмущенной магнитной силовой трубки, чем к югу. Размер области инжекции в ортогональном к меридиану направлении оценивается в 400–500 км, что также значительно превышает поперечный размер возмущенной магнитной силовой трубки;

7) было установлено, что в условиях "холодного старта" (после длительной, более 10–15 мин, паузы излучения ВН, когда ИИТ практически полностью релаксирует) характерное время роста интенсивности потока инжектируемых электронов после начала модификации ионосферы равно 1–7 мин и зависит от геофизических условий проведения эксперимента; время перехода к естественному фоновому уровню потока после выключения ВН составляет до 10–15 мин;

8) проведенные исследования позволили установить, что искусственная инжекция энергичных электронов, хотя и более слабого уровня, наблюдается в условиях, когда частота ВН может немного превышать критическую частоту foF2, но только если ее верхнегибридная частота остается



**Рис. 1.** Пример регистрации искусственной инжекции энергичных электронов, выполненной 14 мая 2010 г. с помощью спутника DEMETER. Цветом на рисунке отражена интенсивность потока энергичных электронов (шкала справа) для выбранных их энергий (вертикальная шкала слева). Черным треугольником отмечено время и координаты пролета спутника через центр возмущенной магнитной силовой трубки.

меньше *fo*F2. Этот результат прямо указывает, что развитие тепловой (резонансной) параметрической неустойчивости [1, 6] должно играть определяющую роль в механизме стимуляции инжекции;

9) проведенные эксперименты показали, что искусственная инжекция энергичных электронов в магнитно-сопряженную область (МСО) ионо-сферы, имела следующие характеристики:

а) в спокойных геомагнитных условиях максимальная энергия высыпающихся электронов составляет  $E \approx 100-150$  кэВ при величине их потока F до 100-200 электрон/с · см<sup>2</sup> · ср · кэВ;

б) максимум интенсивности инжекции, как правило, наблюдается внутри возмущенной магнитной силовой трубки;

шение энергии высыпающихся частиц и их интенсивности при смещении от центра MCO в сторону экватора, чем при смещении в сторону южного полюса;

г) пространственные размеры зоны стимулированной модификацией ионосферы инжекции энергичных электронов в МСО могут достигать 2200 км вдоль геомагнитного меридиана и ~500 км поперек его;

в) в области инжекции (в интервале широт  $46^{\circ}-53^{\circ}$  ю.ш.) наблюдается более резкое умень-

д) интенсивность инжекции в южном полушарии заметно выше, чем в северном, что объясняется влиянием Южно-Атлантической магнитной аномалии.

#### 2.2. Характеристики искусственной инжекции энергичных электронов в дневные и вечерние часы по результатам измерений с помощью бортовой аппаратуры спутников серии NOAA

По сравнению с ночными часами измерений. результаты которых приведены выше в п.2.1, эксперименты в дневные и вечерние часы проводятся с дополнительным линейным поглощением мощных радиоволн в нижних (D и E) слоях ионосферы. Поскольку в поздние вечерние и ночные часы линейное поглощение мало и в большинстве случаев может не учитываться, в приведенных выше измерениях эффективная мощность излучения ВН для стенда СУРА составляет  $P_{ef} = P_0 G$ , где  $P_0 \approx 500-600$  кВт – ВЧ-мощность, генерируемая тремя передатчиками стенда, а  $G \approx 160 - 300 -$ коэффициент усиления излучающей антенны стенда в диапазоне  $f_{\rm BH} = 4300 - 6800$  кГц, увеличивающийся с ростом частоты ВН. В спокойных геомагнитных условиях линейное поглощение радиоволн более сильное в полуденные часы, когда в ионосфере наблюдаются наиболее плотные D- и E-слои. Это приводит к заметному уменьшению в дневных условиях транспортируемой в F2-слой энергии мощной радиоволны и, следовательно, к уменьшению эффективности генерации и интенсивности ИИТ в верхней ионосфере. В наших экспериментах величина линейного поглощения радиоволн не определялась и для нахождения приведенной (с учетом линейного поглощения) эффективной мощности излучения ВН,  $P_{ef}^*$ , выполнялась оцен-ка поглощения с использованием имеющихся в литературе данных. В дневные часы величина этого поглощения на пути от поверхности земли до высоты отражения ВН в спокойных геомагнитных условиях на частотах 4-5 МГц составляет примерно 5-10 дБ; более высокое поглощение имеет место в полуденные часы летних месяцев на более низких частотах ВН [43]. Это соответствует для таких частот уменьшению приведенной мощности ВН  $P_{ef}^*$  до 10-30 МВт по сравнению с эффективной мощностью излучения стенда СУРА  $P_{ef} \approx 80 - 120$  МВт для ночных измерений в отсутствие линейного поглощения. В утренние и ранние вечерние часы величина поглощения может уменьшаться до 3-5 дБ ( $P_{ef}^* \approx 20-50$  МВт). В возмущенных условиях линейное поглощение радиоволн может значительно возрастать, приводя к понижению  $P_{ef}^*$  до значения в несколько MBт в зависимости от стадии развития возмущенности и ее уровня.

При проведении измерений в дневной ионосфере необходимо также принимать во внимание возможность образования дефокусирующей линзы на высотах 130–170 км, если эффективная мощность излучения ВН превышает 30 МВт [1]. Это еще больше уменьшает поток энергии ВН вблизи высоты ее отражения и, следовательно, интенсивность генерируемой ИИТ. Кроме того, наличие спорадического  $E_s$ -слоя может приводить к частичной экранировке верхней ионосферы и к уменьшению транспортируемой в верхнюю ионо-сферу мощности ВН. Для плотных  $E_s$ -слоев в его отдельных локальных областях возможна полная экранировка верхней ионосферы, когда через них модификация F2-слоя становится невозможной.

Для определения характеристик инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли во внешнюю ионосферу в дневные и вечерние часы проведения измерений использовались метеоспутники США NOAA-18 и NOAA-19. Потоки энергичных электронов определялись с помощью двух ортогонально расположенных на корпусе спутника детекторов (Д-0 и Д-90), проводящих детектирование в четырех диапазонах энергий электронов  $E: E_1 = 40 - 130$  кэB,  $E_2 = 130 - 130$ 287 кэВ, *E*<sub>3</sub> = 287-612 кэВ и *E*<sub>4</sub> ≥ 612 кэВ. Выполненные измерения показали, что в возмущенной магнитной силовой трубке плотность потока искусственно инжектируемых при нагреве ионосферы энергичных электронов с  $E \ge 287$  кэВ (в третьем и четвертом диапазонах) всегда была ниже порогового уровня их обнаружения:  $F_{\text{пор}} \approx$ ≈  $10^2$  электрон/см<sup>2</sup> · с · ср.

В качестве примера на рис. 2 приведены результаты сеанса измерений, выполненного 3 июня 2019 г. в спокойных геомагнитных условиях (индекс АЕ ≤  $\leq 50$  нТл,  $\Sigma K_p = 6$ ; последняя суббуря была 29 мая с  $K_p$  до 4). На этом рисунке приведены результаты измерения детекторами Д-0 и Д-90 величины потока *F* энергичных электронов в двух диапазонах наиболее низких энергий их регистрации:  $E_1 =$ = 40–130 кэВ (верхняя панель) и *E*<sub>2</sub> = 130–287 кэВ (средняя панель); на нижней панели показано изменение во времени широты орбиты спутника. Спутник в  $T^* = 12:57:12$  UT = 15:57:12 мск (это время отмечено на рисунке вертикальной линией) пролетал наиболее близко к центру возмущенной магнитной силовой трубки в еще дневной ионосфере, когда имело место высокое линейное поглощение радиоволн в ее нижних слоях. Стенд в этом сеансе работал на частоте 4300 кГц при критической частоте  $foF2 \approx 4.4$  МГц с достаточно низкой эффективной мощностью излучения ВН: *P<sub>ef</sub>* ≈ 25 МВт. С учетом условий проведения этих измерений значение приведен-

ной мощности  $P_{ef}^*$  не превышало 5 МВт. На еще большее уменьшение мощности проходящего в верхнюю ионосферу излучения ВН влияло присутствие во время измерений  $E_s$ -слоя с критической частотой до 4 МГц. При этом ионограммы вертикального зондирования показывали, что после включения ВН в  $E_s$  наблюдалось развитие



**Рис. 2.** Пример регистрации искусственной инжекции энергичных электронов, выполненной 3 июня 2019 г. с помощью спутника NOAA. На верхней и средней панелях рисунка показаны интенсивности потоков энергичных электронов, измеренные с помощью детекторов Д-90 и Д-0 для диапазона энергий  $E_1 = 40-130$  кэВ и  $E_2 = 130-287$  кэВ соответственно. На нижней панели показано изменение во времени широты орбиты спутника. Вертикальной линией отмечено время пролета спутника через центр возмущенной магнитной силовой трубки.

слоя *E<sub>s, spread</sub>*, что указывает на генерацию в нем искусственных неоднородностей концентрации плазмы с  $l_{\perp}$  порядка нескольких сотен метров. Из этого можно заключить, что, помимо ожидаемого эффекта частичной экранировки, в Е<sub>s</sub> должно было иметь место дополнительное нелинейное поглощение энергии мощной радиоволны, связанное с нелинейным взаимодействием ВН с плазмой. С учетом всего вышесказанного можно оценить значение приведенной эффективной мощности излучения ВН P<sup>\*</sup><sub>ef</sub>, составляющее не более 3 МВт. При такой низкой мощности  $P_{ef}^*$  в этом сеансе ожидаемо не обнаруживалась генерация искусственного слоя  $F_{spread}$  на ионограммах вертикального зондирования, определяемого генерацией интенсивных среднемасштабных искусственных ионосферных неоднородностей с  $l_{\perp} \approx 0.5 - 2$  км в результате развития самофокусировочной неустойчивости мощной радиоволны в ВО ионосферы и эффекта аномального ослабления, связанного с генерацией мелкомасштабных неоднородностей с  $l_{\perp} \leq 50$  м при развитии тепло-

вой параметрической неустойчивости, а также рассеяния в свою моду на неоднородностях с  $l_\perp pprox$ ≈ 100-200 м [1, 5, 6, 20]. Все это свидетельствует о низком уровне интенсивности ИИТ. Однако, как следует из рис. 2, даже в таких условиях проведения измерений и при таком слабом взаимодействии мощной радиоволны с ионосферной плазмой детектором Д-90 регистрировалась стимулированная нагревом ионосферы искусственная инжекция энергичных электронов с  $E_1 = 40 - 130$  кэВ и достаточно высокой плотностью их потока  $F(1) \approx 3 \cdot 10^3$  электрон/см<sup>2</sup> · с · ср; лишь немного выше порога обнаружения регистрировались электроны с энергиями  $E_2 = 130 - 287$  кэВ, для которых  $F(2) \approx 2 \cdot 10^2$  электрон/см<sup>2</sup> · с · ср. В этом сеансе южная граница регистрации естественных авроральных высыпаний находилась на широте ~62° с.ш., вблизи которой все еще обнаруживается присутствие искусственной инжекции в ионосферу энергичных электронов.

На основе всех полученных экспериментальных данных следует заключить, что интенсивность искусственной инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли в ионосферу должна в бо́льшей степени определяться уровнем их содержания в радиационном поясе, чем интенсивностью развития ИИТ.

## 2.3. Энергетические характеристики искусственной инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли на ионосферные высоты

Рассмотренные выше результаты экспериментальных исследований позволяют оценить полную мощность, вносимую в ионосферу Земли обоих полушарий высыпающимися энергичными электронами. В приведенных ниже оценках учитывалось наличие всех электронов с энергий  $E \ge 20$  кэB, для которых, согласно изложенному в работах [35, 36, 38], максимум их спектральной плотности имеет место при  $E \approx 20$  кэВ. Предполагается степенной характер спектра электронов со значениями показателя спектра ~1 и ~2.5, характерными соответственно для ночных и полуденных часов проведения измерений в оптимальных условиях нагрева ионосферной плазмы с достаточно высоким содержанием энергичных электронов в радиационном поясе Земли. Зная энергетический спектр электронов, инжектируемых в результате модификации ионосферы мощными радиоволнами, и полагая площади областей высыпаний равными (500 км  $\times$  1000 км) = 5  $\cdot$  10<sup>5</sup> км<sup>2</sup> =  $= 5 \cdot 10^{15}$  см<sup>2</sup> в северном полушарии и (500 км ×  $\times$  1500 км) = 7.5  $\cdot$  10<sup>5</sup> км<sup>2</sup> = 7.5  $\cdot$  10<sup>15</sup> см<sup>2</sup> в южном полушарии, а также более высокую интенсивность инжекции в южном полушарии, можно оценить полную мощность W, вносимую этими электронами в ионосферу обоих полушарий. По данным измерений в спокойных геомагнитных условиях, полученным с помощью спутников NOAA, в полуденные часы она, как правило, не превышает 0.1 кВт; в вечерние часы она составляет около 1 кВт, достигая величины 5-10 кВт в возмущенных геомагнитных условиях. Напомним, что измерения в ранние вечерние и особенно в дневные часы выполняются в условиях повышенного или даже высокого уровня линейного поглошения энергии ВН в нижней ионосфере, когда значение приведенной мощности излучения ВН

 $P_{ef}^*$  не превышает 3–10 МВт и имеет место развитие ИИТ слабого уровня. В этих условиях интенсивные потоки высыпающихся энергичных электронов могут наблюдаться только при высоком уровне их содержания в радиационном поясе Земли. Принимая во внимание результаты отдельных экспериментов, следует полагать, что в утренние часы инжекция энергичных электронов будет приблизительно такого же уровня, как и в ранние вечерние часы.

В ночное время суток в спокойных геомагнитных условиях при выполнении оптимальных условий взаимодействия мощной радиоволны с ионосферной плазмой оценка полной мощности высокоэнергичных электронов, инжектируемых из радиационного пояса Земли в ионосферу обоих полушарий, может составлять 50-100 кВт; в возмущенных геомагнитных условиях мощность высыпаний может быть в несколько раз больше и достигать величины *W* ≈ 500 кВт. Эта величина для условий проводимых измерений близка к генерируемой передатчиками стенда ВЧ-мощности: Р<sub>0</sub> ≈ 450-600 кВт. Такая большая величина мощности инжектируемых в ионосферу Земли энергичных электронов является индикатором сильного влияния на ионосферно-магнитосферные связи модификации среднеширотной ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона.

Представленные выше результаты выполненных на стенде СУРА исследований позволяют заключить, что искусственная инжекция энергичных электронов из радиационного пояса Земли на ионосферные высоты благодаря ее высокой энергетике и возможности использования в различное время суток и в различных геофизических условиях может с успехом применяться для изучения протекающих в магнитосфере процессов и оказания влияния на ионосферно-магнитосферные связи; она также может рассматриваться как мощный источник генерации вторичных возмущений в ионосферной плазме и в нейтральной атмосфере. Ниже (в разд. 3) будут продемонстрированы некоторые примеры такого влияния энергичных электронов.

### 2.4. Механизм стимуляции искусственной инжекции энергичных электронов в ионосферу при излучении мощной радиоволны в режиме "несущая"

Выполненные измерения продемонстрировали, что высыпание энергичных электронов регистрируется и в условиях, когда частота ВН немного превышает критическую частоту foF2 (в режиме "нагрева на просвет"), если при этом верхнегибридная частота для мощной радиоволны остается ниже критической частоты foF2 [44]. Этот факт является прямым доказательством того, что тепловая (резонансная) параметрическая неустойчивость через развитие тепловых компонент ИИТ и генерацию верхнегибридных и нижнегибридных плазменных колебаний должна лежать в основе механизма стимуляции инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли на высоты ионосферы. Важно, что в ВО, имеет место трансформация этих нижнегибридных колебаний на искусственных ионосферных неоднородностях в ОНЧ-волны, которые уходят в магнитосферу, где они, взаимодействуя с энергичными

электронами радиационного пояса Земли, способны изменять их питч-угловое распределение и вызывать их искусственную инжекцию в ионосферу, как это рассматривалось, например, в работах [6, 22, 45–47]. Такая схема генерации ОНЧволн при модификации ионосферной плазмы мощными радиоволнами КВ-диапазона дает возможность использовать излучение ВН в режиме "несущая" для стимуляции высыпания энергичных электронов помимо прямой их генерации за счет излучения наземными ОНЧ-передатчиками [26–28] или за счет нелинейной демодуляции модулированной по амплитуде мощной радиоволны КВ-диапазона (эффект Гетманцева) [29, 30, 48–50].

В предложенном выше механизме генерации ОНЧ-излучений существует, однако, одна проблема, которая требует своего разрешения. Известно, что время затухания естественных ОНЧизлучений на трассе их многоскачкового распространения между магнитно-сопряженными областями ионосферы, как правило, не превышает 10-30 с, что намного короче времени уменьшения потока искусственной инжекции энергичных электронов до его естественного уровня после выключения ВН, которое составляет от нескольких минут до 10-15 мин в зависимости от условий проведения измерений. Такое сильное различие в значений времен релаксации ОНЧизлучений и установления невозмущенного уровня потоков энергичных электронов требует включения специального механизма поддержания на более длительном временном интервале интенсивности этих излучений, если оставаться в рамках модели инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли через изменение их питч-углового распределения за счет взаимодействия волна-частица. Здесь может рассматриваться механизм их циклотронного усиления при распространении ОНЧ-излучений в магнитосфере Земли при наличии крупномасштабных плазменных неоднородностей (дактов плотности плазмы) [51, 52], либо следует допускать, что развивающиеся при модификации ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона дакты с увеличенной концентрацией плазмы захватывают в себя естественные ОНЧ-излучения, многократно увеличивая при этом их интенсивность, как это наблюдалось, например, в работе [53] и следует из результатов численного моделирования [54], с последующим каналированием их в область экватора возмущенной магнитной силовой трубки, поддерживая таким образом высокий уровень высыпаний энергичных электронов после выключения ВН. Согласно [21, 22], время релаксации дактов составляет от нескольких минут до 10-20 мин, что соответствует измеренному времени уменьшения интенсивности инжекции до ее невозмущенного уровня. Сделанные предположения требуют, однако, дальнейшего изучения и всесторонней экспериментальной проверки.

### 3. ВОЗМОЖНЫЕ КАНАЛЫ ВЛИЯНИЯ ИСКУССТВЕННОЙ ИНЖЕКЦИИ ЭНЕРГИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ НА СОСТОЯНИЕ ИОНОЗИРОВАННОЙ И НЕЙТРАЛЬНОЙ КОМПОНЕНТ АТМОСФЕРЫ ЗЕМЛИ

#### 3.1. Ионизация атмосферы Земли энергичными электронами

Представленные в настоящей работе результаты измерений убедительно демонстрируют, что модификация среднеширотной ионосферы мошными радиоволнами КВ-диапазона в определенных условиях стимулирует интенсивную инжекцию (высыпание) энергичных электронов с энергиями  $E \approx 100 - 150$  кэВ и плотностью их потока до 100-200 электрон/с · см<sup>2</sup> · ср · кэВ из радиационного пояса Земли в ионосферу. Установлено, что зона их высыпаний в оптимальных условиях проведения экспериментов имеет большие пространственные размеры: ~1500 км вдоль геомагнитного меридиана с большей ее протяженностью на север от стенда и ~500 км поперек меридиана с максимальной интенсивностью высыпаний, как правило, в возмущенной магнитной силовой трубке, опирающейся на ВО<sub>и</sub> ионосферы. Важно также, что высыпания наблюдаются в обеих магнитно-сопряженных областях ионосферы, положение которых определяется геометрией возмущенной магнитной силовой трубки. Инжектируемые в ионосферу электроны способны вызывать дополнительную ионизацию плазмы на высотах ее D- и E-областей (на высотах  $h \approx 70-$ 130 км), что приводит к увеличению в них поглощения радиоволн [9, 36, 55, 56].

Изменение величины поглощения на высотах нижней ионосферы достаточно легко детектируется в экспериментах по ослаблению интенсивности ветвей ионограмм на частотах меньше 2-3 МГц (или по вариациям минимальной регистрируемой частоты следов на ионограммах), а также по ослаблению интенсивности кратных отражений, что может служить диагностическим признаком появления высыпаний энергичных электронов из радиационного пояса Земли. В отличие от спутниковых измерений регистрация этого эффекта с помощью станций вертикального зондирования ионосферы позволяет получить информацию не только об условиях появления высыпаний, но и о размерах области их появления и, что очень важно, о характерных временах развития и релаксации искусственной инжекции, если используется 1-минутный режим съема ионограмм. В экспериментах на стенде СУРА такие измерения были выполнены с помощью

ионосферной станции КазФУ, расположенной вблизи г. Казань на расстоянии ~170 км к востоку от стенда [39, 40]. Анализ полученных в них экспериментальных данных, относящихся к вечерним и ночным часам проведения измерений, показал, что в условиях "холодного старта" (модификация невозмущенной ионосферы) характерное время развития поглощения интенсивности сигнала ионозонда (или появления энергичных электронов) после первого включения ВН составляет от нескольких до 10-12 мин, однако такое поглощение начинает регистрироваться существенно быстрее (уже через 1-2 мин) после включения ее второго импульса, если пауза между импульсами ВН не превышала 10-15 мин.

По результатам выполненных измерений можно также заключить, что для 3-го и следующих импульсов включения мощной радиоволны четкая корреляция подавления интенсивности зондирующего сигнала с включением ВН нарушалась: сигнал мог иметь малую интенсивность или, наоборот, свой максимум как во время ее излучения, так и во время паузы. Это указывает на наложение влияния эффектов накопления и последействия от разных циклов излучения ВН, которые особенно сильно проявляются при достаточно коротких временах ее излучения и паузы (например, при работе стенда в циклическом режиме [1-5 мин – излучение, 1-5 мин – пауза]). Сейчас ясно, что на эволюцию плазменных возмущений на временах 10-20 мин после выключения ВН оказывает влияние не только вынос плазмы из ВО<sub>и</sub>, как это считалось раньше, но и воздействие на ионосферу высыпающимися в нее энергичными электронами. Совокупное их влияние приводит к большому разбросу результатов измерений и усложнению интерпретации изучаемых явлений.

Несмотря на отмеченные выше сложности, перспективность ионозондовых измерений очевидна. С их помощью, используя рутинные измерения, можно изучать динамические характеристики высыпаний и их вариации в течение суток, зависимость их свойств от геомагнитной активности и степени возмущенности ионосферы, от характеристик мощной радиоволны (ее мощности, поляризации, угла наклона диаграммы направленности излучения, высоты отражения ВН) и т.д. Важно, что уже накопленный обширный банк экспериментальных данных позволяет выполнить часть этой работы без проведения новых широкомасштабных нагревных экспериментов.

В работах [55, 57] было установлено, что дополнительная искусственная ионизация атмосферы на высотах  $h \le 120$  км энергичными электронами, инжектируемыми в ионосферу при работе стенда СУРА, может обнаруживаться на расстоянии до 1000 км и более от стенда. При этом для обеспечения необходимой степени ионизации плазмы нижней ионосферы по сделанным в работе [55] оценкам плотность потока электронов с энергиями  $E \approx 100$  кэВ должна составлять величину, превышающую  $10^7$  электрон/м<sup>2</sup> · с. Это позволяет дать независимую оценку полной мощности, которую энергичные электроны вносят в ионосферу Земли:  $W \ge 250$  кВт, что хорошо соответствует приведенным в п. 2.3 данным.

Рассмотренные в настоящей работе результаты исследований по стимуляции высыпаний энергичных электронов из ралиационного пояса Земли и их влияния на нижнюю ионосферу позволяют дать интерпретацию до сих пор необъясненного эффекта, обнаруженного в работе [58] еще в первых нагревных экспериментах на стенде "Боулдер" (Колорадо, США) при измерении величины индушированного нагревом поглошения радиоволн в D-области ионосферы. В этой работе было продемонстрировано, что после продолжительного, 10-минутного нагрева ионосферы мощными радиоволнами наблюдалась длительная (до 10 мин) релаксация поглощения пробных радиоволн, которая никогда не регистрировалась при коротких (до 5 мс) импульсах излучения ВН; для них характерные времена роста и ослабления поглощения не превышали нескольких десятков миллисекунд, соответствуя результатам измерений в естественных условиях. Кроме того, нагрев ионосферы мощными радиоволнами О-поляризации здесь был неожиданно более эффективен по сравнению с волнами Х-поляризации. Эти результаты не укладывались в рамки принятых представлений о модификации нижней ионосферы мощными радиоволнами. Сейчас ясно, что наблюдаемые эффекты могут быть связаны со стимулированным мошной радиоволной высыпанием энергичных электронов, влияние которых на нижнюю ионосферу может продолжаться до 10-15 мин; при этом стимуляция высыпаний при модификации ионосферной плазмы мощными радиоволнами О-поляризации должна быть более эффективной из-за резонансного характера взаимодействия ВН с плазмой и более интенсивной генерации ИИТ.

#### 3.2. Генерация плазменных возмущений во внешней ионосфере и в магнитно-сопряженной стенду СУРА области ионосферы

Генерация во внешней ионосфере дактов с увеличенной плотностью плазмы при модификации F2-слоя ионосферы мощными радиоволнами *О*-поляризации было надежно установлено в экспериментах по зондированию ионосферной плазмы аппаратурой, расположенной на борту спутников DEMETER и DMSP. Измерения выполнялись как на стенде СУРА, так и на стенде НААRP; их результаты суммированы в работах

[21, 22] соответственно. Было установлено, что они обнаруживаются на высотах  $h \ge 500$  км; при оптимальных условиях модификации ионосферы мощными радиоволнами увеличение концентрации плазмы в них может составлять до 40% относительно фонового ее значения. Поперечные к геомагнитному полю размеры дактов равны 60-150 км, увеличиваясь с ростом высоты. Численными методами на основе модели SAMI2 было показано, что такие дакты образуются за счет выноса плазмы из области ее сильного разогрева вблизи высоты отражения ВН во внешнюю ионосферу вдоль силовых линий геомагнитного поля [22, 59, 60]. В работе [53] было продемонстрировано, что такие дакты способны каналировать ОНЧ-излучения с увеличением их интенсивности в дакте на 20-30% относительно фонового ее значения вне его. При благоприятных ионосферных условиях и при выполнении оптимальных условий для взаимодействия мощной радиоволны с ионосферной плазмой [21] их формирование при модификации F2-слоя ионосферы мощными радиоволнами является обычным явлением, поэтому их генерацию можно использовать для воздействия на ионосферно-магнитосферные связи.

Помимо указанных выше, отметим работу [61]. В ней приведены данные о регистрации ОНЧ-сигналов на частотах  $f \le 10$  кГц в пункте, расположенном в 30 км от нагревного стенда СУ-РА, излучавшего в режиме [2 мин – излучение, 8 мин – пауза]. Контроль за состоянием возмущенной магнитной силовой трубки осуществлялся по прохождению через нее "свистящих атмосфериков" (диапазон ОНЧ-радиоволн). Эти исследования показали, что при возмущении F2слоя ионосферы полем мощной радиоволны КВдиапазона имеет место возникновение каналов (дактов), ответственных за распространение ОНЧ-радиоволн вдоль силовых линий геомагнитного поля межлу магнитно-сопряженными областями ионосферы. В таком достаточно коротко импульсном режиме периодического излучения ВН измеренные характерные времена развития и релаксации таких каналов составляли ~1 мин и 2-4 мин соответственно. Столь короткие времена исключают возможность их формирования за счет термодиффузионных процессов распространения плазменных возмущений от области взаимодействия ВН с плазмой в F2-области до магнитно-сопряженной к ней ионосфере. В этой работе предполагалось, что развитие таких каналов (дактов) на длине всей возмущенной магнитно-силовой трубки должно быть связано с воздействием на плазму пучков сверхтепловых электронов, ускоренных в резонансных областях развития плазменных неустойчивостей.

По ряду причин измерения характеристик плазменных возмущений в возмущенной магнитной силовой трубке и в магнитно-сопряженной к

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

ВО<sub>ц</sub> ионосфере до сих пор на стенде СУРА носили лишь эпизодический характер. Можно указать только на несколько публикаций, в которых приведены результаты таких исследований.

Появление плазменных возмушений и КНЧ-ОНЧ-излучений во внешней ионосфере регистрировалось в 1991 г. с помощью аппаратуры, размещенной на борту спутника "Космос-1809" [62]. Было определено, что размеры области с повышенной интенсивностью ОНЧ-излучений на высоте его орбиты  $h \approx 960$  км могут достигать 500-700 км, что намного превышает размер области нагрева плазмы в поле пучка мощных радиоволн вблизи высоты их отражения: ~100 км, и больше соответствует размерам зоны искусственной инжекции энергичных электронов в ионосферу. В этих областях наблюдали повышение температуры электронов и развитие неоднородностей плотности плазмы с размерами вдоль орбиты спутника ~80 км, которые вызывают мерцания проходящих через них сигналов спутниковых радиомаяков.

В работе [63] приведены результаты измерения ОНЧ-КНЧ-радиоволн, которые регистрировались на высотах внешней ионосферы (на высотах 500-1000 км) при модификации ночной F2-области ионосферы мощными радиоволнами О-поляризации, излучаемыми стендом СУРА. Регистрация этих радиоволн выполнялась с помощью размещенных на борту спутника Интеркосмос-24 приборов. Во время нагрева ионосферной плазмы была зарегистрирована генерация низкочастотных излучений в диапазоне 10 Гц-1.5 кГц (в диапазоне КНЧ) с максимумом их интенсивности на частотах 50-70 Гц и в диапазоне 7.5-15 кГц (в ОНЧ-диапазоне) с максимумом на частотах 8-10 кГц. Такие излучения обнаруживались, когда орбита спутника проходила на расстоянии меньше 100 км от центра возмущенной магнитной силовой трубки, опирающейся на ВО<sub>и</sub>. Следовательно, эти волны возбуждались в трубке диаметром 100-200 км и потом распространялись вдоль силовых линий геомагнитного поля. Отмечается, что эксперименты по возбуждению КНЧ-ОНЧрадиоволн в дневных условиях не дали положительных результатов, что было позднее подтверждено в экспериментах со спутником DEMETER [21]. В работе [63] усиление КНЧ-шумов объяснялось воздействием на плазму сверхтепловыми электронами, ускоренными в области резонансного взаимодействия ВН с плазмой; генерация ОНЧ-радиоволн объяснялась трансформацией нижнегибридных плазменных колебаний, возбуждаемых при развитии тепловой (резонансной) параметрической неустойчивости, в свистовую моду распространения на мелкомасштабных неоднородностях концентрации плазмы, которые

также создаются при развитии этой неустойчивости (см. выше п. 2.4).

Ряд измерений в магнитно-сопряженной стенду СУРА области ионосферы был проведен с использованием бортовой аппаратуры спутника DEMETER [40]. Важно, что аппаратура этого спутника позволяла одновременно измерять как вариации плотности и температуры плазмы, так и потоки высыпающихся энергичных электронов. Недавно выполненная дополнительная обработка полученных экспериментальных данных показала, что в магнитно-сопряженной стенду СУРА области ионосферы обнаруживаются вариации концентрации электронов  $N_e$  с  $\delta N_e \approx 10\%$  с пространственным масштабом флуктуаций ~90 км вдоль орбиты спутника, которые регистрировались на расстоянии ~370 км. Прибор IDP спутника DE-METER зарегистрировал в этой области сильную искусственную инжекцию энергичных электронов на ионосферные высоты с максимумом их плотности потока до 800 электрон/см<sup>2</sup> · с · ср · кэВ для электронов с энергиями  $E \approx 100 - 120$  кэB; максимальная энергия инжектируемых электронов достигала значений Е≈ 300 кэВ. Вариации температуры электронов  $T_{\rm e}$  с  $\delta T_{\rm e} \approx 2 - 3\%$  слабо выделялись на фоновом уровне естественных флуктуаций, что не позволяет уверенно говорить об их искусственном характере. Эти результаты обсуждались в докладе [64].

Анализ результатов измерений, выполненных в магнитно-сопряженной к стенду СУРА области ионосферы, приводит к выводу, что искусственные вариации электронной концентрации плазмы N<sub>e</sub>, если и регистрировались на фоне их естественных флуктуаций, то только в тех сеансах, когда имело место интенсивное высыпание энергичных электронов из радиационного пояса Земли в ионосферу. Это позволяет предположить, что генерация таких возмущений N<sub>e</sub> определяется инжектируемыми в ионосферу энергичными электронами. Здесь важно подчеркнуть, что размеры области генерации возмущений N<sub>e</sub> намного превышают поперечные размеры возмущенной магнитной силовой трубки, опирающейся на ВО,, и более соответствуют размерам области высыпаний энергичных электронов. В подтверждение сделанного вывода о возможной связи генерации плазменных возмушений с высыпанием энергичных электронов из радиационного пояса Земли укажем на работу [65], в которой обнаружена такая связь для генерации естественных неоднородностей в F-слое ионосферы. Развитие интенсивной радиоавроры при вторжении в ионосферу потоков энергичных электронов обсуждается в работе [51].

Поскольку энергичные электроны одновременно высыпаются в ионосферу обоих полушарий, естественно допускать, что они могут вызывать развитие аналогичных возмущений плотности и температуры плазмы и в северном полушарии или усиливать уже существующие в области высыпаний крупномасштабные искусственные ионосферные неоднородности. Не исключено, что именно такого рода вариации плотности плазмы регистрировались в отмеченных выше экспериментах [62]. Важно указать, что из-за более слабой естественной возмущенности ионосферной плазмы и более низкого уровня естественных высыпаний энергичных электронов в средних широтах такие исследования на стенде СУРА имеют, как это уже отмечалось ранее, явные преимущества по сравнению с измерениями на более высокоширотных нагревных стендах НААRP и EIS-CAT-heater.

В заключение данного раздела необходимо сделать важное замечание. Как отмечалось ранее, при изучении свойств искусственной инжекции энергичных электронов в ионосферу для модификации F2-области мы всегда использовали мощные радиоволны *О*-поляризации, поскольку это обеспечивает более высокий уровень развития ИИТ [1, 5, 6]. Однако выполненные в последние годы на стенде EISCAT-heater широкомасштабные исследования по нагреву ионосферы волнами *X*-поляризации показали, что и в этом случае в определенных условиях могут эффективно возбуждаться многие типы плазменных возмущений, которые обычно регистрируются при ее модификации волнами *O*-поляризации [33].

В октябре 2021 г. на стенде СУРА были проведены эксперименты по нагреву ионосферы волнами Х-поляризации с целью изучения возможности стимулирования ими инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли. В одном из сеансов были зарегистрированы потоки энергичных электронов, свойства которых соответствуют характеристикам их искусственной инжекции, стимулированной модификацией ионосферы волнами О-поляризации. Эти эксперименты будут продолжены на стенде СУРА в ближайшее время. Следует отметить, что на возможность стимулирования инжекции энергичных электронов из радиационного пояса с использованием мощных радиоволн Х-поляризации, указывалось еще в работе [66], в которой приводятся результаты экспериментов на стенде Platteville (Колорадо, США).

### 3.3. Генерация микроволнового излучения под воздействием высыпающихся энергичных электронов и его влияние на нейтральную компоненту атмосферы Земли на ионосферных, мезосферных и тропосферных высотах

Еще одним развиваемым в НИРФИ направлением является изучение генерации микроволнового излучения (с длинами волн от миллиметров до дециметров) на ионосферных высотах под воздействием высыпающихся энергичных электронов. Ионосфера, как любое нагретое тело, излучает электромагнитную энергию в широком диапазоне радиоволн. Это тепловое излучение имеет флуктуационный характер и создается хаотическими движениями заряженных частиц. Интенсивность теплового излучения ионосферы в масштабе радиояркостных температур составляет в метровом и дециметровом диапазонах единицы и десятые доли градусов соответственно [67]. При этом температура электронов в ионосфере равна 1000-1500 К. При воздействии на F2-область ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона О-поляризации вблизи высоты их отражения может происходить значительный нагрев электронов плазмы до температур 3000-4500 К [13, 68]. Соответственно, имеет место усиление интенсивности теплового излучения в дециметровом и метровом диапазонах длин волн.

В работах [69, 70] было дополнительно обнаружено мощное спорадическое СВЧ-радиоизлучение ионосферы в широком диапазоне сантиметровых и дециметровых длин волн, интенсивность которого составляла десятки градусов яркостной температуры. Было установлено, что это излучение коррелирует с всплесками солнечной активности и связанными с ними геомагнитными возмушениями [71, 72]. Только в середине 90-х годов прошлого столетия природа этого явления была объяснена в работах [73, 74] на основе "ридберговского механизма" излучения нейтральных атомов и молекул на ионосферных высотах. Данный механизм включает в себя переходы электронов между высоковозбужденными (главное квантовое число n > 10) ридберговскими уровнями нейтральных атомов и молекул ионосферы, возбужденными при их столкновении с потоком солнечных частиц высокой энергии. Энергетические переходы с ридберговских состояний заполняют практически весь диапазон электромагнитного спектра верхнеатмосферных эмиссий, начиная от жесткого УФ-излучения. Отметим, что радиолинии излучения, соответствующие переходам между ридберговскими состояниями вплоть до  $n \approx 300$  наблюдались в галактических областях ионизированного водорода Н II и в планетарных туманностях [75]. Аналогичный механизм, но на ускоренных электронах нагретой мощным КВизлучением ионосферной плазмы, был привлечен к интерпретации искусственного излучения ионосферы в дециметровом диапазоне волн [76].

В настоящем разделе работы обсуждаются результаты выполненных в последние годы экспериментальных исследований ридберговского излучения нейтральной компоненты ионосферы, стимулированного мощным КВ-радиоизлучением среднеширотного стенда СУРА. Напомним, что ридберговскими называются такие высоковозбужденные состояния атомов и молекул, которые расположены вблизи порога ионизации и характеризуются бесконечной последовательностью энергетических уровней в припороговой области энергий. Ридберговские атомы и молекулы имеют на своей верхней оболочке один высоковозбужденный слабосвязанный электрон. При экстремально большом возбуждении атом (молекула) может рассматриваться как макроскопический объект, так как при n = 1000 его размер, определяемый радиусом орбиты электрона, равен  $r_n \approx 10^{-8} n^2 \approx 10^{-2}$  см. Поэтому ридберговский атом (молекулу) можно рассматривать как положительно заряженный ионный остов с одним ридберговским электроном. При этом для многих задач остов можно считать точечным положительным зарядом, а в качестве модели ридберговского атома рассматривать водородоподобный атом. В такой модели энергии ридберговских состояний изолированного атома, отсчитанные от энергии ионизации, определяются формулой Ридберга:

$$E_n = R(1 - m_e/M)(n - \delta)^{-2},$$

где R = 13.6058 эВ — постоянная Ридберга (энергетическая),  $m_e$  — масса электрона, M — масса ядра,  $\delta$  — квантовый дефект заряда ядра, вклад которого при больших *n* пренебрежимо мал.

Ридбергские состояния метастабильны: время жизни ридберговского атома для n = 1000 составляет  $\tau_n \approx 10^{-8} n^3 \approx 10$  с. Частота переходов между ридберговскими уровнями  $m \rightarrow n$  определяется выражением

$$v = R_v \left(1 - \frac{m_e}{M}\right) \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

где  $R_v = 3.289842 \cdot 10^{15}$  Гц — постоянная Ридберга (спектроскопическая). Из этого уравнения следует, что переходы между соседними состояниями  $(n + 1) \rightarrow n$  отвечают частотам излучения радиоволн  $v_n \approx 2R_v n^{-3}$ , которые лежат в субмиллиметровом и миллиметровом диапазонах при  $n \approx 25-60$ , в сантиметровом — при  $n \approx 60 - 130$  и в дециметровом — при  $n \approx 130-280$ . Особо следует отметить, что расстояние между соседними ридберговскими линиями,  $\Delta v_n$ , в сантиметровом диапазоне составляет  $\Delta v_{103} \approx 170$  МГц, в дециметровом –  $\Delta v_{221} \approx 8$  МГц, а в метровом диапазоне при n > 300с учетом различных факторов, приводящих к уширению спектральной линии (соударения, эффекты Доплера, Зеемана и др.), спектр излучения становится практически сплошным.

В табл. 1 приведены основные характеристики атомов, находящихся в первом возбужденном состоянии с n = 2, и для ридберговских атомов с n = 1000. Отметим, что концентрация нейтральных атомов и молекул (N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> и O) в F2-слое ионосферы равна  $N_a \approx 10^9$  см<sup>-3</sup>, что соответствует расстоянию между ними ~10<sup>-3</sup> см. Эта величина сопоставима с размерами ридберговских атомов и молекул при n > 300. В этом случае их орбиты начинают соприкасаться, что приводит к значи-

Главное квантовое число	Энергия связи электрона в атоме (потенциал ионизации), эВ	Размер атома (радиус орбиты электрона), см	Период обращения электрона по орбите, с	Естественное время жизни, с	Частота переходов между соседними состояниями, МГц
2	~5	$\sim 10^{-8}$	$\sim 10^{-15}$	~10 <sup>-8</sup>	~10 <sup>9</sup>
1000	~10 <sup>-5</sup>	$\sim 10^{-2}$	$\sim 10^{-6}$	~10	~1

Таблица 1. Основные параметры ридберговских состояний атомов

тельному усилению столкновительных и радиационных взаимодействий между ними, которые играют большую роль в физико-химических процессах в атмосфере Земли. Кроме того, на ионо-сферных высотах время жизни ридберговских состояний атомов и молекул,  $\tau$ , определяется частотой их соударений с электронами  $\nu_e \approx 500 \text{ c}^{-1}$ , что соответствует  $\tau \approx 2 \cdot 10^{-3} \text{ c}$ .

Основные естественные механизмы образования ридберговских состояний на высотах ионосферы включают в себя следующие процессы: фотовозбуждения при поглощении солнечного жесткого ультрафиолетового излучения; возбуждения при столкновении энергичных электронов солнечных вспышек с атомами и молекулами атмосферы, а также электронов, высыпающихся из радиационных поясов Земли при сильных геомагнитных возмущениях; диссоциативное возбуждение. Поскольку потенциалы ионизации основных атомов и молекул атмосферы на ионосферных высотах N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> и O равны соответственно 15.5, 12.2 и 13.62 эВ, что много меньше энергии указанных процессов. В этих процессах вполне могут возбудиться атомы и молекулы вплоть до предионизационных уровней и даже ионизировать их. Далее, в процессе перехода ридберговских атомов и молекул в нижнее состояние излучается широкий спектр электромагнитных волн: от радиоволн до ультрафиолетового излучения. Согласно экспериментальным данным работ [70–72], интенсивность этого излучения в дециметровом диапазоне длин волн сопоставима или даже превосходит типичные уровни всплесков радиоизлучения Солнца во время солнечных вспышек.

В основе искусственного механизма образования ридберговских состояний на высотах ионосферы Земли (высоты 200–300 км) лежит модификация мощными радиоволнами КВ-диапазона O-поляризации F2-слоя ионосферы, когда вблизи высоты их отражения развиваются различные плазменные неустойчивости, приводящие к возбуждению интенсивной ИИТ, что в конечном итоге приводит к сильному разогреву плазмы, когда температура электронов  $T_e$  в ней может увеличиться в 2–3 раза. Такое увеличение  $T_e$ , а также ускорение фоновых электронов в областях с интенсивной высокочастотной плазменной турбулентностью приводит к появлению электронов с энергиями до 5–30 эВ [6, 13]. Эти "горячие" электроны имеют энергию выше потенциала ионизации  $N_2$ ,  $O_2$  и O и, соударяясь с ними, могут перевести их в высоковозбужденное ридберговское состояние или вызвать дополнительную искусственную ионизацию атмосферы.

Как показали выполненные в работе [39–41] исследования, высокоэнергичные электроны с  $E \approx 100$  кэВ могут появляться на высотах ионосферы за счет их искусственной инжекции из радиационного пояса Земли при нагреве F2-области мощными радиоволнами. Эти электроны, как и в случае солнечной радиации, в результате их многократных столкновений с атомами и молекулами атмосферы могут также переводить их в высоковозбужденное ридберговское состояние. На следующем этапе, как и в рассмотренном выше естественном механизме, происходят их переходы в нижние энергетические состояния с излучением широкого спектра электромагнитных волн.

Исследование характеристик СВЧ-излучения. формирующегося на ионосферных высотах при модификации ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона, излучаемыми среднеширотным нагревным стендом СУРА, проводилось в 2014-2018 гг. Стенд излучал волны О-поляризации на частотах в диапазоне 4.3–6.8 МГц, как правило, в режиме [10-15 мин - излучение, 10-15 мин — пауза] с эффективной мощностью  $P_{ef} =$ = 80-180 МВт, величина которой увеличивается с ростом частоты ВН. Ширина диаграммы направленности антенны стенда СУРА, которая имеет размеры 300 м × 300 м составляет ~14° на частотах ВН ~5 МГц. Как правило, пучок мощных радиоволн в наших экспериментах излучался под углом 12° на юг от вертикали (в область "магнитного зенита"), чтобы увеличить эффективность модификации ионосферы [6, 13]. Следует отметить, что все рассматриваемые в работе измерения выполнялись в спокойных и очень спокойных геомагнитных условиях, когда значения суммарного индекса геомагнитной активности  $\Sigma K_p$  не превышали 20, причем спокойными были не только дни измерений, но и несколько предыдущих дней.

Измерения интенсивности СВЧ-радиоизлучения атмосферы осуществлялись с помощью спектральных радиометрических приемников модуляционного типа (радиометров) дециметрового диа-

	Значения		
ларактеристика приемника	$\lambda = 20 \text{ cm}$	$\lambda = 52 \text{ cm}$	
Частота приема, МГц	1350-1500	574	
Затухание вне полосы приема, дБ	~45	~35	
Количество каналов	10	1	
Полоса пропускания канала, МГц	15	5	
Интервал между каналами, МГц	15	—	
Флуктуационная чувствительность, К	0.20	0.15	
Частота модуляции, кГц	1	1	
Время интегрирования сигнала, с	1	1	
Ширина диаграммы направленности приемной антенны	14°	15°	

Таблица 2. Технические характеристики радиометрического комплекса

пазона волн на частотах  $f_1 = 1-2$  ГГц и  $f_2 = 574$  МГц. Технические характеристики радиометрического комплекса приведены в табл. 2. Комплекс размещался на территории стенда СУРА. Прием радиоизлучения осуществлялся на антенны рупорного и параболического типов. Измерения проводились при условии, что пространственная ориентация диаграмм направленности антенн радиометров и стенда СУРА совпадала. Калибровка принимаемого радиоизлучения в масштабе яркостных температур осуществлялась по двум источникам излучения, находящимся в дальней зоне антенн: температуре неба в зените ( $T_{\rm g} \approx 3$  К) и температуре поверхности земли с растительностью ( $T_{\rm g} \approx T_0$ , где  $T_0$  – приземная температура воздуха).

На рис. 3 и 4 представлены примеры регистрации интенсивности радиоизлучения атмосферы (в масштабе яркостных температур) в полосе спектрального канала  $f_1 = (1450 \pm 8) \text{ M}$ Гц, которому соответствует частота  $v_n = 1451.5$  МГц перехода между ридберговскими состояниями  $\{m = 166 \rightarrow$  $\rightarrow n = 165$ }. Частота ВН  $f_{\rm BH}$  была равна 4300 кГц для сеанса на рис. 3 и 5828 кГц для сеанса на рис. 4; в обоих случаях режим работы стенда был [10 мин – излучение, 10 мин – пауза] (или  $[\pm 10 \text{ мин}]$ ). Здесь и ниже на рисунках время работы стенда СУРА отмечено горизонтальными жирными отрезками линий вдоль оси времени. В первом случае (рис. 3) измерения проводились 8 сентября 2014 г. в послеполуденные часы. Была зарегистрирована минимальная из всех экспериментах пиковая интенсивность ридберговского излучения с  $\Delta T_{\rm g} \approx 9$  К. Во втором случае (рис. 4) эксперимент проводился 28 марта 2014 года в поздние вечерние часы. В этом случае была зарегистрирована максимальная пиковая интенсивность ридберговского излучения с  $\Delta T_{\rm g} \approx 43$  К.

Из рис. 3 и 4 видно, что интенсивность регистрируемого излучения сильно флуктуирует во времени. По данным измерений 28 марта 2014 г. после включения стенда в режиме [±10 мин] микроволновое излучение появляется только в третьем импульсе ВН с задержкой 7 мин относительно его начала, в четвертом импульсе эта задержка уже составляет 2 мин и излучение начинает регистрироваться практически сразу после включения пятого импульса ВН. Похожая динамика развития поглощения низкочастотных участков ветвей ионограмм наблюдалась нами в работах [39, 40].

За период исследований всего было выполнено 11 циклов воздействия мощным радиоизлучением стенда СУРА на ионосферу. Результаты радиометрических измерений интенсивности радиоизлучения ридберговских атомов и молекул верхней атмосферы приведены в табл. 3. В семи циклах зарегистрировано ридберговское излучение атомов и молекул верхней атмосферы в дециметровом диапазоне волн с пиковой интенсивностью  $\Delta T_{\rm g} \approx 10-26$  К в утренние и послеполуденные часы и до  $\Delta T_{\rm g} \approx 30-43$  К в поздние вечерние и ночные часы. Эти значения хорошо согласуются с полученными в работах [69, 70] результатами измерения интенсивности естественного спорадического излучения ионосферы во время солнечных вспышек и почти в 20-30 раз превышают результаты измерений интенсивности искусственного радиоизлучения ионосферы в дециметровом диапазоне длин волн, зарегистрированного в работе [76].

На рис. 5 приведен нормированный спектр интенсивности радиоизлучения атмосферы в диапазоне частот 1350–1500 МГц с разрешением 15 МГц, полученный 02.04.2015 г. при воздействии на ионосферу мощным радиоизлучением стенда СУРА на частоте волны накачки  $f_{\rm BH} = 6720$  кГц. В спектре хорошо различаются два спектральных максимума, совпадающие с частотами переходов между ридберговскими состояниями { $m = 169 \rightarrow \rightarrow n = 168$ } с  $v_n = 1375.35$  МГц и { $m = 166 \rightarrow n = 165$ } с  $v_n = 1451.5$  МГц. Отметим, что в исследуемом



**Рис. 3.** Интенсивность микроволнового радиоизлучения атмосферы в полосе спектрального канала  $f = (1450 \pm 8)$  МГц 08.09.2014 г. (на рис. 3 и 4 увеличение яркостной температуры отвечает направлению вниз).



**Рис. 4.** Интенсивность микроволнового радиоизлучения атмосферы в полосе спектрального канала  $f = (1450 \pm 8)$  МГц 28.03.2014 г.

диапазоне частот расположены пять ридберговских линий. Отсутствие выраженных спектральных особенностей для трех других линий можно объяснить меньшим количеством ридберговских атомов и молекул на данных уровнях, а также вероятностью переходов не только на соседний уровень, но и на любой другой нижележащий уровень с излучением на более высокой частоте, не попадающей в полосу приемника. Подводя итоги выполненным исследованиям можно заключить, что обнаружен новый канал воздействия на нейтральную атмосферу Земли через генерацию микроволнового излучения, которое является результатом высвечивания возбужденных до ридберговских состояний нейтральных атомов и молекул энергичными электронами, инжекция которых на ионосферные высоты стимулируется модификацией ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона. Определены

Дата, время	f <sub>BH</sub> , кГц (foF2, МГц) [режим работы]	Высота отражения волны накачки <i>h</i> <sub>отр</sub> , км	Интенсивность радиоизлучения (пиковая) $\Delta T_{\rm s}$ , К
27.03.2014,	$5828 \ (7.2 \rightarrow 6.4)$	$240 \rightarrow 270$	~30
21:21-22:11	[+9 мин, -1 мин]		
28.03.2014,	$5828 \ (8.4 \rightarrow 6.5)$	$220 \rightarrow 255$	~43
20:28-22:23	[±10 мин]		
29.03.2014,	4300 (5.6)	260	~38
00:50-01:10	[несущая]		
08.09.2014,	4300 (-)	$155 \rightarrow 185$	~9
14:10-15:20	[±10 мин]		
02.04.2015,	$6720~(8.2 \rightarrow 6.9)$	$220 \rightarrow 285$	~23
17:53-20:33	[+10 мин, —5мин]		
29.08.2018,	4300 (4.5)	195	~20
10:01-12:50	[14 мин в режиме (±30 с),		
	—16 мин]		
30.08.2018,	4300 (4.9)	175	~26
09:30-12:00	[+14 мин, —16 мин]		

Таблица 3. Результаты измерений радиоизлучения атмосферы на частотах  $f_1 = (1450 \pm 8)$  МГц (N = 1-5) и  $f_2 = (574 \pm 3)$  МГц (N = 6,7)

характеристики микроволнового радиоизлучения верхней атмосферы, обусловленного излучением ридберговских атомов и молекул с главным квантовым числом n = 163-169 и n = 225 (дециметровый диапазон длин волн). Интенсивность радиоизлучения составила 10–45 К с бо́льшими ее значениями в поздние вечерние и ночные часы, когда имеет место наиболее эффективное взаимодействие мощной радиоволны с плазмой F2-области ионосферы,



**Рис. 5.** Зависимость нормированной спектральной интенсивности микроволнового излучения в диапазоне 1350–1500 МГц.

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

приводящее к ускорению электронов до сверхтепловых энергий [6, 13] и к высыпанию энергичных электронов из радиационного пояса Земли на ионосферные высоты [39–41]. Интенсивность обнаруженного микроволнового радиоизлучения сравнима с интенсивностью такого радиоизлучения, генерируемого при солнечных вспышках.

Важно отметить, что микроволновая составляющая ридберговского излучения практически без потерь (за исключением нескольких выделенных полос поглощения в атмосфере) распространяется вниз до земной поверхности, оказывая свое влияние на проходящие в ионосфере, мезосфере и тропосфере процессы. Отметим, что на тропосферных высотах микроволновое излучение может влиять на погодно-климатические процессы через трехступенчатый триггерный механизм солнечно-магнитосферных – погодно-климатических связей, который включает в себя [77–80]:

1) трансформацию в ионосфере потока энергичных электронов радиационного пояса Земли (как фактора влияния солнечной и геомагнитной активности) через возбуждение и высвечивание ридберговских состояний всех ионосферных компонентов в поток микроволновом диапазоне, которые легко доходят до Земной поверхности, и являются триггером для развития ряда тропосферных процессов;

2) рост концентрации водных кластеров на тропосферных высотах, образующихся из паров воды под воздействием микроволнового излучения;

3) образование облачности в присутствии кластеров, которая пропускает солнечное излучение в тропосферу и препятствует уходу теплового излучения подстилающей земной поверхности в космос, оказывая тем самым влияние на тепловой баланс тропосферы.

Этот механизм эффективно работает как в условиях естественной солнечной активности и геомагнитной возмущенности околоземного космического пространства, где каждая его ступень была подтверждена экспериментально, так и при антропогенном характере возмущений, включая и модификацию ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона. Существование такого физического механизма воздействия факторов солнечной и геомагнитной активности на свойства тропосферы и приземного слоя атмосферы обсуждается, например, в работах [81–85].

#### 3.4. Влияние нагрева ионосферной плазмы мощными радиоволнами на содержание озона на мезосферных высотах

Мезосфера Земли, расположенная на высотах 50-90 км, до сих пор остается наименее исследованной частью средней атмосферы. Отличительные особенности этой области – большая плотность нейтральных частиц и наличие слабоионизованной плазмы, в которой присутствуют различного рода положительные и отрицательные ионы и ионы-связки, образующиеся в результате сложных ионизационных и рекомбинационных физико-химических процессов (см., например, работы [9, 35, 86] и цитируемую в них литературу). При существующей сложности этих процессов количество возможных методов ее исследования весьма ограничено. Поэтому поиск новых подходов к изучению ее свойств и характеристик остается и сегодня актуальной задачей.

В настоящем разделе работы рассматриваются результаты изучения влияния контролируемого нагрева ионосферы мощными радиоволнами КВдиапазон на характеристики микроволнового излучения в линии озона на частоте 110836.04 МГц. В данном случае озон выступает в качестве индикатора, показывающего влияние КВ-нагрева на состояние атмосферы Земли на высотах 50–60 км. Эти эксперименты проводились на среднеширотном нагревном стенде СУРА в 2008–2016 гг. Уже в первых экспериментах было обнаружено сильное влияние нагрева на измеряемую интенсивность микроволнового излучения на частотах вблизи максимума спектральной линии озона, которое формируется на этих высотах [87–90].

Представленные ниже результаты измерений вариаций интенсивности излучения в линии озона из верхней атмосфере были получены методом наземной микроволновой радиометрии и основаны на регистрации интенсивности теплового излучения атмосферы в линии вращательного перехода озона с последующим анализом формы его спектра. Согласно существующим на время проведения экспериментов представлениям, измерения были организованы таким образом, чтобы обеспечить наиболее сильное возмущение ионосферы на высотах ее D-области. Нагревный стенд излучал под углом 12° от зенита на юг мощную радиоволну, как правило, на минимально возможной для стенда частоте  $f_0 = 4.3$  МГц; эффективная мощность излучения составляла  $P_{ef} = 80$  MBт. Для нагрева ионосферы использовались радиоволны как Х-, так и О-поляризаций. Включение стенда осуществлялось в периодическом режиме [±15 мин] или [±30 мин]. В одном сеансе измерений излучалось от 3 до 6 таких импульсов ВН. Такой режим был выбран, исходя из возможностей микроволнового озонометра, когда за время 15 мин можно было получить с необходимым разрешением один спектр атмосферной линии озона.

В направлении пучка мощных радиоволн (иногда и в сторону от него) была ориентирована антенна мобильного микроволнового озонометра для приема теплового излучения средней атмосферы на частоте 110.83604 ГГц. Описание озонометра и его характеристик приведено в работах [87, 90]. Ширина диаграммы направленности его рупорной антенны по уровню -3 дБ составляет 5.4°. При этом диаметр области атмосферы, из которой регистрировалось микроволновое излучение, составляет ~6 км на высоте 60 км, что приблизительно в 3 раза меньше размеров возмущенной мощной радиоволной D-области (~16 км по уровню половинной мощности излучения пучка мощных радиоволн). В наблюдениях был использован метод абсолютной калибровки по двум эталонам излучения, один из которых находился при температуре окружающего воздуха, а другой – при температуре кипения жидкого азота.

Параметры прибора позволяют измерять спектр линии излучения с точностью ~2%. По измеренному единичному спектру можно восстановить вертикальное распределение озона в интервале высот 20–60 км с точностью не хуже чем 5%.

Результаты выполненных измерений показали, что во время нагрева обнаруживается уменьшение интенсивности теплового излучения атмосферы в линии озона на частоте 110.83604 ГГц [69, 72]. На рис. 6 приведены результаты измерений интенсивности атмосферной линии озона, приведенных 14 марта 2009 г., которые продолжались с 10:00 до 24:00 мск. Во время этих измерений с 11:30 до 15:00 мск (в часы, близкие к полуденным) осуществлялась модификация ионосферы в режиме [±30 мин]. Мощная волна *Х*-поляризации излучалась на частоте 4300 кГц с эффективной мощностью  $P_{ef} \approx 80$  МВт. Измерения интенсивности линии озона, усредненные за время нагрева ионосферы мощным КВ-радиоизлучением, показаны на рисунке черными прямоугольника-



**Рис. 6.** Результаты измерений интенсивности теплового излучения атмосферы в линии озона, выполненные 14 марта 2009 г. Интенсивность выражена в неперах (Нп) по отношению к интенсивности солнечного излучения на высоте верхней границы нейтральной атмосферы.

ми, а за время паузы излучения ВН – белыми прямоугольниками. Величина уменьшения интенсивности излучения сильно изменяется от импульса к импульсу ВН. Из полученных в этих измерениях спектральных данных следует, что нагрев ионосферы приводит к заметному понижению интенсивности излучения в линии озона на малых отстройках ( $|\Delta f| \le 40 \text{ М} \Gamma \mu$ ) относительно центральной частоты линии и тем больше, чем меньше величина отстройки (см. [90]). Отметим, что именно излучение мезосферного озона дает наибольший вклад в эту часть спектральной линии. Было получено, что после выключения ВН интенсивность излучения восстанавливается за время, меньшее 15 мин, и даже до немного больших величин, чем его значения в отсутствие нагрева. Среднее по всем сеансам измерений уменьшение интегральной интенсивности микроволнового излучения в линии озона составляло ~10% (при точности ее измерения 2%).

Дополнительно на рис. 6 сплошными горизонтальными линиями показаны средние значения интенсивности линии озона для дня и ночи в отсутствие нагрева ионосферы мощными радиоволнами. Видно, что средние ночные величины измеренного содержания озона на высоте ~60 км превышают его дневные значения, отражая обычно наблюдаемые его суточные вариации. Средняя амплитуда суточного изменения рассчитанного содержания мезосферного озона в этом случае составила 42%, что близко к обычно наблюдаемому его значению и является подтверждением правильности проводимых озонометрических измерений.

В проведенных в марте 2011 г. измерениях было установлено, что в диапазоне мощностей ВН  $P_{ef} = 40-80$  МВт величина уменьшения интенсивности излучения возрастает пропорционально  $P_{ef}$ . Также было показано, что указанный эффект наблюдается не только в модифицированной области мезосферы, но и на расстоянии ~110 км к югу от нее (для этого были проведены измерения с наклоном диаграммы направленности озонометра на 70° от вертикали на юг).

В сентябре 2016 г. на стенде СУРА были выполнены измерения интенсивности излучения атмосферы в линии озона, которые сопровождались диагностикой состояния нижней ионосферы в интервале высот 50—130 км с помощью метода резонансного рассеяния радиоволн на искусственных периодических неоднородностях (ИПН) ионосферной плазмы [88]. Уменьшение интенсивности во время нагрева составляло до 9%, что соответ-

ствовало уменьшению концентрации озона на высотах ~60 км в среднем на 19%. Диагностика нижней ионосферы методом ИПН показала, что в день измерений содержания озона, когда возмущение ионосферы проводилось в режиме  $[\pm 30 \text{ мин}]$ , на высотах ~55 км и выше наблюдались рост интенсивности неоднородностей электронной концентрации при воздействии мощной радиоволной КВ-диапазона на ионосферу и общее увеличение возмущенности нижней ионосферы. Также на этих высотах регистрировались значительные вариации скорости вертикального движения среды. Все это указывает на наблюдающееся сильное возмущение нижней ионосферы во время длительного, 30-минутного ее нагрева мощными ралиоволнами.

При интерпретации наблюдаемого уменьшения интенсивности излучения в линии озона следует принимать во внимание, что крайне низкое содержание электронов в D-области по сравнению с концентрацией нейтральных компонент (степень ионизации здесь составляет ~10<sup>-9</sup>) считается маловероятным прямое влияние увеличения температуры электронов в поле мощной радиоволны на свойства нейтральной компоненты атмосферы. Кроме того, важным обстоятельством является то, что этот эффект обнаруживается и на 110 км южнее области модификации нижней ионосферы пучком мошных радиоволн (эксперименты с наклоном диаграммы направленности озонометра на 70° на юг). Из этого следует, что непосредственный нагрев D- и E-слоев ионосферы пучком мощных радиоволн не является его причиной. Поэтому возникает задача выяснения механизма воздействия модифицированной мощной радиоволной ионосферы на нейтральную компоненту атмосферы (в нашем случае – на мезосферный озон).

В качестве возможного объяснения изменения интенсивности микроволнового излучения в линии озона при начале излучения мощных радиоволн нагревным стендом СУРА в работе [89] был предложен механизм, основанный на изменении плотности и температуры атмосферы при распространении внутренних гравитационных волн (ВГВ), возбуждаемых (усиливаемых) при нагреве ионосферы мощной радиоволной КВ-диапазона. Факт возбуждения (усиления) ВГВ при работе стенда СУРА был установлен экспериментально [55, 57]. Независимо от способа возбуждения ВГВ при их распространении в атмосфере изменяются ее плотность  $\rho$ , давление *р* и температура *T*. В работе [90] дана оценка величины возмущения давления  $\Delta p$  атмосферы при эффективной мощности излучения стенда  $P_{ef} = 80$  MBr. На высоте 110 км оно может достигать регистрируемых значений  $\Delta p \approx 10^{-2} p_0$ . Оценка относительного изменения интенсивности излучения в этом случае в максимуме линии озона может составлять от одного до нескольких процентов, что соответствует результатам измерений. Однако предложенную интерпретацию наблюдаемого уменьшения интенсивности излучения в линии озона при облучении ионосферы мощным КВ-радиоизлучением сегодня еще нельзя считать полностью разработанной и удовлетворяющей всем особенностям наблюдаемого явления.

Выполненные в последние годы экспериментальные исследования позволили предложить иную, связанную с нагревом ионосферы схему подавления интенсивности генерации микроволнового излучения в линии озона на мезосферных высотах. Следуя результатам работ [91–95], энергичные электроны с  $E \approx 100-200$  кэВ при их высыпании на ионосферные высоты проникают на высоты мезосферы  $h \approx 60 - 80$  км, где они через соударения с нейтральными атомами и молекулами приводят к образованию молекул окиси азота NO и гидроксила НО. Эти молекулы, вступая в реакцию с молекулами озона, разрушают их, уменьшая тем самым его содержание на мезосферных высотах. Уменьшение содержания озона может при этом достигать десятков процентов в широкой области пространства, подверженной влиянию высыпаюшихся энергичных электронов. Такой процесс хорошо известен в полярной ионосфере как азотный и водородный циклы физикохимических реакций, влияющих на содержание озона на мезосферных высотах (см., например, [91, 95]). В нашем случае энергичные электроны с энергиями Е до 100-150 кэВ появляются на мезосферных высотах за счет их искусственной инжекции из радиационного пояса Земли при модификации F2-слоя ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона. Поскольку измеренное время вариаций содержания озона при нагреве ионосферной плазмы меньше 15 мин, главное влияние должны оказывать молекулы НО, которые доминируют на высотах 40-60 км и имеют на высотах 50-60 км короткое время жизни: секунды-минуты, в сравнении с намного более долгоживущими молекулами NO [93, 94].

Можно также рассматривать и другие схемы, объясняющие уменьшение интенсивности излучения вращательной спектральной линии озона. Как указывалось выше, при воздействии на ионосферу мощным КВ-радиоизлучением реализуется два механизма образования высокоэнергичных электронов: 1) ускорение электронов в областях с интенсивной плазменной турбулентностью с образованием сверхтепловых электронов с энергиями до 5–30 эВ; 2) механизм высыпания высокоэнергичных электронов из радиационных поясов с энергиями до 100 кэВ и выше. При соударении этих энергичных электронов с нейтральными атомами и молекулами, в том числе и с озоном, происходит их возбуждение вплоть до ионизации, а в случае соударений с молекулами возможна еще и их диссоциация с энергией диссоциации около 1 эВ, в результате которой молекула озона  $O_3$  распадается на  $O_2$  и О. Естественно, что после диссоциации молекулы озона ее вклад в спектр излучения исчезает. Интенсивность коллективного излучения мезосферного озона во всех спектральных линиях при этом уменьшится.

Для разработки детальной модели влияния модификации ионосферной плазмы мощными радиоволнами на содержание озона на мезосферных высотах требуется дальнейшее проведение экспериментальных и теоретических исследований. В экспериментальном плане для получения требуемой информации в первую очередь, необходимо выполнить измерения при различных поляризациях ВН, поскольку эффект уменьшения содержания озона на мезосферных высотах наблюдается при модификации ионосферы мощными радиоволнами обеих поляризаций, в то время как высыпание энергичных электронов и ускорение электронов до сверхтепловых энергий сегодня надежно установлены и изучены только при нагреве ионосферы волнами О-поляризации. Необходимо также определить характеристики эффекта уменьшения содержания озона в разное время суток, при различном уровне геомагнитной активности и при разных режимах импульсного излучения мощной радиоволны. Важно также измерить, по возможности как можно точнее, характерные времена уменьшения и восстановления интенсивности излучения в линии озона после включения и выключения ВН. Все это позволит более подробно изучить свойства наблюдаемого явления уменьшения содержания озона на высотах ~60 км во время модификации ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона, построить более полную его эмпирическую модель. обосновать теоретические представления наблюдаемого явления и в конечном итоге развить новые методы диагностики мезосферы Земли. Здесь, например, стоит задача исследования возможного влияния на рекомбинационные процессы в D-области ионосферы малых составляющих ионосферы, в частности озона. Необходимо более детально изучить влияние изменения температуры электронов и нейтральной компоненты на фотохимические и рекомбинационные процессы, а также на характеристики турбулентной диффузии, определяющие свойства нижней ионосферы, включая излучательную способность различных атомов и молекул. Нагревные эксперименты благодаря своей хорошей повторяемости и дозируемости вносимых в атмосферу определенных возмущений могут сыграть здесь определяющую роль.

В заключение отметим, что при анализе данных по искусственной инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли в ионосферу необходимо принимать во внимание результаты исследований свойств их естественной инжекции (см., например, [96—99]), поскольку в них порой содержится очень важная дополнительная информация для понимания наблюдающихся в нагревных экспериментах явлений.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведенные в работе результаты показывают, что искусственная инжекция энергичных электронов из радиационного пояса Земли на ионосферные высоты, вызванная модификацией F2-слоя ионосферы мощными радиоволнами КВ-диапазона, имеет сильное и легкообнаружимое свое влияние на генерацию и характеристики различных компонент ИИТ и может рассматриваться как вторичный источник модификации атмосферы Земли для генерации искусственных возмушений ее ионизированной и нейтральной компонент на больших расстояниях от нагревного стенда. Это обуславливает интерес к такого рода исследованиям и необходимость их дальнейшего продолжения и развития, поскольку здесь открываются широкие возможности для изучения влияния энергичных электронов на характеристики приземного слоя атмосферы Земли, изучение характеристик которого еще далеко от завершения. Как было продемонстрировано в работе, агентами такого влияния могут служить:

1) ионизация атомов и молекул атмосферы на высотах 60–120 км, которая приводит к увеличению поглощения радиоволн НЧ–СВ–КВ-диапазонов, проходящих через эту область, и влияет на характеристики физико-химических процессов на мезосферных высотах;

2) изменение содержания озона в мезосфере, что влияет на высотные характеристики распределения ультрафиолетового излучения в атмосфере и приводит к изменению ее теплового баланса;

 генерация микроволнового излучения, которое оказывает влияние на механизмы конденсации водяного пара в приземной атмосфере и образование водных кластеров (конденсационно-кластерный механизм);

4) возмущение глобальной электрической цепи за счет генерации электрических токов на ионосферных высотах, что может иметь различные проявления.

В дополнение к вышесказанному в работах [29, 81] рассматривается возможность использования искусственного высыпания энергичных электронов, стимулированного работой нагревного стенда, для очистки в случае необходимости от них радиационного пояса Земли.

Много других примеров возможного влияния стимулированных нагревом ионосферы высыпаний энергичных электронов на различные области атмосферы Земли, включая воздействие на химико-физические процессы и на климат, можно найти в публикациях [8, 16, 35, 55, 83–85]. Все они демонстрируют существование воздействия солнечной и геомагнитной активности на погодно-климатические характеристики. Многие аспекты этой проблемы еще только предстоит исследовать. Эксперименты, связанные с модификацией ионосферы Земли мощными радиоволнами КВдиапазона, могут внести значительный вклад в эти исследования.

Авторы благодарят сотрудников стенда СУРА (НИРФИ, ННГУ) за помощь в организации и проведении экспериментов и КазФУ – за возможность использования данных казанского цифрового ионозонда.

Рассматриваемые в работе исследования искусственной инжекции энергичных электронов из радиационного пояса Земли на ионосферные высоты и их влияние на атмосферные процессы были выполнены В.Л. Фроловым на стенде СУРА при финансовой поддержке Российским фондом фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 20-05-00166. Исследования А.В. Троицкого выполнялись в рамках базовой части госзадания Министерства науки и высшего образования РФ (проект 0729-2020-0057). Исследования Ю.Ю. Куликова выполнялись при финансовой поддержке Российским фондом фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 18-45-520009. Работа в части использования казанского ионозонда "Циклон" выполнялась А.Д. Акчуриным (КазФУ, Казань) и В.Л. Фроловым за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета ("ПРИОРИТЕТ-2030").

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Gurevich A.V.* Nonlinear phenomena in the ionosphere. N.Y.: Springer, 1978.
- Duncan L.M., Gordon W.E. // J. Atmos. Terr. Phys. 1982. V. 44. № 12. P. 1009.
- 3. *Stubbe P., Kopka H., Lauche H. et al.* // J. Atmos. Terr. Phys. 1982. V. 44. № 12. P. 1025.
- Фролов В.Л., Бахметьева Н.В., Беликович В.В. и др. // УФН. 2007. Т. 177. № 3. С. 330.
- 5. *Фролов В.Л.* Искусственная турбулентность среднеширотной ионосферы. Нижний Новгород: ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2017.
- Streltsov A.V., Berthelier J.J., Chernyshov A.A. et al. // Space Sci. Rev. 2018. V. 214. 118.
- 7. Demekhov A.G., Trakhtengerts V.Y., Mogilevsky M.M. et al. // Adv. Space Res. 2003. V. 32. № 3. P. 355.
- Parrot M., Zaslavski Y. // Surv. Geophys. 1996. V. 17. № 1. P. 67.

- 9. Брюнелли Б.Е., Намгаладзе А.А. Физика ионосферы. М.: Наука, 1988.
- 10. Дёмин М.Г. Ионосфера Земли. Плазменная гелиогеофизика. Т. 2. М.: Физматлит, 2008.
- 11. Ратклифф Дж. Введение в физику ионосферы и магнитосферы. М.: Мир, 1975.
- 12. *Blaunstein N., Plohotniuc E.* Ionosphere and Applied Aspects of Radio Communication and Radar. Boca Raton: CRC Press, 2008.
- *Гуревич А.В.* Нелинейные явления в ионосфере // УФН. 2007. Т. 177. № 11. С. 1145.
- 14. *Ерухимов Л.М., Генкин Л.Г.* // Изв. вузов. Радиофизика. 1992. Т. 35. № 11–12. С. 863.
- Stubbe P., Hagfors T. // Surv. Geophys. 1997. V. 18. № 1. P. 57.
- Leyser T.B., Wong A.Y. // Rev. Geophys. 2009. V. 47. № 1. RG1001.
- 17. *Гуревич А.В., Шлюгер И.С. //* Изв. вузов. Радиофизика. 1975. Т. 18. № 9. С. 1237.
- 18. Ютло У., Коэн Р. // УФН. 1973. Т. 109. № 2. С. 371.
- 19. Special issue // Radio Sci. 1974. V. 9. № 11.
- 20. *Ерухимов Л.М., Метелев С.А., Мясников Е.Н. и др. //* Изв. вузов. Радиофизика. 1987. Т. 30. № 2. С. 208.
- 21. Фролов В.Л., *Panonopm B.O., Шорохова Е.А. и др. //* Изв. вузов. Радиофизика. 2016. Т. 59. № 3. С. 198.
- 22. Vartanyan A., Milikh G.M., Mishin E. et al. // J. Geophys. Res. 2012. V. 117. № A10. A10307.
- 23. Lukianova R.Y., Frolov V.L., Ryabov A.O. // Geophys. Res. Lett. 2019. V. 46. № 22. P. 12731.
- Фролов В.Л., Лукьянова Р.Ю., Рябов А.О. и др. // Космич. исслед. 2021. Т. 59. № 4. С. 275.
- 25. Беликович В.В., Грач С.М., Караштин А.Н. и др. // Изв. ВУЗов. Радиофизика. 2007. Т. 50. № 7. С. 545.
- 26. *Gamble R.J., Rodger C.J., Clilverd M.A. et al.* // J. Geophys. Res. 2008. V. 113. № A10. A10211.
- 27. *Helliwell R.A.* // Space Sci. Rev. 1974. V. 15. № 6. P. 781.
- 28. Kulkarni P., Inan U.S., Bell T.F. et al. // J. Geophys. Res. 2008. V. 113. № A7. A07214.
- 29. Inan U.S., Golkovski M., Carpenter D.L. et al. // Geophys. Res. Lett. 2004. V. 31. № 24. L24805.
- 30. *Platino M., Inan U.S., Bell T.F. et al.* // Geophys. Res. Lett. 2006. V. 33. № 16. L16101.
- 31. *Piddyachiy D., Bell T.F., Berthelier J.J. et al.* // J. Geophys. Res. 2011. V. 116. № A6. A06304.
- 32. *Благовещенская Н.Ф.* Геофизические эффекты активных воздействий в околоземном космическом пространстве. СПб: Гидрометеоиздат, 2002.
- 33. *Blagoveshchenskaya N.F.* // Radio Sci. Bull. 2020. V. 2020. № 373. P. 40.
- 34. *Sauvaud J.A., Moreau T., Maggiolo R. et al.* // Planet. Space. Sci. 2006. V. 54. № 5. P. 502.
- Криволуцкий А.А., Репнев А.И. Воздействие космических факторов на озоносферу Земли. М.: ГЕОС, 2009.
- 36. *Lam M.M., Horne R.B., Meredith N.P. et al.* // J. Geophys. Res. 2010. V. 115. № A4. A00F08.

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

- 37. The National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA); www.noaa.gov
- 38. *Ластовичка Я.* // Геомагнетизм и аэрономия. 1980. Т. 20. № 5. С. 880.
- Фролов В.Л., Акчурин А.Д., Болотин И.А. и др. // Изв. вузов. Радиофизика. 2019. Т. 62. № 9. С. 641.
- 40. *Рябов А.О., Фролов В.Л., Акчурин А.Д. //* Изв. вузов. Радиофизика. 2020. Т. 63. № 4. С. 285.
- 41. *Фролов В.Л., Рябов А.О., Акчурин А.Д.* // Космич. исслед. 2022. Т. 60. № 4. С. 285.
- 42. *Horne R.B., Lam M.M., Green J.C.* // Geophys. Res. Lett. 2009. V. 36. № 19. L19104.
- Скребкова Л.А. // Геомагнетизм и аэрономия. 1975. Т. 15. № 4. С. 664.
- 44. Leyser T.B. // Space Sci. Rev. 2001. V. 98. № 3–4. P. 223.
- 45. Borisov N.D. // Phys. Lett. A. 1995. V. 206. № 3–4. P. 240.
- Camporeale E., Delzanno G.L., Colestock P. // J. Geophys. Res. 2012. V. 117. № A10. A10315.
- Eliasson B., Papadopoulos K. // J. Geophys. Res. 2008.
  V. 113. № A9. A093315.
- 48. James H.G., Inan U.S., Rietveld M.T. // J. Geophys. Res. 1990. V. 95. № A8. P. 187.
- 49. Беляев П.П., Котик Д.С., Митяков С.Н. и др. // Изв. вузов. Радиофизика. 1987. Т. 30. № 2. С. 248.
- 50. *Stubbe P.* // J. Atmos. Terr. Phys. 1996. V. 58. № 1–4. P. 349.
- 51. Беспалов В.А., Трахтенгерц В.Ю. // Вопр. теории плазмы. 1980. № 10. С. 88.
- 52. *Мишин Е.В., Ружин Ю.А., Телегин В.А.* Взаимодействие электронных потоков с плазмой. Л.: Гидрометеоиздат, 1989.
- Rapoport V.O., Frolov V.L., Polyakov S.V. et al. // J. Geophys. Res. 2010. V. 115. № A10. A10322.
- 54. *Pasmanirk D.L., Demekhov A.G.* // J. Geophys. Res. Space Phys. 2017. V. 122. № 8. P.8124.
- 55. Черногор Л.Ф. Физика мощного радиоизлучения в геокосмосе. Харьков: ХНУ им. В.Н. Каразина, 2014.
- 56. Potemra T.A., Zmuda A.J. // J. Geophys. Res. 1970. V. 75. № 34. P. 7161.
- 57. Черногор Л.Ф., Гармаш К.П., Фролов В.Л. // Изв. вузов. Радиофизика. 2019. Т. 62. № 6. С. 440.
- Utlaut W.F., Violette E.J. // Radio Sci. 1974. V. 9. № 11. P. 895.
- Milikh G.M., Demekhov A., Vartanyan A. et al. // Geophys. Res. Lett. 2012. V. 39. № 10. L10102.
- 60. Демехов А.Г. // Изв. вузов. Радиофизика. 2022. Т. 65. № 2.
- 61. *Васьков В.В., Беляев П.П., Будько Н.И. и др.* // Геомагнетизм и аэрономия. 1993. Т. 33. № 6. С. 91.
- 62. Костин В.М., Романовский Ю.А., Чмырев В.М. и др. // Космич. исслед. 1993. Т. 31. № 1. С. 84.
- 63. Vaskov V.V., Budko N.I., Kapustina O.V. et al. // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 1998. V. 60. № 12. P. 1261.

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

- 64. Фролов В.Л., Рябов А.О., Болотин И.А. // Тез. докл. XVII ежегодн. конф. "Физика плазмы в солнечной системе". М.: ИКИ, 2022. С. 178.
- 65. *Basu Sun., MacKenzie E., Basu Sant. et al.* // Radio Sci. 1983. V. 18. № 6. P. 1151.
- 66. Wright J.W. // J. Geophys. Res. 1975. V. 80. № 31. P. 4383.
- 67. Бенедиктов Е.А., Коробков Ю.С., Митяков Н.А. и др. // Изв. вузов. Радиофизика. 1960. Т. 3. № 6. С. 957.
- Rietveld M.T., Kosch M.J., Blagoveshchenskaya N.F. et al. // J. Geophys. Res. 2003. V. 108. № A4. P. 1141.
- 69. Троицкий В.С., Бондарь Л.Н., Стародубцев А.М. // ДАН СССР. 1973. Т. 212. № 3. С. 719.
- 70. *Троицкий В.С., Стародубцев А.М., Бондарь Л.Н. и др. //* Изв. вузов. Радиофизика. 1973. Т. 16. № 3. С. 323.
- 71. Бондарь Л.Н., Стрежнева К.М., Троицкий В.С. // Астрон. вестн. 1975. Т. 9. № 4. С. 210.
- 72. *Мусатенко С.И.* // Геомагнетизм и аэрономия. 1980. Т. 20. № 5. С. 884.
- Авакян С.В. // Тез. докл. Междунар. конф. по физике солнечно-земных связей. Алматы: Наука, 1994. С. 3.
- 74. *Авакян С.В., Серова А.Е., Воронин Н.А.* // Геомагнетизм и аэрономия. 1997. Т. 37. № 3. С. 99.
- 75. *Сороченко Р.Л.* // Физика космоса. М.: Физматлит, 2003.
- 76. Grach S.M., Fridman V.M., Lifshits L.M. et al. // Ann. Geophys. 2002. V. 20. № 10. P. 1687.
- 77. Авакян С.В., Воронин Н.А. // Исслед. Земли из космоса. 2007. № 2. С. 28.
- Авакян С.В., Воронин Н.А. // Геомагнетизм и аэрономия. 2008. Т. 48. № 4. С. 435.
- 79. Авакян С.В., Воронин Н.А. // Оптич. журн. 2008. Т. 75. № 10. С. 95.
- Roberts W.O. // Proc. Sympos./Workshop on Solar-Terrestrial Influences on Weather and Climate / Eds. McCormac B.M., Seliga T.A. Dordrecht: D. Reidel Publishing Company, 1979. P. 29.
- Marshall R.F., Cully C.M. // The Dynamic Loss of Earth's Radiation Belts. Ch. 7 / Eds. Jaynes A.N., Usanova M.E. Amsterdam: Elsevier, 2020. P. 199.
- 82. *Gombosi T.I., Baker D.N., Balogh A. et al.* // Space Sci. Rev. 2017. № 212. P. 985.
- Rozanov E., Calisto M., Egorova T. et al. // Surv. Geophys. 2012. V. 33. № 3–4. P. 483.
- Semeniuk K., Fomichev V.I., McConnel J.C. et al. // Atmos. Chem. Phys. 2011. V. 11. № 10. P. 5045.
- 85. Arsenovic P., Rozanov E., Stenke A. et al. // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 2016. V. 149. P. 180.
- Данилов А.Д. Популярная аэрономия. Л.: Гидрометеоиздат, 1989.
- Куликов Ю.Ю., Фролов В.Л. // Хим. физика. 2013. Т. 32. № 11. С. 26.
- Андрианов А.Ф., Бахметьева Н.В., Вяхирев В.Д. и др. // Изв. вузов. Радиофизика. 2019. Т. 62. № 5. С. 366.
- 89. Куликов Ю.Ю., Фролов В.Л., Григорьев Г.И. и др. // Геомагнетизм и аэрономия. 2013. Т. 53. № 1. С. 102.

- 90. Куликов Ю.Ю., Григорьев Г.И., Красильников А.А. и др. // Изв. вузов. Радиофизика. 2012. Т. 55. № 4. С. 57.
- 91. *Sinnhuber M., Funke B.* // The Dynamic Loss of Earth's Radiation Belts. Ch. 9 / Eds. Jaynes A.N., Usanova M.E. Amsterdam: Elsevier, 2020. P. 279.
- 92. Andersson M.E., Verronen P.T., Rodger C.J. et al. // Nat. Commun. 2014. V. 5. 5197.
- 93. *Pickett H.M., Read W.G., Lee K.K. et al.* // Geophys. Res. Lett. 2006. V. 33. № 19. L19808.
- 94. *Pickett H.M., Drouin B.J., Canty T. et al.* // J. Geophys. Res. 2008. V. 113. № D16. D16S30.

- 95. Verronen P.T., Rodger C.J., Clilverd M.A. et al. // J. Geophys. Res. 2011. V. 116. № D7. D07307.
- 96. Голубков Г.В., Дмитриев А.В., Суворова А.В. и др. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 10. С. 72.
- 97. Голубков М.Г., Суворова А.В., Дмитриев А.В. и др. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 10. С. 69.
- 98. Голубков М.Г., Дмитриев А.В., Суворова А.В. и др. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 5. С. 84.
- 99. Dmitriev A.V., Suvorova A.V., Ghosh S. et al. // Atmosphere. 2022. V. 13. № 2. 322.

## ——— ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА АТМОСФЕРНЫХ ЯВЛЕНИЙ —

УДК 551.510.536

# ВЕРТИКАЛЬНЫЕ ДВИЖЕНИЯ ПЛАЗМЫ В ДИНАМИКЕ МЕЗОСФЕРЫ И НИЖНЕЙ ТЕРМОСФЕРЫ ЗЕМЛИ

## © 2022 г. Н. В. Бахметьева<sup>1\*</sup>, И. Н. Жемяков<sup>1</sup>

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

> \**E-mail: nv\_bakhm@nirfi.unn.ru* Поступила в редакцию 21.04.2022; после доработки 10.05.2022; принята в печать 20.05.2022

Вертикальные движения среды в мезосфере и нижней термосфере являются одними из ключевых факторов атмосферной динамики. В работе обсуждаются результаты исследования вертикальных движений как части динамики ионосферы на высотах 60–130 км на основе измерений параметров ее ионизованной и нейтральной компонент методом резонансного рассеяния радиоволн на искусственных периодических неоднородностях плазмы, создаваемых при воздействии на ионосферу мошным высокочастотным радиоизлучением. Приведены результаты измерения скорости вертикального движения плазмы (далее – вертикальной скорости) в разных природных условиях. Получено, что ее средние значения в основном составляют несколько м/с. Продемонстрирована роль вертикального переноса в высотно-временны́х вариациях температуры и плотности нейтральной атмосферы в указанном интервале высот. Приведены параметры атмосферных волн, полученные на основе этих вариаций. Исследовано влияние вариаций вертикальной скорости на образование спорадического E-слоя (E<sub>s</sub>). Во многих случаях смена направления вертикальной скорости имела место на высоте образования слоя, а величина ее высотного градиента достаточна для образования среднеширотных Е<sub>x</sub>-слоев, наблюдавшихся в экспериментах на нагревном стенде СУРА (56.1°N, 46.1°E). Исследование атмосферной турбулентности ниже уровня турбопаузы показало, что скорости турбулентного движения на высотах мезосферы – нижней термосферы могут быть сопоставимы со скоростью регулярного вертикального движения среды.

*Ключевые слова:* атмосфера Земли, ионосфера, искусственные периодические неоднородности, скорость, температура, акустико-гравитационные волны, спорадические слои. **DOI:** 10.31857/S0207401X2210003X

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Вертикальные движения плазмы и нейтральной компоненты на высотах мезосферы и нижней термосферы все еще наименее изучены. Вертикальные движения (или вертикальный ветер) являются одной из составляющих общей циркуляции атмосферы. Этот тип движений имеет важное значение для динамики, электродинамики, физики плазмы и химии нижней ионосферы Земли. Вертикальная циркуляция нейтральных атомов и молекул в мезосфере и нижней термосфере играет важную роль в перераспределении тепла и импульса, влияет на состав атмосферы, а также на плазменные и электродинамические процессы [1, 2]. В этой области высот плазма является малой примесью и движется вместе с нейтральной компонентой [3], поэтому, измеряя скорость вертикального движения плазмы (далее – вертикальную скорость), тем самым измеряют вертикальную составляющую скорости нейтральной среды.

Существует ряд методов исследования вертикальной динамики в области высот от 60 до 130 км. Среди них измерения скорости методом вертикального зондирования в коротковолновом (КВ) диапазоне [4, 5], с помощью локации следов метеоров [6-8] и выбросов химических веществ с ракет и наблюдений за искусственными облаками [9–11], с помощью радаров некогерентного рассеяния [12, 13], с использованием лидаров и MST-радаров [14–17], а также регистрации на спутниках эмиссии возбужденного кислорода в зеленой линии [18] и некоторые другие. Большинство методов не позволяют получить сведения о вертикальной скорости в большом высотном интервале. Кроме того, до появления лидаров и MST-радаров методы измерения скорости не имели достаточного пространственно-временного разрешения. В итоге измерения скорости вертикального движения (или вертикального ветра) в этом диапазоне высот часто затруднены, а



**Рис. 1.** Высотные профили скорости *V* вертикального движения нейтральной компоненты вертикального ветра ( $\blacktriangle$ , *z*-компонента), а также зонального (восток—запад,  $\bigoplus$ , *x*-компонента) и меридионального (север—юг,  $\bigcirc$ , *y*-компонента) ветра в мезосфере и нижней термосфере по данным из работы [19].

имеющиеся данные ограничены во времени, по высоте и пространству в целом. В отличие от моделей общей циркуляции атмосферы, которые на высотах мезосферы и нижней термосферы дают величину вертикальной скорости в несколько десятков см/с, некоторые измерения разными методами показывают сравнительно большие значения, составляющие 20 м/с и более. Это касается преимущественно высоких широт, но иногда значительные вертикальные скорости наблюдаются в средних и низких широтах [19]. В качестве примера аномально больших значений вертикального ветра на рис. 1 по данным из работы [19] показаны высотные профили вертикальной скорости нейтральной компоненты, а также зонального (восток-запад) и меридионального (север-юг) ветра в мезосфере и нижней термосфере.

Развитие экспериментальной базы и цифровых методов регистрации и обработки сигналов, разработка других методов исследований позволили получить новые данные о динамике мезосферы и нижней термосферы в целом и о вертикальных движениях в частности. Например, в работах [20, 21] приведены одни из первых результатов измерения вертикальной скорости в 1990–1991 гг. методом, основанным на создании искусственных периодических неоднородностей (ИПН) ионосферной плазмы и локации их пробными радиоволнами. Теоретические предпосылки метода и разработанные на его основе способы определения различных параметров среды подробно описаны в монографии [21]. Методом ИПН получен большой объем сведений о высотных профилях и временных вариациях температуры и плотности нейтральной компоненты в интервале высот 90-120 км, скорости регулярного вертикального движения среды в D- и Е-областях, параметрах турбулентности на высотах ниже уровня турбопаузы. Разработанные на основе этого метода способы регистрации характеристик сигналов, рассеянных неоднородностями, позволили обнаружить волновые движения на высотах 60-130 км с периодами от 5-15 мин до нескольких часов, исследовать вариации уровня турбопаузы, определить турбулентные скорости среды, применить данные о вертикальных движениях к исследованию спорадических слоев ионизации - спорадических Е-слоев (далее – Е.-слоев) [22–33].

В работе приводятся основные результаты многолетних исследований вертикальных движений плазмы в мезосфере и нижней термосфере (60–130 км), обсуждается их вклад в динамику нейтральной атмосферы на примере высотновременны́х вариаций температуры и плотности нейтральной компоненты, приводятся данные о скоростях турбулентных движений, рассматривается роль вертикального переноса в образовании спорадических слоев ионизации.

## 2. МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ АТМОСФЕРНОЙ ДИНАМИКИ

Метод исследования атмосферной динамики с помощью создания ИПН и методика определения характеристик нейтральной атмосферы подробно изложены в монографии [21] и в работах [25, 31–33]. Принцип создания неоднородностей основан на воздействии на ионосферу направленным в зенит излучением синфазно работающими передатчиками стенда СУРА мощной радиоволны на частоте ниже критической, т.е. радиоволны, отражающейся от ионосферы. При этом в поле стоячей волны, образующейся при отражении от ионосферы мощной радиоволны, формируются неоднородности температуры и концентрации электронов, образуя квазипериодическую плазменную структуру. По окончании воздействия излучением на ионосферу неоднородности разрушаются (релаксируют). Параметры среды определяются на стадии релаксации неоднородностей по измеренным характеристикам рассеянных ими сигналов при зондировании неоднородностей пробными радиоволнами, которые излучаются в импульсном режиме также передатчиками нагревного стенда. Отметим, что обратное рассеяние пробных радиоволн от квазипериодической структуры возникает при выполнении условия Брэгга—Вульфа, один из вариантов реализации которого в эксперименте предполагает использование для создания и зондирования неоднородностей радиоволн одной и той же частоты и поляризации [21]. Результаты измерения вертикальной скорости среды, обсуждаемые в данной работе, получены при воздействии на ионосферу необыкновенной радиоволной.

На высотах Е-слоя процесс релаксации ИПН после прекращения воздействия на ионосферу происходит под действием амбиполярной диффузии, в D-области – вследствие температурной зависимости коэффициента отлипания электронов от отрицательных ионов молекулярного кислорода [21]. 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. На основе измерений амплитуды, времени релаксации и фазы рассеянного сигнала определяются важнейшие характеристики нейтральной составляющей атмосферы Земли в нижней ионосфере: скорость вертикального движения плазмы (V). которая на указанных высотах совпадает со скоростью нейтральной компоненты [1, 3]; температура и плотность; скорость турбулентного движения до уровня турбопаузы и некоторые другие характеристики нижней ионосферы [21]. Высотновременные вариации этих параметров позволяют получить информацию о характеристиках распространяющихся атмосферных волн, влияющих на состояние нижней ионосферы. В измерениях, результаты которых приводятся, рассеянные сигналы регистрировались с шагом по высоте в 0.7 или 1.4 км. Воздействие на ионосферу обычно проводилось в течение 3 с с периодом в 15 с. Этого времени более чем достаточно для образования периодических неоднородностей температуры и концентрации электронов, после чего стенд СУРА переводился в режим импульсной диагностики, излучая с частотой повторения в 50 Гц пробные волны той же частоты и поляризации.

Регистрация рассеянных сигналов проводилась с временным разрешением 15 с. На каждой высоте рассчитывались амплитуда *A* и фаза ф рассеянного сигнала, временные зависимости которых затем аппроксимировались линейными функциями вида

$$A(t) = \ln A_0 - \frac{t}{\tau}, \quad \varphi(t) = \varphi_0 + \frac{4\pi V t}{\lambda}. \tag{1}$$

По спаданию амплитуды сигнала в e раз определяли время релаксации  $\tau$  сигнала, рассеянного неоднородностями, т.е. время релаксации ИПН:

$$\tau = \frac{1}{K^2 D} = \frac{M_i v_{im}}{k_B (T_{e0} + T_{i0}) K^2} = \frac{M_i v_{im}}{2k_B T K^2}.$$
 (2)

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

По изменению фазы ф во времени находили скорость вертикального движения плазмы —

$$V = \frac{\lambda}{4\pi} \frac{d\varphi}{dt} = \frac{c}{4\pi fn} \frac{d\varphi}{dt}.$$
 (3)

В формулах (1)-(3) приняты следующие обозначения:  $k_B$  – постоянная Больцмана;  $K = 4\pi n/\lambda$ ; D – коэффициент амбиполярной диффузии, зависящий от электронной,  $T_{e0}$ , и ионной,  $T_{i0}$ , невозмущенных (фоновых) температур, частоты соударений ионов с молекулами V<sub>im</sub> и массы ионов M<sub>i</sub>; с – скорость света в вакууме; f и  $\lambda$  – частота и длина мощной и пробной радиоволн; *n* – показатель преломления. Для среднеширотной ионосферы ниже 130 км можно принять, что температура нейтральной компоненты и температуры электронов и ионов равны и  $T_{e0} = T_{i0} = T$ . При таком определении вертикальной скорости ее отрицательные значения соответствуют движению вверх. Непосредственное измерение фазы рассеянного сигнала позволяет определять скорость вертикального движения с большой точностью. Подробно этот вопрос рассмотрен в работах [20, 21], где приведена оценка погрешности определения скорости, которая для необыкновенной компоненты пробной волны, используемой для создания ИПН и локации их пробными радиоволнами, в обычных ионосферных условиях не должна превышать 0.05 м/с. На верхней панели рис. 2 показан типичный пример регистрации в реальном времени высотно-временных зависимостей амплитуды и фазы рассеянного сигнала в одном из сеансов, а на левой панели – пример линейной аппроксимации амплитуды А и фазы ф в зависимости от номера отсчета в регистрации рассеянного сигнала. Отметим, что для определения времени релаксации и вертикальной скорости выбирается количество отсчетов только на линейном участке аппроксимации фазы.

Подчеркнем еще раз, что в экспериментах, связанных с рассеянием пробных радиоволн на ИПН, определяется скорость вертикального движения плазмы. В работах [34, 35] показано, что в движущейся среде на высотах нижней ионосферы периодические неоднородности в процессе их релаксации увлекаются движением нейтрального газа за время меньше миллисекунды, поэтому измеряя фазу сигнала, рассеянного периодическими неоднородностями, можно определить скорость вертикального движения плазмы. Но, как отмечалось выше, на высотах 60–130 км плазма является пассивной примесью, вследствие чего она увлекается движением нейтрального газа и движется вместе с нейтральной средой [3].

Методом рассеяния пробных радиоволн на ИПН были исследованы заходно-восходные явления в нижней ионосфере [29], изучена реакция ионосферы на частные солнечные затмения [27,



**Рис. 2.** Примеры регистрации амплитуды *A* и фазы ф рассеянного сигнала во времени на стадии его релаксации (верхняя панель) и их линейные аппроксимации для определения времени релаксации по амплитуде сигнала и вертикальной скорости плазмы по его фазе в условных единицах (нижняя панель) на высотах 99.2 (слева) и 111.8 км (справа). Стрелками показаны сигналы, рассеянные периодическими неоднородностями в F-слое (*1*), E-слое (*2*), E<sub>s</sub>-слое (*3*), и в D-области (*4*).

31], обнаружено влияние возмущений от наземного промышленного взрыва на D-область ионосферы [36], зарегистрировано влияние атмосферных волн и турбулентности на образование неоднородностей и характеристики ионосферы и нейтральной атмосферы [22, 23, 25], предложен способ определения типа преобладающих положительных ионов в  $E_s$ -слое [29, 30]. В следующих разделах приводятся результаты анализа высотновременны́х вариаций вертикальной скорости, полученные методом создания ИПН в разные годы.

## 3. ОСОБЕННОСТИ ВАРИАЦИЙ ВЕРТИКАЛЬНОЙ СКОРОСТИ ПО ВЫСОТЕ И ВО ВРЕМЕНИ. ВЛИЯНИЕ АТМОСФЕРНЫХ ВОЛН

В мезосфере и нижней термосфере метод ИПН позволяет с высокой точностью определять параметры среды в интервале высот 60–130 км, исследуя при этом как короткопериодные (несколько секунд), так и более долговременные вариации.

#### 3.1. Основные особенности вариаций скорости

Отметим, что амплитуда, время релаксации рассеянного сигнала и вертикальная скорость подвержены быстрым временным вариациям в течение последовательных измерений, т.е. каждые 15 с. Для того чтобы сгладить эти быстрые вариации, часто применяется усреднение по времени и высоте. На рис. 3 приведены характерные примеры высотных профилей времени релаксации  $\tau$  и амплитуды A сигнала, рассеянного неоднородностями, и профилей вертикальной скорости за 5-минутный интервал времени в сеансе 13:53-13:58 мск 30.09.2016, полученных путем обработки регистраций сигнала в соответствии с формулами (1) и (3). В данном примере диффузионному закону релаксации неоднородностей (2), который справедлив в Е-слое ионосферы, отвечает интервал высот 100-120 км. При этом зависимость  $\tau(h)$  находится в хорошем согласии с диффузионной кривой.



**Рис. 3.** Высотные профили характеристик рассеянного сигнала, полученные 30.09.2016: *а* – времени релаксации т, *б* – амплитуды *A*, *в* – скорости вертикального движения плазмы *V* в сеансе 13:54–13:58. Кривые соответствуют усредненным в 5-минутном интервале времени значениям измеренных характеристик для каждой высоты. На высотах E<sub>s</sub>-слоя имеет место переход скорости через нулевое значение.

На высоте ниже 100 км атмосферная турбулентность разрушает неоднородности быстрее, чем амбиполярная диффузия, в результате чего время релаксации рассеянного сигнала в среднем уменьшается по сравнению с лиффузионным временем, обнаруживая при этом значительных разброс мгновенных значений. На высоте 85 км локальный рост амплитуды и времени релаксации обеспечивается аномально низким E<sub>s</sub>-слоем. В данном примере на высоте E<sub>s</sub>-слоя имеет место переход скорости через нулевое значение. Как оказалось, в большинстве случаев смена направления скорости соответствует высоте максимума Е<sub>s</sub>-слоя, что означает образование последнего непосредственно над пунктом наблюдения в результате перераспределения заряженных частиц в магнитном поле Земли [37-39]. На высотах 60-85 км в D-области амплитуда и время релаксации изменяются с увеличением высоты в полном соответствии с температурной зависимостью коэффициента отлипания электронов [21]. В приведенном примере вертикальная скорость преимущественно изменялась в интервале значений от -10 до +10 м/с со средним значением за 5 мин от -5 до +5 м/с в зависимости от высоты с постоянной сменой направления.

На верхней панели рис. 4 приведены высотные профили вертикальной скорости (точки) и амплитуды сигнала (линии), рассеянного ИПН, полученные с интервалом в 15 с за два получасовых сеанса 10.08.2015. Жирными линиями показаны средние за каждый сеанс профили скорости. Этот рисунок демонстрирует значительную изменчи-

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

вость мгновенных значений амплитуды рассеянного сигнала и вертикальной скорости, что обусловлено чувствительностью применяемого метода к изменениям в ионосфере. Усредненные за получасовой интервал значения скорости составили менее 5 м/с. На нижней панели рис. 4 показаны высотные профили вертикальной скорости за период наблюдений с 13:00 до 14:00 28.09.2018, усредненные за каждые 5 мин. В этом часовом сеансе на высотах 70-125 км скорость изменялась от -10 до +10 м/с. каждая вертикаль соответствует ее нулевому значению. Также видна постоянная смена направления скорости с увеличением высоты, а также более быстрые и глубокие ее вариации в D-области. Отсутствие данных в интервале высот 76-85 км обусловлено ростом концентрации атомарного кислорода, препятствующего образованию ИПН в в этом высотном интервале [21]. Напомним, что отрицательные значения скорости соответствуют движению вверх.

#### 3.2. Вариации вертикальной скорости во время природных явлений

Значительные вариации вертикальной скорости имеют место при заходно-восходной перестройке ионосферы и во время солнечных затмений. В июне 2000 г., августе 2001 г. и августе 2015 г. были проведены измерения методом ИПН с 19 ч вечера до 6 ч утра следующего дня с целью исследования ионосферы в заходно-восходный период. По измерениям в заходно-восходные часы 15 и 16 июня 2001 г. большинство значений скорости



**Рис. 4.** Верхние панели — высотные профили вертикальной скорости (точки) и амплитуды сигнала (тонкие линии), рассеянного ИПН, полученные с интервалом в 15 с за два получасовых сеанса 10.06.2015, жирными линиями показаны средние профили за это время; нижняя панель — высотные профили скорости вертикального движения плазмы за период наблюдений с 13:00 до 14:00 LT 28.09.2018, усредненные за каждые 5 мин.

находилось в интервале от -10 до +10 м/с со средними значениями на высотах Е-слоя от -3.8 до 0.5 м/с. По данным из работы [29] в D-области в предзаходные часы скорости были направлены из области ионизации как вверх, так и вниз. Вблизи высоты 90 км чаще наблюдались движения вниз с отрицательным градиентом по высоте, который должен был вызывать "сгонку" ионизации в так называемый "подслойный" E<sub>s</sub>, т.е. слой, расположенный ниже высоты максимума регулярного Е-слоя. Такой слой наблюдался на высотно-временны́х записях амплитуды рассеянного сигнала. Во время захода Солнца и в послезаходные часы наблюдался также спускающийся E<sub>s</sub>-слой, на высотах которого скорости были направлены преимущественно внутрь области ионизации.

За изменением средних величины и направления скорости в Е-слое для вечерних часов

15.06.2001 можно проследить по гистограммам распределения скорости *V*, построенным для высот 85.0-124.2 км с интервалом в 2.8 км и представленным на рис. 5. На каждой гистограмме указаны высота h, для которой она построена, и среднее значение вертикальной скорости  $\langle V \rangle$  на этой высоте. Видно, что средние величина и направление скорости существенно изменялись с увеличением высоты. На высотах  $h \approx 92$  и 114 км имела место смена знака средней скорости, т.е. могло происходить образование E<sub>s</sub>-слоя за счет механизма ветрового сдвига. На этих же высотах спорадические слои регистрировались на высотно-временной записи амплитуды рассеянного сигнала и на ионограмме вертикального ионозонда. Из рис. 5 видно, что с увеличением высоты возрастала доля сравнительно больших значений скорости, превышающих 10 м/с, а также диспер-



**Рис. 5.** Гистограммы распределения вертикальной скорости на разных высотах в вечерние и ночные часы 15.06.2001; для каждой гистограммы указаны высота и среднее значение скорости.

сия распределения. Этот результат является косвенным подтверждением распространения атмосферных волн и роста их вклада в вертикальную скорость, как отмечалось ранее в работах [20, 21].

Особенности активной заходно-восходной перестройки динамического режима ионосферы также отражены в изменении высотных профилей вертикальной скорости V(h), которые иллюстрирует рис. 6. На нем представлено несколько

полученных подряд профилей V(h) 16.08.2000 во время захода Солнца в Е-области. Видно, что высотные вариации скорости имеют явно волнообразный характер с периодом по высоте порядка 12—15 км. Аналогичные результаты получены и для восходных часов. Можно заключить, что скорость вертикального движения в период захода и восхода Солнца испытывает значительные высотно-временные вариации, связанные, как при-

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022



Рис. 6. Высотные профили вертикальной скорости V(h) в период захода Солнца 16.08.2000.

нято считать, с генерацией волн солнечным терминатором [40].

Подобная перестройка в нижней ионосфере происходит и во время частичных затмений Солнца [31], и при проникновении возмущений от наземного промышленного взрыва на ионосферные высоты [36]. При наблюдениях методом ИПН во время затмения 20.03.2015 с фазой 0.586 для местных условий характеристики рассеянного сигнала изменялись во времени подобно заходно-восходным вариациям. Это неудивительно, так как во время затмения ионосфера частично переходит к сумеречным условиям. На рис. 7 приведена зависимость мгновенных (неусредненных) значений вертикальной скорости от времени и высоты в день затмения при регистрации амплитуды и фазы каждые 15 с. Стрелками показаны время начала, максимальной фазы и окончания затмения. Видны глубокие квазипериодические вариации скорости в Е-слое на высотах 90–130 км, аналогичные вызываемым колебаниям при прохождении терминатора в заходный и восходный периоды [40].

#### 3.3. Возмущения вертикальной скорости в нижней ионосфере после наземного промышленного взрыва

Известно, что волны давления, возникающие при взрывах, достигают ионосферных высот с акустической скоростью, распространяясь далее как волновые возмущения электронной концентрации и других ионосферных и атмосферных параметров. В работе [36] приведены результаты наблюдений ионосферы во время промышленного взрыва по регистрациям амплитулы и фазы сигнала, рассеянного ИПН, на высотах D-области. При распространении возмущения от наземного взрыва в ионосферу амплитуда неоднородностей уменьшалась почти до уровня естественных помех, а вертикальные скорости обнаруживали квазипериодические изменения во времени с "мгновенных" (в данном случае – средних за минуту) значений от 4 до 12 м/с со среднеквадратичным отклонением порядка 4-8 м/с. Акустическое возмущение от наземного взрыва достигло высоты 60-70 км через 26 мин после него, распространяясь со скоростью порядка 300 м/с. Спектральный анализ флуктуаций скорости показал наличие в спектре ярко выраженных компонент с периодами колебаний 7, 10, 20, 25, 50 мин, а также сравнительно долгопериодных колебаний с периодами 1.5, 2.5 и 3.3 ч. Очевидно, проникновение возмушения от взрыва в виде акустико-гравитационных волн вызвало интенсивные вертикальные движения среды, что повлияло на структуру квазипериодических неоднородностей, уменьшив их амплитуду вследствие изменения фазовых соотношений волн, рассеянных разными неоднородностями [36].

Попутно отметим, что не так давно метод ИПН удалось реализовать и на зарубежных нагревных стендах [41–44]. В работах [41, 43] приведены данные о скоростях вертикальных движений в D- и Е-областях высокоширотной ионосферы. В них не получено аномально больших значений скорости. Например, в работе [41] из наблюдений за состоянием ионосферы методом


**Рис.** 7. Зависимость вертикальной скорости от времени и высоты в день затмения Солнца 20.03.2015 при регистрации фазы каждые 15 с; стрелками показаны время начала, максимальной фазы и окончания затмения.

ИПН на высокоширотном стенде HAARP в апреле 2014 г. следует, что на высотах 85-125 км значения скорости не превышали 5 м/с, а на высотах 90–105 км скорость была близка к нулю. Отметим, что в [41] приведены сведения за сеанс измерений длительностью всего 30 с и погрешностью измрения скорости около 10 м/с на краях исследумого высотного диапазона. В работах [42, 43] представлены результаты экспериментов на высокоширотном стенде EISCAT-heater, выполненных по разработанной в НИРФИ методике. В [43] сообщается об экспериментах 18.11.1993 и 15.09.1994, в которых основная масса измеренных скоростей не превышала по модулю 2–5 м/с.

Близкие к нашим результаты измерения вертикальной скорости получены в работе [45] по данным метеорадара Сан-Жуан-ду-Карири, Бразилия (7.4°S; 36.5°W). На мезосферных высотах 82—96 км разнонаправленные вертикальные скорости составляли несколько м/с, иногда достигали 5 м/с и лишь на высоте 96 км приближались к величине в 10 м/с. Таким образом, и в высоких широтах, и в экваториальной области измерения вертикальной скорости методом ИПН не показывают аномально больших значений, подобных приведенным в работах [2, 19, 46].

### 3.4. Влияние атмосферных волн

Результаты длительных исследований ионосферы методом ИПН показали, что в высотновременны́х вариациях вертикальной скорости постоянно присутствуют волнообразные движения различных периодов [23–25, 29]. В данном разделе приведем конкретные примеры. На рис. 8 показана зависимость от времени усредненных за каждые 5 мин значений вертикальной скорости плазмы для высот 100.8, 105 и 112 км за 12.08.2015. Средние значения скорости находились в интервале от -6 до +6 м/с. Видны волнообразные вариации скорости с постоянной сменой направления и периодом от 5 мин до 1 ч, что свидетельствует об интенсивной динамике исследуемой области высот. Штриховыми кривыми показаны сглаженные по 25-минутному интервалу времени значения скорости.

В ином виде высотно-временные вариации вертикальной скорости, усредненные по 5-минутным интервалам времени, представлены на рис. 9 за 13.08.2015 (утренние часы), 12.08.2015 (вечерние часы) и 25.10.2018 (послеполуденные часы); величина скорости дана в виде яркостной шкалы. Белые пятна означают отсутствие данных, как правило, вследствие нестабильности фазы рассеянного сигнала, в результате чего вертикальная скорость не могла быть определена. Во всех случаях скорость изменялась в интервале значений от -8 до +8 м/с. Для утренних часов 13.08.2015 отмечены глубокие и быстрые вариации скорости. Для вечерних часов 12.08.2015 были характерны преимущественно положительные (движение вниз) значения скорости в D-области со сменой направления вблизи высоты 90 км. В послеполуденные часы 25.10.2018 практически отсутствовали неоднородности ниже высоты 75 км. Хорошо видна периодическая смена на-



**Рис. 8.** Зависимость усредненных в 5-минутном интервале времени значений вертикальной скорости плазмы (и нейтральной компоненты) от времени для высот 100.8 (верхняя панель), 105 (средняя панель) и 112 км (нижняя панель) 12.08.2015.

правления и величины вертикальной скорости с волновыми вариациями периодов 15–20, 40–45, 60, 120, 150 и 180 мин. Эти периоды характерны для внутренних гравитационных волн, распространяющихся в атмосфере Земли [47–56].

Вариации вертикальной скорости с течением времени обусловлены рядом причин, одной из которых является постоянное существование в нижней ионосфере волновых процессов различной природы, в том числе внутренних гравитационных волн. Модели циркуляции средней атмосферы дают на высотах 80–100 км значения вертикальной скорости до нескольких см/с [7, 57–59]. Большие по сравнению с модельными значения вертикальной скорости, измеренные методом ИПН, отражают существенную роль атмосферных волн в динамике мезосферы и нижней термосферы (нижней ионосферы). Спектральный анализ временны́х зависимостей вертикальной скорости показал, что в них проявляются волновые движения с периодом от 5–10 мин до 4–5 ч.

Еще в 70-е годы прошлого века на основе анализа картины горизонтальных ветров в работе [39] был сделан вывод о том, что в 40% случаев ветровая структура нижней ионосферы определяется атмосферными волнами. В работах [20, 21, 23, 25, 28, 32] на основе анализа определения параметров мезосферы и нижней термосферы сделан вывод о том, что из всех определяемых характеристик вертикальная скорость наиболее чувствительна к влиянию волновых движений. По результатам измерений вертикальной скорости методом ИПН можно заключить, что в целом мгновенные значения *V* на высотах мезосферы и нижней термосферы и нижней термосферы могут составлять единицы и десятки м/с; при этом значительный вклад в ве-



**Рис. 9.** Высотно-временные вариации вертикальной скорости с шагом по высоте 1.4 км, усредненные по 5-минутным интервалам времени, за 13.08.2015 (верхняя панель), 12.08.2015 (средняя панель) и 25.10.2018 (нижняя панель). Видны периодическая смена направления и величины вертикальной скорости.

личину скорости вносят атмосферные волны. Усреднение мгновенных значений скорости дает величину 5–8 м/с в зависимости от ионосферных условий. Вклад волновых движений в вертикальную скорость можно оценить по нашим измерениям. Приближенную оценку дает вычитание из



**Рис. 10.** Высотные профили вертикальной скорости V(h) для осени 1991 г., измеренные методом создания ИПН [21]: 1 – сентябрь, 2 – октябрь, 3 – ноябрь.

временно́го ряда скорости ее сглаженной по разумному периоду функции. Такая процедура, примененная в работах [20, 21] к минутным вариациям скорости, показала, что вклад волновых движений увеличивался от 0.4—1.8 м/с на высоте 97 км до 1—12 м/с на высоте 117 км. В целом можно полагать, что вклад атмосферных волн в колебания вертикальной скорости растет с увеличением высоты.

### 3.5. Сезонно-суточные вариации скорости

До 2020 г. измерения скорости, как правило, проводились в зимние, осенние и весенние месяцы в течение 15-20 дней каждый месяц. В последующие годы удавалось организовать преимущественно летние и осенние эксперименты, связанные с созданием ИПН на стенде СУРА, в течение нескольких дней в месяц. В результате полной картины сезонно-суточных вариаций вертикальной скорости пока не сложилось. В работах [20, 21] приведены результаты измерений вертикальной скорости в течение 6-7 ч ежедневно в интервале высот 89-114 км за период с сентября 1990 г. по май 1991 г. преимущественно в дневные часы. Отмечается, что в этот период на указанных высотах скорости были направлены вверх, а их максимальные абсолютные среднемесячные значения наблюдались в ноябре 1990 г. и январе 1991 г. и составили 4.6 и 2.6 м/с соответственно. В другие месяцы средние значения скорости не превышали 1.5 м/с. Наибольший разброс средних за месяц значений скорости пришелся на ноябрь 1990 г. и январь 1991 г. В первом случае среднее значение вертикальной скорости изменялось от +1.3 м/с на

высоте 89 до -2.6 км на высоте 114 км, во втором случае – от +1.0 до -4.6 м/с на тех же высотах (напомним, что отрицательные значения означают движение вверх). По этим данным в сезонном ходе скорости не получено больших положительных значений. Естественно, "мгновенные" значения скорости, полученные каждые 15 с или усредненные в одноминутном интервале времени, были иногда существенно больше и достигали в отдельные дни 10–15 м/с, а иногда и 20 м/с.

На рис. 10 приведены заимствованные из работы [21] высотные профили вертикальной скорости для трех осенних месяцев 1991 г.: сентябрь – кривая *1*, октябрь – кривая *2*, ноябрь – кривая *3*. Каждая точка на графике соответствует среднемесячному значению. Профили дают представление о среднем характере изменении величины и направления скорости с увеличением высоты. Если в сентябре до высоты 105 км средняя скорость была направлена вверх, то в ноябре наблюдались нисходящие движения, а в октябре на высоте 95 км имел место переход от нисходящих движений к восходящим с ростом модуля средней скорости. В целом в этот период среднемесячные значения скорости не превышали 2 м/с.

В работе [2] на основе анализа относительно небольшого количества измерений вертикальной скорости разными методами сделан вывод о том, что события, происходящие со скоростью, превышающей 10 м/с, являются обычным явлением в мезосфере и нижней термосфере. Измерения скорости методом ИПН показывают, что "мгновенные" значения скорости действительно могут быть большими, но процент их обычно невелик, за исключением заходно-восходного периода (см. рис. 5), а их средние значения, как правило, не превышают нескольких м/с.

### 4. ВАРИАЦИИ ТЕМПЕРАТУРЫ НЕЙТРАЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ

Вертикальные движения играют важную роль в переносе тепла, показателем которого является изменение температуры нейтральной компоненты с увеличением высоты. Методом ИПН температура определяется в области высот, где справедлив диффузионный механизм релаксации неоднородностей и время их разрушения после окончания воздействия на ионосферу обратно пропорционально коэффициенту амбиполярной диффузии, т.е. температуре (см. формулу (2)). Методика определения температуры по высотной зависимости времени релаксации ИПН подробно изложена в работах [21, 32, 59, 60]. В нижней среднеширотной ионосфере вплоть до 120-130 км выполняется условие теплового равновесия, когда температуры заряженных частиц равны температуре нейтральной компоненты, а частота соударений ионов с молекулами пропорциональна плотности атмосферы. При этом используется связь температуры с высотой однородной атмосферы, которая, в свою очередь, определяется по высотной зависимости времени релаксации рассеянного сигнала.

Из предположения о том, что в пределах объема рассеяния среда локально изотропна, а плотность атмосферы уменьшается с ростом высоты по экспоненциальному закону, следует, что высотная зависимость времени релаксации рассеянного сигнала также описывается экспонентой, а его величина уменьшается в е раз на масштабе, определяемом высотой однородной атмосферы  $H = k_B T / Mg$ , где M – средняя масса молекул газа, *g* – ускорение свободного падения. Важной особенностью способа определения температуры является необходимость отсутствия турбулентности и спорадических слоев ионизации. Первый фактор приводит к отклонению высотной зависимости времени релаксации от диффузионного закона, что вызывает рост погрешности определения температуры, второй – к росту времени релаксации вследствие роста массы преобладающих ионов в E<sub>s</sub>-слое [29, 37–39, 61]. При этом нижняя граница интервала высот, в котором реализуется возможность определения температуры методом ИПН, ограничивается снизу уровнем турбопаузы, а сверху – нарушением условия теплового равновесия. В разных природных условиях высотный интервал определения температуры варьируется в пределах 85-130 км. Большой объем исследования высотно-временны́х вариаций параметров нейтральной атмосферы проанализирован в работах [21, 24, 25, 32, 60, 61].

На рис. 11 приведены характерные зависимости вертикальной скорости (две верхние панели) в Е-слое и D-области, температуры и плотности нейтральной компоненты (две нижние панели) от времени в дневные часы на высотах 100 и 105 км, полученные 28.09.2018. Измерения в эти дни проводились в спокойной ионосферной и геомагнитной обстановке. Пределы изменений температуры от 100 до 250 К являются типичными для этих высот. Вариации скорости, температуры и плотности демонстрируют развитую волновую динамику нижней термосферы. Хорошо видны ярко выраженные волноподобные изменения параметров с периодом от 15 мин до 2 ч и более, наблюдается сложная картина временны́х вариаций температуры с размахом колебаний от  $\sim 10-15$  К до  $\sim 100$  К. Средние за весь период наблюдений значения температуры ~170 К мало различаются на обеих высотах. Однако видны и значительные различия в характере временных изменений температуры и плотности на высотах 100 и 105 км. Так, на высоте 105 км после 13 ч имели место 10-минутные колебания с размахом до 40 К на фоне более долгопериодных волн с периодом ~80 мин. В то же время на высоте 100 км ми-

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

нимальный размах колебаний температуры, составляющий ~20 К с 15-минутным периодом. Наблюдаются также волновые движения с размахом колебаний температуры ~100 К с периодом ~25— 30 мин и колебаний с размахом ~150 К с периодом около 1.5 ч. Периоды волн, вносящих вклад в вариации атмосферных параметров, соответствуют внутренним гравитационным волнам [17–24].

Результаты определения температуры методом создания ИПН показали, что высотные профили температуры на высотах мезосферы и нижней термосферы отличаются большим разнообразием формы [25, 60, 62, 63]. На рис. 12 приведены примеры усредненных в 5-минутном интервале времени высотных профилей температуры и вертикальной скорости 06.10.2014, изменяющихся "в фазе", т.е. когда во всем высотном интервале одновременно растут температура и модуль скорости (левая панель на рис. 12). При этом максимальные значения температуры достигаются приблизительно на тех же высотах, что и значения модуля скорости, и "в противофазе", когда практически во всем интервале высот локальный максимум температуры приходится на высоты с локальными минимумами модуля скорости 25.10.2018 (правая панель на рис. 12). Высотный масштаб вариаций температуры и скорости составил 5-20 км. Аналогичный высотный ход температуры и вертикальной скорости многократно наблюдался в разных экспериментах.

Довольно часто заметная корреляция между высотными профилями температуры и скорости отсутствовала, что может быть обусловлено следующими обстоятельствами. Первый фактор это изменение со временем уровня турбопаузы, что приводит к росту вклада турбулентных движений в определяемую величину температуры, увеличивая погрешность. Отметим, что это не имеет отношения к вертикальной скорости, так как фаза рассеянного сигнала при наличии сильно развитой турбулентности становится хаотичной и вертикальная скорость в этом случае не может быть определена. Другим фактором влияния могут быть конвективные потоки как сверху, так и снизу, которые могут накладываться на волновые вариации скорости и искажать их. В результате высотные зависимости температуры и скорости могут значительно отличаться друг от друга при отсутствии временной и высотной корреляции между ними. В работе [62] сделан вывод о том, что корреляция вариаций вертикальной скорости и температуры нейтральной компоненты наблюдалась в периоды развития неустойчивостей среды. Вопрос о взаимосвязи вариаций температуры и вертикальной скорости еще предстоит выяснить.



Рис. 11. Характерные зависимости вертикальной скорости от времени в Е-слое (верхняя панель) и D-области (вторая сверху панель), температуры (○) и плотности (●) нейтральной компоненты от времени в дневные часы на высотах 100 и 105 км (две нижние панели) за 28.09.2018.

## 5. ВКЛАД ХАОТИЧЕСКИХ ДИЖЕНИЙ В ДИНАМИКУ МЕЗОСФЕРЫ И НИЖНЕЙ ТЕРМОСФЕРЫ

Важной составляющей атмосферной динамики являются хаотические движения нейтральной компоненты, обусловленные атмосферной турбулентностью. Метод ИПН позволяет определять турбулентную скорость вплоть до уровня турбопаузы, вблизи которого турбулентное перемешивание газовых составляющих атмосферы сменяется их диффузионным разделением. На этой высоте турбулентная скорость  $V_t$  приближается к нулю. Последняя определяется по уменьшению времени релаксации рассеянного сигнала относительно времени диффузионного расплывания неоднородностей [21, 22, 33]. Как и характеристи-



**Рис. 12.** Примеры усредненных в 5-минутном интервале времени высотных профилей температуры (○) и вертикальной скорости (●) в сеансах 15:12 мск (левая панель) и 11:30 мск (правая панель) 25.10.2018.



**Рис. 13.** Высотная зависимость скорости турбулентного движения V<sub>t</sub> 28.09.2018 г.; точки соответствуют регистрации сигнала каждые 5 мин.

ки рассеянного сигнала, турбулентная скорость подвержена быстрым флуктуациям с характерным временем, составляющим 15 с. На рис. 13 приведен пример зависимости скорости турбулентного движения  $V_t$  от высоты для часового сеанса с 17 до 18 ч 28.09.2017; точки соответствуют усредненным за каждые 5 мин значениям скорости. Видно, что в данном примере уровень турбопаузы варьировался от 95 до 105 км, а турбулентная скорость преимущественно изменялась от 0.5 до 4 м/с. В нескольких случаях  $V_t$  достигла значений в 5–6 м/с.

Эксперименты, проведенные в разные годы, показали, что в целом минутные значения  $V_t$  изменялись в разных условиях от близких к нулю значений до 5 м/с [21, 22, 33, 63]. В возмущенные

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

периоды с ярко выраженной волновой активностью и сильно развитой турбулентностью турбулентная скорость возрастала до 7 м/с. Средние скорости турбулентных движений за сеанс продолжительностью 6—7 ч на высотах ниже турбопаузы составляли обычно  $V_t \approx 1-2$  м/с, уменьшаясь до близких к нулю значений при приближении к уровню турбопаузы. В вариациях турбулентной скорости также наблюдаются быстрые флуктуации и волнообразные изменения во времени, поэтому при ее определении обычно используются усредненные значения времени релаксации с интервалом усреднения от 5 до 15 мин для исключения возможных короткопериодных вариаций.

Из анализа полученного нами большого объема данных о величинах скоростей вертикальных и



**Рис. 14.** Пример регистрации E<sub>s</sub>-слоя на ионограмме (верхняя панель), на высотной зависимости амплитуды рассеянного сигнала (средняя панель) и высотный профиль вертикальной скорости со сменой направления на высоте 100 км (нижняя панель).

турбулентных движений следует, что турбулентные (вихревые) скорости могут достигать нескольких м/с, они возрастают в периоды атмосферных возмущений и часто сопоставимы по порядку величины с регулярными вертикальными скоростями [25, 33].

# 6. ВЕРТИКАЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС И СПОРАДИЧЕСКИЕ СЛОИ ИОНИЗАЦИИ

Важную роль вертикальные движения играют в перераспределении плазмы и образовании спорадических слоев ионизации с повышенным относительно фонового значения уровнем концентрации электронов. Так как  $E_s$ -слой содержит атомарные положительные ионы металлов, в том числе тяжелые ионы железа, магния, кальция, то средняя масса ионов на высотах  $E_s$ -слоя возрастает, что приводит к увеличению времени релаксации и росту амплитуды рассеянного сигнала вследствие роста коэффициента отражения пробных радиоволн от слоя. Этот факт неоднократно отмечался в экспериментах по диагностике ионосферы методом создания ИПН, что позволило разработать способ определения массы, т.е. типа преобладающих ионов в  $E_s$ -слое [61].

На рис. 14 приведен пример одного из сеансов наблюдений, когда спорадический Е,-слой был зарегистрирован на ионограмме вертикального зонлирования (верхняя панель) и на высотной зависимости амплитуды рассеянного сигнала (средняя панель). Профиль вертикальной скорости со сменой направления на высоте 100 км приведен на нижней панели рис. 12. Рисунок 14 демонстрирует разнонаправленное движение плазмы относительно высоты, где наблюдался E<sub>s</sub>-слой, т.е. переход от движения среды вверх к движению вниз. В тех случаях, когда скорость при переходе через нулевое значение меняет знак таким образом, что с ростом высоты восходящие движения сменяются нисходящими, создаются условия для перераспределения положительных металлических ионов и, соответственно, электронов в неоднородном поле скоростей и образования E<sub>s</sub>-слоя [37–39]. По результатам наших наблюдений эта высота (переход скорости через нулевое значение) соответствует, как правило, высоте максимума E<sub>s</sub>-слоя, что означает его образование непосредственно над пунктом наблюдения. Как раз такой случай приведен на рис. 14, когда существование E<sub>s</sub>-слоя подтверждается данными ионозонда и хорошо видно на записях амплитуды рассеянного сигнала. В целом по результатам измерений вертикальной скорости в разные годы ее высотный градиент (сдвиг) вертикальной скорости на высотах 80-120 км изменялся от  $(1 \div 8) \cdot 10^{-5}$  до  $5 \cdot 10^{-4}$  с<sup>-1</sup>. Достаточно интенсивные внутренние гравитационные волны с вертикальной компонентой скорости в несколько м/с могут создать необходимый для образования Е,-слоя сдвиг вертикальной скорости движения плазмы по высоте. Согласно изложенному в работе [39], такой сдвиг скорости способен обеспечить образование Е<sub>s</sub>-слоя путем перераспределения металлических ионов под действием вертикальных движений в магнитном поле Земли.

### 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе суммированы результаты многолетних исследований вертикальных движений в мезосфере и нижней термосфере на высотах 60-130 км методом резонансного рассеяния радиоволн на искусственных периодических неоднородностях плазмы, создаваемых при воздействии на ионосферу мощным высокочастотным радиоизлучением. Приведены результаты измерения скорости вертикального движения плазмы в разных природных условиях. Основными особенностями динамики вертикальной скорости являются: быстрые временные вариации – изменение величины и направления скорости в течение 15 с, т.е. за время одного измерения: величина скорости может достигать 10 м/с и более, имеет место изменение величины и направления скорости с увеличением высоты, отмечаются волнообразные временные вариации. При этом средние значения вертикальной скорости за длительные интервалыы в основном составляют несколько м/с. Большие по сравнению с моделями атмосферной циркуляции значения скорости свидетельствуют о значительном влиянии атмосферных волн.

Изменения вертикальной скорости с увеличением высоты и во времени часто имеют волнообразный характер и происходят с периодичностью, характерной для внутренних гравитационных волн. Наиболее выраженными являются периоды 5–15, 30, 45 и 60 мин. При длительных многочасовых измерениях наблюдались вариации скорости с периодом до 4–5 ч с характерным вертикальным масштабом вариаций, составляющим 5–15 км.

Изучалось влияние вертикального переноса на высотно-временные вариации температуры и плотности нейтральной атмосферы в указанном интервале высот. Отмечается, что зависимости температуры и скорости от высоты могут значительно отличаться друг от друга при отсутствии временной и высотной корреляции между ними. Наблюдаются выраженные волновые вариации температуры и плотности с периодами, характерными для атмосферных волн.

Исследовано влияние вариаций вертикальной скорости на образование  $E_s$ -слоя. Во многих случаях смена направления вертикальной скорости имела место на высоте образования слоя, а величина ее высотного градиента была достаточна для образования среднеширотных  $E_s$ -слоев, наблюдавшихся в экспериментах на нагревном стенде СУРА. Определенный по результатам измерений высотный градиент вертикальный скорости величиной порядка  $10^{-4}$  с<sup>-1</sup> является достаточным для сгонки металлических ионов в спорадический слой, образующийся на высоте, где скорость меняет знак.

Исследование атмосферной турбулентности ниже уровня турбопаузы показало, что скорости турбулентного движения на высотах мезосферы нижней термосферы могут быть сопоставимы со скоростью регулярного вертикального движения среды. В целом исследования методом ИПН показывают, что вертикальные регулярные и хаотичные движения среды вносят значительный вклад в вариации параметров мезосферы и нижней термосферы

Работа выполнена при поддержке Российским научным фондом по проекту № 20-17-00050. Стенд СУРА поддерживался в рабочем состоянии в рамках выполнения проекта № 0729-2020-0057 по базовой части госзадания Минобрнауки.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Брюнелли Б.Е., Намгаладзе А.А. Физика ионосферы. М.: Наука, 1988.
- 2. Larsen M.F., Meriwether J.W. // J. Geophys. Res.: Space Phys. 2012. V. 117. № A09. P. A09319.
- 3. *Гершман Б.Н.* Динамика ионосферной плазмы. М.: Наука, 1974.
- Hoffman P., Singer W., Keuer D. et al. // Z. Meteorol. 1990. V. 40. № 6. P. 405.
- Manson A.H., Meek C.E. // Handbook MAP. 1989. V. 27. P. 339.
- Кащеев Б Л., Лысенко И.А. // Ионосферные исследования. 1989. № 47. С. 44.
- Измерение ветра на высотах 90–100 км наземными методами / Под ред. Портнягина Ю.И., Шпренгера К. Л.: Гидрометеоиздат, 1978.
- 8. *Egito F., Andrioli V.F., Batista P.P. //* J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 2016. V. 149. № 11. P. 108.
- 9. Widdel H.-U. // J. Atmos. Sol-Terr. Phys. 1987. V. 49. № 7–8. P. 723.
- 10. Lehmacher G.A., Scott T.D., Larsen M.F. et al. // Ann. Geophys. 2011. V. 29. № 12. P. 2327.
- 11. Larsen M. F. // J. Geophys. Res. 2002. V. 107. № A8. P. 1215.
- Smith R.W. // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 1998. V. 60. № 14. P. 1425.
- 13. *Oyama S., Watkins B.J., Nozawa S. et al.* // J. Geophys. Res. 2005. V. 110. № 4. P. A04302.
- Canin M.L., Hauchecorne A. // J. Geoph. Res.: Oceans. 1981. V. 86. № 10. P. 9715.
- Woodman R.F., Guillen A. // J. Atmos. Sci. 1974. V. 31. № 2. P. 493.
- Kudeki E., Surucu F., Woodman R.F. // Radio Sci. 1990.
   V. 25. № 4. P. 595.
- 17. Каримов К.А., Гайнутдинова Р.Д. Возмущения в нижней ионосфере и их связь с динамическими характеристиками нейтральной атмосферы. Фрунзе: Илим, 1986.
- Fauliot V., Thuillier G., Vial F. // Ann. Geophys. 1997. V. 15. № 9. P. 1221.
- MacLeod M.A. // Aeronomy: Record Third Aeronomy Conf. Aeron. Rep. V. 32. Aeron. Lab., Univ. of Ill., Urbana-Champaign, 1968. P. 142.
- Бахметьева Н.В., Беликович В.В., Бенедиктов Е.А. и др. // Геомагнетизм и аэрономия. 1996. Т. 36. № 5. С. 120.

- 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.
- 22. Бахметьева Н.В., Беликович В.В., Коротина Г.С. // Геомагнетизм и аэрономия. 1996. Т. 36. № 5. С. 180.
- Бахметьева Н.В., Беликович В.В., Егерев М.Н., Толмачева А.В. // Изв. вузов. Радиофизика. 2010. Т. 53. № 2. С. 77.
- 24. Бахметьева Н.В., Беликович В.В., Григорьев Г.И., Толмачева А.В. // Изв. вузов. Радиофизика. 2002. Т. 45. № 3. С. 233.
- 25. Bakhmetieva N.V., Grigoriev G.I., Tolmacheva A.V., Zhemyakov I.N. // Atmosphere. 2019. V.10. № 8. P. 450.
- 26. *Толмачева А.В., Григорьев Г.И.* // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 5. С. 91.
- 27. Бахметьева Н.В., Вяхирев В.Д., Калинина Е.Е., Комраков Г.П. // Геомагнетизм и аэрономия. 2017. Т. 57. № 1. С. 64.
- Беликович В.В., Бахметьева Н.В., Калинина Е.Е., Толмачева А.В. // Изв. вузов. Радиофизика. 2006. Т. 49. № 9. С. 744.
- Бахметьева Н.В., Беликович В.В., Каган Л.М., Понятов А.А. // Изв. вузов. Радиофизика. 2005. Т. 48. № 1. С. 16.
- Бахметьева Н.В., Беликович В.В. // Изв. вузов. Радиофизика. 2008. Т. 51. № 11. С. 956.
- 31. Бахметьева Н.В., Бубукина В.Н., Вяхирев В.Д. и др. // Изв. вузов. Радиофизика. 2016. Т. 59. № 10. С. 873
- 32. Бахметьева Н.В., Вяхирев В.Д., Григорьев Г.И. и др. // Геомагнетизм и аэрономия. 2020. Т. 60. № 1. С. 99.
- Бахметьева Н.В., Григорьев Г.И., Виноградов Г.Р. и др. // Геомагнетизм и аэрономия. 2021. Т. 61. № 6. С. 777.
- 34. *Беликович В.В., Мареев Е.А.* // Изв. вузов. Радиофизика. 1987. Т. 30. № 7. С. 852.
- Беликович В.В., Бенедиктов Е.А., Мареев Е.А., Терина Г.И. // Изв. вузов. Радиофизика. 1983. Т. 26. № 5. С. 625.
- 36. Бахметьева Н.В., Беликович В.В., Бенедиктов Е.А. и др. // Геомагнетизм и аэрономия. 1996. Т. 36. № 6. С. 43.
- Whitehead J.D. // J. Atmos. Terr. Phys. 1989. V. 51. № 5. P. 401.
- Mathews J.D. // J. Atmos.-Sol. Terr. Phys. 1998. V. 60. № 4. P. 413.
- Гершман Б.Н., Игнатьев Ю.А., Каменецкая Г.Х. Механизмы образования ионосферного спорадического слоя Е на различных широтах. М.: Наука, 1976.
- 40. Сомсиков В.М. Солнечный терминатор и динамика атмосферы. Алма-Ата: Наука, 1983.
- 41. *Hysell D.L., McCarrick M.J., Fallen C.T., Vierinen J. //* Geophys. Res. Lett. 2015. V. 42. № 5. P. 1297.
- 42. *Rietveld M.T., Goncharov N.P.* // Adv. Space Res. 1998. V. 21. № 5. P. 693.
- 43. *Rietveld M.T., Turunen E., Matveinen H. et al.* // Ann. Geophys. 1996. V. 14. № 2. P. 1437.
- 44. Bakhmetieva N.V., Grach S.M., Sergeev E.N. et al. // Radio Sci. 2016. V. 51. № 7. P. 999.

- 45. *Egito F., Andrioli V.F., Batista P.P. //* J. Atmos.-Sol. Terr. Phys. 2016. V. 149. № 11. P. 108.
- Bhattacharya Y., Gerrard A.J. // J. Geophys. Res. Atmos. 2010. V. 115. № 23. P. D00N07.
- 47. Hines C.O. // Nature. 1972. V. 239. № 5367. P. 73.
- 48. Fritts D.C., Alexander M.J. // Rev. Geophys. 2003. V. 41. № 1. 1003.
- 49. Карпов И.В., Борчевкина О.П., Васильев П.А. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 4. С. 63.
- 50. *Григорьев Г.И.* // Изв. вузов. Радиофизика. 1999. Т. 42. № 1. С. 3.
- Дьяков Ю.А., Курдяева Ю.А., Борчевкина О.П. и др. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 4. С. 56.
- 52. Борчевкина О.П., Коренькова Н.А., Лещенко В.С. и др. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 10. С. 80.
- Голубков Г.В., Адамсон С.О., Борчевкина О.П. и др. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 5. С. 53.
- 54. Жеребцов Г.А., Перевалова Н.П., Шпынев Б.Г. и др. Волновые процессы в атмосфере Земли и их влияние на ионосферу. М.: ГЕОС, 2020.

- *Qihou I Zhou.* // Geophys. Res. Lett. 2000. V. 27. № 12. P. 1803.
- 56. Eswaraiah S., Venkat Ratnam M., Krishna Murthy B.V., Vijaya Bhaskara Rao S. // J. Geophys. Res. 2011. V. 116. № D22. P. D22117.
- 57. *Мингалев И.В., Мингалев В.С.* // Математ. моделирование. 2005. Т. 17. № 5. С. 24.
- 58. Криволуцкий А.А., Черепанова Л.А., Выошкова Т.Ю., Репнев А.И. // Геомагнетизм и аэрономия 2015. Т. 55. № 4. С. 483.
- Tolmacheva A.V., Bakhmetieva N.V., Grigoriev G.I., Kalinina E.E. // Adv. Space Res. 2015. V. 56. P. 1185.
- 60. Бахматьева Н.В., Бубукина В.Н., Вяхирев В.Д. и др. // Хим. физика. 2017. Т. 36. № 12. С. 44.
- Бахметьева Н.В. Способ определения атомной массы металлических ионов в спорадическом слое E (E<sub>s</sub>): Патент РФ 2749169 // Б.И. 2018 № 19.
- 62. Бахметьева Н.В., Григорьев Г.И., Толмачёва А.В. // Изв. вузов. Радиофизика. 2010. Т. 53. № 11. С. 695.
- Tolmacheva A.V., Bakhmetieva N.V., Grigoriev G.I., Egerev M.N. // Adv. Space Res. 2019. V. 64. № 10. P. 1968.

# —— ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА АТМОСФЕРНЫХ ЯВЛЕНИЙ ——

УДК 550.388.2

# ПРЕДПОСЫЛКИ К МОДИФИКАЦИИ БЛОКА РАСЧЕТА ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА В ИОНОСФЕРЕ В МОДЕЛИ ВЕРХНЕЙ АТМОСФЕРЫ

© 2022 г. В. В. Клименко<sup>1</sup>, В. В. Денисенко<sup>2</sup>, М. В. Клименко<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Калининградский филиал института земного магнетизма, ионосферы и распространения радиоволн им. Н.В. Пушкова Российской академии наук, Калининград, Россия

<sup>2</sup>Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, Красноярск, Россия

\*E-mail: maksim.klimenko@mail.ru Поступила в редакцию 19.04.2022; после доработки 06.05.2022; принята в печать 20.05.2022

Приведены результаты сравнения точности и быстродействия двух численных алгоритмов расчета электрического потенциала в ионосфере Земли. Рассмотрены несколько тестовых задач, для которых имеются точные аналитические решения. Показано, что оба подхода могут быть использованы для расчета электрического потенциала в моделях верхней атмосферы, в том числе в областях экваториальной электроструи. Совместное использование метода конечных элементов и многосеточного метода Федоренко с предварительным переходом к задаче для специальных потенциалов приводит к значительно более точному и быстрому решению двумерного уравнения электропроводности в ионосфере, чем метод, используемый ранее в блоке расчета электрического потенциала глобальной самосогласованной модели термосферы – ионосферы – протоносферы.

*Ключевые слова:* ионосфера, электрическое поле, численное моделирование. **DOI:** 10.31857/S0207401X22100077

# 1. ВВЕДЕНИЕ

Ионосфера является средой распространения радиоволн. Через ионосферу осуществляются наземная радиосвязь, навигация воздушных и морских судов, радиолокация и пеленгация. Поэтому необходимо предвидеть те, иногда катастрофические, изменения параметров ионосферы, которые приводят к нарушению, а иногда и к полному исчезновению радиосвязи [1]. Электрические поля и токи оказывают значительное влияние на тепловой баланс, динамику и структуру верхней атмосферы на всех широтах [2–5]. Особенно их роль возрастает в периоды магнитосферных возмущений, когда ионосфера испытывает значительные изменения [6–9].

Для того чтобы получить пространственновременную картину вариаций электрического поля в ионосфере, в каждом конкретном случае данных наблюдений не хватает ни в спокойных условиях, ни тем более во время геомагнитных бурь. Ликвидировать этот недостаток в настоящее время нам помогают самосогласованные модели верхней атмосферы Земли [10, 11]. Одним из основных механизмов переноса плазмы в ионосфере Земли является электромагнитный дрейф, который важно правильно учитывать при моделировании ионосферы, особенно верхней. Для исследования пространственно-временного распределения электрического поля в ионосфере Земли и физических механизмов его генерации разрабатываются численные модели электрического поля в ионосфере. В связи с существованием в ионосфере двух основных типов электрических полей (ионосферного и магнитосферного происхождения) имеется два вида численных моделей: электрического динамо-поля в ионосфере Земли [12-15] и электрического поля магнитосферной конвекции [3, 16-19]. Заметим, что иногда следует учитывать третий источник, а именно глобальную электрическую цепь, связанную с грозовой активностью [20] и полями подземных генераторов [21], электрическое поле которых принимается в расчет только в отдельных случаях, хотя в ночное время оно может иметь важное значение.

В существующих глобальных численных моделях потенциал крупномасштабного электрического поля находится из решения двумерного уравнения электропроводности, которое получается из трехмерного уравнения баланса полного тока в ионосфере интегрированием его вдоль силовых линий геомагнитного поля в предположе-

нии, что продольная проводимость бесконечна. Так, например, организован блок расчета потенциала электрического поля в глобальной самосогласованной модели термосферы – ионосферы – протоносферы (ГСМ ТИП) [22-24]. Результаты расчетов по этой модели использовались для интерпретации вариаций ионосферных параметров в спокойных геомагнитных условиях и во время геомагнитных бурь [25-27]. Следует отметить, что в блоке расчета электрического поля модели ГСМ ТИП используется метод решения эллиптического двумерного уравнения для электрического потенциала в ионосфере, который обладает недостаточно высокой точностью и скоростью сходимости. Предварительные оценки показали, что вследствие этого в значительной мере увеличиваются временные затраты при проведении численных расчетов по модели ГСМ ТИП. В данной статье мы приводим результаты сравнения точности и быстродействия двух численных алгоритмов расчета электрического потенциала в ионосфере Земли.

### 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Основными уравнениями для стационарного электрического поля **E** и плотности тока **j** в ионосфере Земли, которые мы используем в своих численных моделях, являются уравнения, описывающие закон Фарадея, закон сохранения заряда и закон Ома:

$$rot\mathbf{E} = 0, \tag{1}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{j} = q, \tag{2}$$

$$\mathbf{j} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{E},\tag{3}$$

где  $\hat{\sigma}$  — тензор проводимости, **q** — это локальная производная по времени от плотности электрического заряда, приносимого сторонним током, который в стационарном процессе должен быть скомпенсирован током проводимости [28]. Поскольку векторная функция **E** удовлетворяет уравнению (1), может быть введен электрический потенциал *V*, такой что

$$\mathbf{E} = -\mathrm{grad}\,V.\tag{4}$$

Тогда система уравнений (1)–(3) сводится к уравнению электропроводности:

$$-\operatorname{div}\left(\widehat{\sigma}\operatorname{grad}V\right) = q. \tag{5}$$

Трехмерное уравнение (5) приводится к двумерному виду интегрированием по толщине токопроводящего слоя ионосферы вдоль силовых линий геомагнитного поля, проводимость вдоль которых много больше поперечных проводимостей. Решение этого двумерного уравнения мы осуществляем с использованием двух моделей. В

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

первой модели (далее — модель 1 [23]), используемой в модели ГСМ ТИП, решение эллиптического уравнения (5), записанного в разностном виде, осуществляется методом последовательной нижней релаксации при параметре релаксации, равном 0.9. Итерационный процесс осуществляется с наперед заданной точностью 10<sup>-6</sup>. Эта модель электрического поля использовалась для исследования влияния атмосферных приливов [29] и магнитосферно-ионосферных токовых систем [24] на распределение электрического потенциала в ионосфере.

Другая модель (далее – модель 2) представлена в работах [30, 31]. В статье [32] описано, как заменить краевую задачу для электрического потенциала в ионосфере задачей с самосопряженным положительно определенным оператором для специальных потенциалов, и доказан принцип минимума квадратичного функционала энергии. Это позволяет минимизировать функционал вместо решения краевой задачи. Этот вариационный принцип полезен для получения приближенного или численного решения, поскольку позволяет использовать многие классические алгоритмы. Численный метод для такой задачи подробно описан в книге [33], включая новую постановку краевой задачи, метод конечных элементов, многосеточный метод и некоторые тестовые расчеты. В методе конечных элементов используются регулярные неоднородные сетки и кусочно-линейные аппроксимирующие функции. Уравнения метода конечных элементов получены в качестве условий минимума функционала энергии. Для решения этой системы линейных алгебраических уравнений используется многосеточный метод Федоренко. Эффективность разработанного многосеточного метода показана при тестировании и расчетах электрических полей и токов в ионосфере Земли, включая модель, представленную в работе [34]. Типичные примеры рассмотрены далее.

### 3. ОПИСАНИЕ ТЕСТОВЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ

Для сравнения численных результатов двух описанных выше моделей с аналитическими решениями нами рассмотрены несколько идеализированных случаев. При моделировании электрического поля в ионосфере Земли чаще всего используются сферические геомагнитные координаты: коширота и долгота,  $\theta_m$ ,  $\phi_m$ ; при этом геомагнитная широта  $\lambda_m = (\pi/2) - \theta_m$ . Построим некоторую опорную область на плоскости с декартовыми координатами *x*, *y*, точки которой идентифицируют все интересующие нас линии магнитного поля [30]. Преобразуем северную полусферу в единичную окружность с полярными координатами (радиус  $\rho < 1$  и угол  $0 < \alpha < 2\pi$ ):

$$\rho = 1.5 \sin\left(\theta_m\right) / \left[1 + \left(1 - 0.75 \sin^2\left(\theta_m\right)\right)^{1/2}\right], \quad \alpha = \varphi_m.$$

Конформно преобразуем полученный круг в полосу  $0 < x < 2\pi$ , y > 0:

$$y = -\ln(\rho), \quad x = \alpha$$

Поскольку  $x = \alpha = \varphi_m$ , нас интересует решение, которое является периодическим по *x*. Построенная полоса не имеет физического смысла, однако она удобна для численного решения и помогает избежать трудностей, связанных с особенностью проводимости в экваториальной ионосфере [35]. В такой полосе после необходимого геометрического преобразования двумерное уравнение электропроводности, полученное из уравнения (5), выглядит следующим образом:

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left( \Sigma_P \frac{\partial V}{\partial x} + \Sigma_H \frac{\partial V}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( -\Sigma_H \frac{\partial V}{\partial x} + \Sigma_P \frac{\partial V}{\partial y} \right) = Q,$$
(6)

где  $\Sigma_P$  и  $\Sigma_H$  — интегральные проводимости Педерсена и Холла [28], а Q в общем виде определяется тремя источниками. Во-первых, это дивергенция стороннего тока внутри ионосферы, т.е. правая часть уравнения (2), проинтегрированная вдоль магнитной силовой линии. Во-вторых, атмосферные токи  $J_{atm}^N$  и  $J_{atm}^S$ , входящие в ионосферу через концы магнитной силовой линии в Северном и Южном полушариях. В-третьих, магнитосферные токи. В рассматриваемых тестовых задачах атмосферные и магнитосфернно-ионосферные токи отсутствуют.

Граница y = 0 соответствует самым низким магнитным силовым линиям, которые рассматриваются как ионосферные. Их вершины находятся на высоте  $h_{eq} = 90$  км на геомагнитном экваторе, в то время как их самые низкие точки находятся на высоте  $h_1 = 80$  км. Это позволяет избежать нулевой длины этих последних линий и связанных с ними нулевых коэффициентов в уравнении (6). Это также делает ненулевой правую часть в граничном условии, полученном из закона сохранения заряда:

$$\left(-\Sigma_{H}\frac{\partial V}{\partial x}+\Sigma_{P}\frac{\partial V}{\partial y}\right)_{y=0}=J_{eq}^{0}\left(x\right),$$
(7)

где  $J_{eq}^0(x)$  включает в себя атмосферные токи  $J_{atm}^N$ ,  $J_{atm}^S$ , входящие в ионосферу через самые нижние магнитные силовые лини. Рассмотрение проводников в магнитосфере [31] показывает, что авроральные зоны эквивалентны почти идеальным проводникам, поскольку они соединены параллельно с хорошими магнитосферными провод-

никами. Мы аппроксимируем их как идеальные проводники с заданным распределением электрического потенциала V. Поэтому граничное условие имеет вид

$$\left. \mathcal{V} \right|_{y=y_{aur}(x)} = V_{aur}(x). \tag{8}$$

Дифференциальное уравнение в частных производных (6) является уравнением эллиптического типа, и краевая задача (6)—(8) имеет единственное решение [32].

Интегральные проводимости, рассчитанные на полуденном меридиане при низкой солнечной активности в день весеннего равноденствия, аппроксимируем с помощью следующих формул:

$$\Sigma_{P} = \Sigma_{0} \exp\{-\mu(y - y_{e})\}, \ \Sigma_{H} = \beta \Sigma_{P}, \ y_{e} < y < y_{a},$$
$$\Sigma_{P} = \Sigma_{e}, \ \Sigma_{H} = \beta_{e} \Sigma_{e}, \ 0 < y < y_{e},$$
(9)

где  $\Sigma_{0}$ ,  $\mu$ ,  $\beta$ ,  $\beta_{e}$ ,  $\Sigma_{e}$  – заданные константы. Для упрощения выкладок предполагаем непрерывность проводимости Холла:  $\beta \Sigma_{0} = \beta_{e} \Sigma_{e}$ . Слой, соответствующий  $y < y_{e}$ , представляет собой узкую полосу вблизи границы y = 0 и соответствует области экваториальных электроструй. Мы полагаем  $y_{e} = 0.00615$  и  $y_{a} = 1.6265$ , что соответствует высоте h = 120 км и широте 75°, и задаем следующие значения:  $\Sigma_{0} = 200$  См,  $\beta = 1.5$ ,  $\mu = 2$ ,  $\Sigma_{e} = 10$  См,  $\beta_{e} = 30$ . Последние дают значение проводимости Каулинга  $\Sigma_{C} = 9010$  См, интеграл которой в области электроструи 90 < h < 120 км составляет около 270 МСм · м, как в реальной полуденной ионосфере. Граничные условия (7) и (8) в тесте имеют вид

$$J_{y}\big|_{y=0} = 0, \quad V\big|_{y=y_{a}} = V_{0}\cos x, \tag{10}$$

где  $V_0 = 25 \text{ кB}.$ 

Точное решение задачи (6), (10) мы находим как действительную часть комплексной функции V(x, y).

При 
$$0 < y < y_e$$
:

$$V(x, y) = \xi [V_3 \exp(y - y_e) + V_4 \exp(y_e - y)] e^{ix},$$

где

$$V_3 = \left[1 + \frac{1 - i\beta_e}{1 + i\beta_e} \exp(-2y_e)\right]^{-1}, \quad V_4 = 1 - V_3$$

*і* — мнимая единица.

При  $y_e < y < y_a$ 

$$V(x, y) =$$
  
=  $\xi (V_1 \exp \{\lambda_1 (y - y_e)\} + V_2 \exp \{\lambda_2 (y - y_e)\})e^{ix}$ , (11)  
где



**Рис. 1.** Входные параметры и результаты расчетов для третьей задачи: *a* – широтные профили проводимостей Холла (сплошная линия) и Педерсена (точечная линия); *б* – изолинии аналитического решения для электрического потенциала в кВ; *в* и *г* – изолинии погрешностей расчета потенциала в кВ в моделях 1 и 2 соответственно, в виде разностей между аналитическим и численными решениями.

$$\begin{split} \lambda_{1,2} &= -\frac{\mu}{2} + \left[ \left( \frac{\mu}{2} \right)^2 + 1 + i\beta\mu \right]^{1/2}, \\ V_1 &= \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \left[ \frac{\sum_{P_0} (V_3 - V_4) - \lambda_2}{\sum_0} \right], \quad V_2 = 1 - V_1, \\ \xi &= V_0 / [V_1 \exp\{\lambda_1 (y_a - y_e)\} + V_2 \exp\{\lambda_2 (y_a - y_e)\}]. \end{split}$$

Если исключить область электроструи и определить во всей области

$$\Sigma_P = \Sigma_0 \exp(-\mu y), \quad \Sigma_H = \beta \Sigma_P, \quad 0 < y < y_a$$

получается более простой тест. Для тех же граничных условий (см. (10)) точное решение имеет вид (11) с теми же  $\lambda_{1,2}$ , но

$$V_1 = \frac{-\lambda_2 + i\beta}{\lambda_1 - \lambda_2}, \quad V_2 = 1 - V_1,$$
  
$$\xi = V_0 / [V_1 \exp(\lambda_1 y_a) + V_2 \exp(\lambda_2 y_a)]$$

Несложно проверить, что это решение получается из предыдущего при  $y_e \rightarrow 0$ .

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ

Для тестирования двух выбранных нами методов решения уравнения электропроводности для электрического потенциала в ионосфере Земли на точность и быстродействие были рассмотрены пять задач, имеющих точные аналитические решения. Решение двух простейших задач, в первой из которой в формулах (9) используются следующие значения:  $\Sigma_0 = 1$  См,  $\mu = 0$ ,  $\beta = 0$  при  $0 < y < y_a$ (т.е.  $\Sigma_P = 1$  См, а  $\Sigma_H = 0$  См), а во второй  $\Sigma_0 = 1$  См,  $\mu = 0, \beta = 1.5$  при 0 < y < y<sub>a</sub> (т.е.  $\Sigma_P = 1$  См, а  $\Sigma_H =$ = 1.5 См), в данной статье не приводится. Мы лишь отмечаем высокую точность обоих методов при решении этих двух идеализированных задач. При этом точность в методе, используемом в модели 2 выше вблизи экватора в 4-6 раз, а время счета в 3 раза меньше, чем в методе, используемом в модели 1.

В третьей задаче в формулах (9) рассматривалась область  $0 < y < y_a$  при  $\Sigma_0 = 200$  См,  $\mu = 2$ ,  $\beta = 0$  (т.е.  $\Sigma_p = 200 \exp(-2y)$ , а  $\Sigma_H = 0$ ). На рис. 1 показаны для случая 3-ей задачи широтные профили проводимостей Холла и Педерсена и анали-



Рис. 2. То же, что на рис. 1 для четвертой задачи.

тическое решение в отсутствие холловской проводимости и при проводимости Педерсена, изменяющейся по экспоненте от экватора к высоким широтам и постоянной по долготе. На этом же рисунке показаны погрешности моделей 2 и 1 в виде разностей между аналитическим и модельными решениями. Видно, что точность модели 2 в 5–15 раз выше, чем модели 1. Максимальная погрешность модели 1 вблизи экватора составила 0.15 кВ, а в высоких широтах – 0.3 кВ, тогда как погрешность модели 2 там же составила 0.01 кВ и 0.05 кВ соответственно. При этом время счета в 3–5 раз меньше для модели 2 по сравнению с моделью 1.

В четвертой задаче так же, как и в трех предыдущих, в формулах (9) рассматривалась область  $0 < y < y_a$  при  $\Sigma_0 = 200$  См,  $\mu = 2$ ,  $\beta = 1.5$  (т.е.  $\Sigma_P = 200 \exp(-2y)$ , а  $\Sigma_H = 300 \exp(-2y)$ ). На рис. 2 для четвертой задачи показаны широтные профили проводимостей Холла и Педерсена и аналитическое решение при проводимостях Педерсена и Холла, изменяющихся по экспоненте от экватора к высоким широтам и постоянных по долготе. Также на этом рисунке показаны погрешности моделей 2 и 1. Видно, что точность модели 2 в 8– 20 раз выше, чем модели 1. Максимальная погрешность модели 1 вблизи экватора составила 0.2 кВ, а в высоких широтах — 0.4 кВ, тогда как погрешность модели 2 там же составила 0.01 и 0.05 кВ соответственно. При этом время счета в 3 раза меньше для модели 2 по сравнению с моделью 1.

Пятая, наиболее общая задача подробно описана в разд. 2. Она отличается от предыдущих тем, что в ней учитывается область экваториальной электроструи с высокими значениями проводимости Каулинга  $\Sigma_C$ . На рис. 3 для пятой задачи показаны широтные профили проводимостей Холла, Педерсена и Каулинга, фрагмент их высотных профилей на геомагнитном экваторе и аппроксимирующие их функции, позволяющие получить аналитическое решение. Следует отметить, что заданные высотные профили проводимостей близки к среднеклиматическим профилям, полученным с использованием справочной модели ионосферы IRI [36] и представленным на рис. 3. На этом же рисунке показаны распределения электрического потенциала и погрешности, полученные для этого случая в моделях 2 и 1. Различия аналитического и модельных распределений электрического потенциала для этого случая в высоких и средних широтах практически не видны. Вблизи экватора эти различия возрастают. Точность модели 2 в 3-5 раз выше, чем моде-



**Рис. 3.** Входные параметры и результаты расчетов для пятой задачи: a — широтные профили проводимостей Холла (штриховые линии), Педерсена (точечные линии) и Каулинга (сплошные линии);  $\delta$  — фрагмент высотных профилей этих проводимостей на геомагнитном экваторе (черным цветом показаны проводимости, рассчитанные с использованием модели IRI, серым — аппроксимации этих проводимостей, описанные в разд.2); e — изолинии аналитического решения для электрического потенциала в кВ; e и  $\partial$  — изолинии распределений электрического потенциала в кВ; e и  $\omega$  — изолинии погрешностей расчета потенциала в кВ в моделях 1 и 2 соответственно.

ли 1. Максимальная погрешность модели 1 вблизи экватора составила 0.1 кВ (~8%), а в высоких широтах — 0.15 кВ (~0.6%), тогда как погрешность модели 2 там же составила 0.015 кВ (~1.5%) и 0.05 кВ (~0.2%) соответственно. При этом время счета в 3 раза меньше для модели 2.

Поскольку слой экваториальных электроструй, соответствующий  $0 < y < y_e$ , соответствующий магнитным силовым линиям, вершины которых находятся в интервале высот 90—120 км, в тысячи раз тоньше, чем длина границы (40000 км), его можно эффективно изучать как пограничный слой. Такая теория была разработана Ричмондом [37]. Соответствующее моделирование погранич-

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА том 41 № 10 2022

ного слоя со специальным граничным условием, заменяющим условие (7), было представлено в книге [33], включая постановку задачи с самосопряженным положительно определенным оператором и ее численную версию. При использовании такой модификации нашего численного метода время вычислений для анализируемого теста сокращается примерно в 7 раз, при этом погрешность остается прежней.

### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье представлены результаты тестовых расчетов двух численных моделей потенциала

электрического поля в ионосфере Земли. Погрешности моделей, полученные при решении различных задач, показали, что обе модели могут быть использованы для расчета электрического потенциала в моделях верхней атмосферы, в том числе в области экваториальной электроструи. Однако совместное использование метода конечных элементов и многосеточного метода Федоренко с предварительным переходом к задаче для специальных потенциалов приводит к значительно более точному и быстрому решению двумерного уравнения электропроводности в ионосфере, чем метод конечных разностей, используемый в блоке расчета электрического потенциала модели ГСМ ТИП.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантом Российского научного фонда № 21-17-00208.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Котова Д.С., Захаренкова И.Е., Клименко М.В. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 4. С. 80.
- Pudovkin M.I. // Space Sci. Revs. 1974. V. 16. № 5–6. P. 727.
- Денисенко В.В., Еркаев Н.В., Китаев А.В., Матвеенков И.Т. Математическое моделирование магнитосферных процессов. Новосибирск: Наука, СО, 1992.
- Heelis R.A. // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 2004. V. 66. № 10. P. 825.
- 5. Abdu M.A. // Adv. Space Res. 2005. V. 35. P. 771.
- 6. Ляцкий В.Б. Токовые системы магнитосферноионосферных возмущений. Л.: Наука, 1978.
- Пономарев Е.А. Механизмы магнитосферных суббурь / Под. ред. Гальперина Ю.И. М.: Наука, 1985.
- Wolf R.A., Spiro R.W., Sazykin S., Toffoletto F.R. // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 2007. V. 69. № 3. P. 288.
- 9. Голубков М.Г., Суворова А.В., Дмитриев А.В., Голубков Г.В. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 10. С. 69.
- 10. Maruyama N., Richmond A.D., Fuller-Rowell T.J. et al. // Geophys. Res. Lett. 2005. V. 32. № 17. P. L17105.
- 11. Князева М.А., Намгаладзе А.А., Белоушко К.Е. // Хим. физика. 2015. Т. 34. № 10. С. 12.
- Фидель Б.В. // Исслед. по геомагнетизму, аэрон. и физике. Солнца. 1982. № 62. С. 85.
- Singh A., Cole K.D. // J. Atmos. Terr. Phys. 1987. V. 49. № 6. P. 521.
- Richmond A.D. // Pure Appl. Geophys. 1989. V. 131. № 3. P. 413.

- Du J., Stening R.J. // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 1999. V. 61. P. 925.
- Vasylíünas V.M. // Particles and Fields in the Magnetosphere / McCormac, B.M. Dordrecht: D. Reidel, 1970. P. 60.
- Пудовкин М.И., Зайцева С.А., Захаров В.Е. // Полярная ионосфера и магнитосферно-ионосферные связи. Якутск: ИКФИА, 1984. С. 3.
- Fontaine D., Blanc M., Reinhart L., Glowinski R. // J. Geophys. Res. 1985. V. A90. № 9. P. 8343.
- Toffoletto F.R., Sazykin S., Spiro R.W. et al. // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 2004. V. 66. P. 1361.
- Roble R.G., Tzur I. Earth Electrical Environment. Ch. 15. Washington, DC: National Academy Press, 1986. P. 206.
- 21. Денисенко В.В. // Хим. физика. 2015. Т. 34. № 10. С. 44.
- Korenkov Yu.N., Klimenko V.V., Forster M. et al. // J. Geophys. Res. 1998. V. 103. № A7. P. 14697.
- Клименко М.В., Клименко В.В., Брюханов В.В.// Геомагнетизм и аэрономия. 2006. Т. 46. № 4. С. 485.
- Клименко В.В., Лукьянова Р.Ю., Клименко М.В. // Хим. физика. 2013. Т. 32. № 9. С. 42.
- Клименко М.В., Клименко В.В., Захаренкова И.Е. и др. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 10. С. 83.
- 26. Клименко М.В., Клименко В.В., Ратовский К.Г. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 5. С. 75.
- 27. Клименко М.В., Ратовский К.Г., Клименко В.В. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 10. С. 85.
- 28. *Kelley M.C.* The Earth's ionosphere: plasma physics and electrodynamics. Burlington: Acad. Press, 2009.
- Клименко В.В., Клименко М.В., Бессараб Ф.С. и др. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 7. С. 86.
- 30. *Denisenko V.V., Zamay S.S.* // Planet. Space. Sci. 1992. V. 40. № 7. P. 941.
- 31. Denisenko V.V. // 2018; http://arxiv.org/abs/1802.07955
- 32. *Денисенко В.В.* // Сиб. мат. журн. 1994. Т. 35. № 3. С. 554.
- Денисенко В.В. Энергетические методы для эллиптических уравнений с несимметричными коэффициентами. Новосибирск: Изд-тво СО РАН, 1995.
- Denisenko V.V., Rycroft M.J. // J. Atmos. Sol.-Terr. Phys. 2021. V. 221. № 3. P. 105704.
- Richmond A.D., Maute A. Modeling the Ionosphere– Thermosphere System. Ch. 6. Washington, DC: American Geophysical Union, 2014.
- Bilitza D., Altadill D., Truhlik V. et al. // Space Weather. 2017. V. 15. P. 418.
- 37. *Richmond A.D.* // J. Atmos. Terr. Phys. 1973. V. 35. № 6. P. 1083.